Kvantummechanika XI.

Az átlagérték időbeli változása, a klasszikus mechanikával való kapcsolat

→ Az átlagérték időbeni változása (Ehrenfest-tétel) a X. tétel végén megtalálható.

Kapcsolat a klasszikus mechanikával

→ Az időfüggő Schrödinger-egyenlet:

$$\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\psi}{\partial t} + \hat{H}\psi = 0$$

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2 + V(x,y,z)$$

→ Klasszikus határeset: az a távolság, amin a potenciál észrevehetően megváltozik, sokkal nagyobb a hullámhossznál.

$$\psi = A(x,y,z,t)\, e^{\frac{iS(x,y,z,t)}{\hbar}}$$

→ Kiszámoljuk $\frac{\partial\psi}{\partial t}$-t és $\vec{\nabla}\psi$-t:

$$\frac{\partial\psi}{\partial t} = e^{\frac{iS}{\hbar}}\left[\frac{\partial A}{\partial t} + \frac{i}{\hbar}A\frac{\partial S}{\partial t}\right];$$

$$\vec{\nabla}^2\psi = \vec{\nabla}(\vec{\nabla}\psi) = \vec{\nabla}\left[\vec{\nabla}A\, e^{\frac{iS}{\hbar}} + A\frac{i}{\hbar}\vec{\nabla}S\, e^{\frac{iS}{\hbar}}\right] =$$

$$= \vec{\nabla}^2 A\, e^{\frac{iS}{\hbar}} + \frac{i}{\hbar}\vec{\nabla}A\vec{\nabla}S\, e^{iS/\hbar} + \frac{i}{\hbar}\vec{\nabla}A\vec{\nabla}S\, e^{iS/\hbar} - \frac{1}{\hbar^2}A(\vec{\nabla}S)^2 e^{iS/\hbar} + \frac{i}{\hbar}A\vec{\nabla}^2 S\, e^{iS/\hbar} =$$

$$= e^{\frac{iS}{\hbar}}\left[\vec{\nabla}^2 A + \frac{2i}{\hbar}\vec{\nabla}A\vec{\nabla}S - \frac{1}{\hbar^2}A(\vec{\nabla}S)^2 + \frac{i}{\hbar}A\vec{\nabla}^2 S\right]$$

→ Ezeket behelyettesítjük az időfüggő Schrödinger-egyenletbe: ($e^{\frac{iS}{\hbar}}$-val egysz.)

$$\frac{\hbar}{i}\frac{\partial A}{\partial t} + A\frac{\partial S}{\partial t} - \frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2 A + \frac{\hbar}{im}\vec{\nabla}A\vec{\nabla}S + \frac{1}{2m}A(\vec{\nabla}S)^2 + \frac{\hbar}{2mi}A\vec{\nabla}^2 S + VA = 0$$

→ Szétválasztjuk a valós és képzetes részeket:

↳

$$\frac{\partial S}{\partial t} - \frac{\hbar^2}{2mA}\vec{\nabla}^2 A + \frac{1}{2m}\left(\vec{\nabla}S\right)^2 + V = 0$$

$$\frac{\partial A}{\partial t} + \frac{1}{m}\vec{\nabla}A\vec{\nabla}S + \frac{1}{2m}A\vec{\nabla}^2 S = 0$$

→ A $\hbar \to 0$ esetben a Hamilton-Jacobi egyenletet kapjuk vissza.

$$\boxed{H + \frac{\partial S}{\partial t} = 0}$$

→ ide még jön a hullámfüggvény szétesülése.

→ Az első egyenlet ezért: $\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2m}\left(\vec{\nabla}S\right)^2 + U = 0$ (Hamilton-Jacobi)

(A rendszer S hatását határozza meg.)

→ A másodikat 2a-val szorozva

$$\frac{\partial a^2}{\partial t} + \vec{\nabla}\left(a^2\vec{\nabla}S\right) = 0$$

↳ a^2 annak a valószínűsége-sűrűsége, hogy a rendszer a tér valamely helyén megtalálható. ($|\psi|^2 = a^2$); $\vec{\nabla}S/m = \vec{p}/m$ a rendszer klasszikus $\vec{v}$ sebessége. Ez a klasszikus kontinuitási egyenlet → A valószínűségsűrűség a klasszikus mechanika szerint változtatja a helyét, minden pontban klasszikus $\vec{v}$ sebességgel.