Symetrie jednorozměrné Schrödingerovy rovnice

Zadání

1. Schrödingerova rovnice pro komplexní vlnovou funkci

$$\mathrm{i}\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t} = -\frac{1}{2}\frac{\partial^2\psi(x,t)}{\partial x^2} + V(x)\psi(x,t) \tag{1}$$

je ekvivalentní systému dvou parciálních diferenciálních rovnic (PDR) pro reálnou a imaginární část vlnové funkce $\psi(x,t) = \psi^R(x,t) + \mathrm{i}\psi^I(x,t)$. Ukažte, že tento systém PDR je invariantní vůči současnému škálování ψ^R a ψ^I a také vůči rotaci v prostoru závislých proměnných (ψ^R, ψ^I).

2. Vyjádřete lagrangián

$$L[\psi,\psi^*] = \frac{\mathrm{i}}{2}\left(\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial t} - \psi\frac{\partial\psi^*}{\partial t}\right) - \frac{1}{2}\frac{\partial\psi^*}{\partial x}\frac{\partial\psi}{\partial x} - V(x)\psi^*\psi \tag{2}$$

pomocí ψ^R a ψ^I a ověřte, že parciální diferenciální rovnice, které ψ^R a ψ^I splňují, jsou Eulerovy-Lagrangeovy rovnice plynoucí z tohoto lagrangiánu.

Která ze dvou bodových symetrií uvažovaných v 1. bodě je variační symetrií a který zákon zachování této symetrii odpovídá?

3. Schrödingerova rovnice pro volnou částici ($V(x) = 0$) je podobná rovnici vedení tepla

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\,,$$

jejíž jeden generátor bodové symetrie má tvar

$$X = 2t\frac{\partial}{\partial x} - xu\frac{\partial}{\partial u}\,. \tag{3}$$

Nalezněte obdobný infinitezimální generátor bodové symetrie Schrödingerovy rovnice pro volnou částici (uvažujte obecně komplexní transformace komplexních proměnných) a využijte této symetrie k nalezení partikulárního řešení této rovnice.

Řešení

V následujícím textu budeme parciální derivaci často zapisovat zkráceným způsobem pomocí indexu, kterému předchází čárka, např. $\psi_{,x} = \frac{\partial \psi}{\partial x}$. Totální derivaci budeme značit D_x, kde x je nezávislá proměnná, podle které derivujeme, takže např.

$$\mathrm{D}_x F(x,t,\psi(x,t),\psi_{,x}(x,t),\psi_{,t}(x,t)) = \frac{\partial F}{\partial x} + \psi_{,x}\frac{\partial F}{\partial \psi} + \psi_{,xx}\frac{\partial F}{\partial \psi_x} + \psi_{,tx}\frac{\partial F}{\partial \psi_t} \tag{4}$$

a podobně pro funkce F závislé na vyšších derivacích.

1. Přímým dosazením $\psi(x,t) = \psi^R(x,t) + \mathrm{i}\psi^I(x,t)$ a porovnáním reálných a imaginárních částí dostaneme

$$\psi^R_{,t} = -\frac{1}{2}\psi^I_{,xx} + V\psi^I\,, \tag{5}$$

$$\psi^I_{,t} = \frac{1}{2}\psi^R_{,xx} - V\psi^R\,. \tag{6}$$

K ověření, že tento systém je invariantní vůči zadaným bodovým symetriím, použijeme rozšíření příslušných generátorů a infinitezimální podmínky invariance. Infinitezimální generátory pro škálování a rotaci v prostoru závislých proměnných (ψ^R, ψ^I) mají tvar

$$X_1 = \psi^R\frac{\partial}{\partial \psi^R} + \psi^I\frac{\partial}{\partial \psi^I}\,, \tag{7}$$

$$X_2 = \psi^I\frac{\partial}{\partial \psi^R} - \psi^R\frac{\partial}{\partial \psi^I}\,. \tag{8}$$

Jejich druhá rozšíření získaná standardním postupem jsou (vypisujeme pouze členy, které budeme potřebovat)

$$X_1^{(2)} = X_1 + \psi^R_{,t}\frac{\partial}{\partial \psi^R_{,t}} + \psi^I_{,t}\frac{\partial}{\partial \psi^I_{,t}} + \psi^R_{,x}\frac{\partial}{\partial \psi^R_{,x}} + \psi^I_{,x}\frac{\partial}{\partial \psi^I_{,x}} + \psi^R_{,xx}\frac{\partial}{\partial \psi^R_{,xx}} + \psi^I_{,xx}\frac{\partial}{\partial \psi^I_{,xx}} + \cdots\,, \tag{9}$$

$$X_2^{(2)} = X_2 + \psi^I_{,t}\frac{\partial}{\partial \psi^R_{,t}} - \psi^R_{,t}\frac{\partial}{\partial \psi^I_{,t}} + \psi^I_{,x}\frac{\partial}{\partial \psi^R_{,x}} - \psi^R_{,x}\frac{\partial}{\partial \psi^I_{,x}} + \psi^I_{,xx}\frac{\partial}{\partial \psi^R_{,xx}} - \psi^R_{,xx}\frac{\partial}{\partial \psi^I_{,xx}} + \cdots \tag{10}$$

a infinitezimální podmínky invariance dávají

$$\begin{aligned}
X_1^{(2)}(\psi^R_{,t} + \tfrac{1}{2}\psi^I_{,xx} - V\psi^I) &= \psi^R_{,t} + \tfrac{1}{2}\psi^I_{,xx} - V\psi^I = 0\,,\\
X_1^{(2)}(\psi^I_{,t} - \tfrac{1}{2}\psi^R_{,xx} + V\psi^R) &= \psi^I_{,t} - \tfrac{1}{2}\psi^R_{,xx} + V\psi^R = 0\,,\\
X_2^{(2)}(\psi^R_{,t} + \tfrac{1}{2}\psi^I_{,xx} - V\psi^I) &= \psi^I_{,t} - \tfrac{1}{2}\psi^R_{,xx} + V\psi^R = 0\,,\\
X_2^{(2)}(\psi^I_{,t} - \tfrac{1}{2}\psi^R_{,xx} + V\psi^R) &= -\psi^R_{,t} - \tfrac{1}{2}\psi^I_{,xx} + V\psi^I = 0\,,
\end{aligned}$$

kde poslední rovnosti plynou z předpokladu, že ψ^R a ψ^I splňují rovnice (5) a (6).

2. Dosazením za $\psi = \psi^R + \mathrm{i}\psi^I$ do lagrangiánu (2) dostaneme (imaginární část vyjde identicky rovna nule)

$$L[\psi^R,\psi^I] = \psi^I\psi^R_{,t} - \psi^R\psi^I_{,t} - \frac{1}{2}\left[(\psi^R_{,x})^2 + (\psi^I_{,x})^2\right] - V(x)\left[(\psi^R)^2 + (\psi^I)^2\right] \tag{11}$$

a Eulerovy-Lagrangeovy rovnice mají tvar

$$\begin{aligned}
\frac{\partial L}{\partial \psi^R} - \mathrm{D}_x\frac{\partial L}{\partial \psi^R_{,x}} - \mathrm{D}_t\frac{\partial L}{\partial \psi^R_{,t}} &= -2\psi^I_{,t} + \psi^R_{,xx} - 2V\psi^R = 0\,,\\
\frac{\partial L}{\partial \psi^I} - \mathrm{D}_x\frac{\partial L}{\partial \psi^I_{,x}} - \mathrm{D}_t\frac{\partial L}{\partial \psi^I_{,t}} &= 2\psi^R_{,t} + \psi^I_{,xx} - 2V\psi^I = 0\,,
\end{aligned}$$

které jsou až na konstantní faktor shodné s rovnicemi (5) a (6).

Aby bodové symetrie generované operátory (7) a (8) byly též variačními symetriemi, musí být pro ně splněna infinitezimální podmínka invariance variačního funkcionálu

$$X^{(1)}L + L(\mathrm{D}_x\xi^x + \mathrm{D}_t\xi^t) = 0\,. \tag{12}$$

V našem případě máme $\xi^x = 0, \xi^t = 0$ a dosazením z (9) a (10) snadno ověříme, že

$$X_1^{(1)}L = 2L \neq 0\,, \qquad X_2^{(1)}L = 0\,,$$

neboli variační symetrií je rotace v prostoru (ψ^R, ψ^I), nikoli škálování.

Obecný tvar zákona zachování pro soustavu PDR (5) a (6) zapíšeme ve tvaru

$$\mathrm{Div}P = \mathrm{D}_x P^x + \mathrm{D}_t P^t = 0\,, \tag{13}$$

přičemž z teorému E. Noetherové plyne, že pokud je infinitezimální operátor (8) generátorem variační symetrie, pak veličiny P^x a P^t vypočteme z lagrangiánu (11) následovně

$$P^x = -\psi^I \frac{\partial L}{\partial \psi^R_{,x}} + \psi^R \frac{\partial L}{\partial \psi^I_{,x}} = \psi^I \psi^R_{,x} - \psi^R \psi^I_{,x}\,, \tag{14}$$

$$P^t = -\psi^I \frac{\partial L}{\partial \psi^R_{,t}} + \psi^R \frac{\partial L}{\partial \psi^I_{,t}} = -(\psi^I)^2 - (\psi^R)^2\,. \tag{15}$$

Ve výrazu pro P^t snadno rozpoznáme (až na znaménko) hustotu pravděpodobnosti $\rho(x,t) = \psi^* \psi = (\psi^I)^2 + (\psi^R)^2$ a P^x je (až na znaménko) hustota toku pravděpodobnosti

$$j(x,t) = \frac{\mathrm{i}}{2}(\psi \psi^*_{,x} - \psi^* \psi_{,x}) = \psi^R \psi^I_{,x} - \psi^I \psi^R_{,x}\,.$$

Získaný zákon zachování (13) není tedy nic jiného, než známá rovnice kontinuity z kvantové mechaniky.

3. Porovnáme-li rovnici vedení tepla s Schrödingerovou rovnicí pro volnou částici

$$\mathrm{i}\psi_{,t} = -\frac{1}{2}\psi_{,xx}\,, \tag{16}$$

zjistíme, že lze rovnici vedení tepla převést na Schrödingerovu rovnici formální záměnou $t \to \mathrm{i}t/2$. Lze proto očekávat, že generátorem symetrie Schrödingerovy rovnice (16) bude operátor (3), pokud v něm provedeme zmíněnou formální záměnu, tj.

$$X = \mathrm{i}t \frac{\partial}{\partial x} - x\psi \frac{\partial}{\partial \psi}\,. \tag{17}$$

Čtenář se může snadno přesvědčit, že infinitezimální podmínka invariance je pro tento generátor splněna.

K tomu, abychom nalezli partikulární řešení $\psi = f(x,t)$ rovnice (16) s využitím této symetrie, můžeme použít několik postupů. Předvedeme si zde dva postupy, které vedou na dvě různá řešení.

(a) **Konečná transformace triviálního (konstantního) řešení $\psi = A$**

Konečnou transformaci proměnných x, t, ψ odpovídající generátoru (17) získáme řešením soustavy obyčejných diferenciálních rovnic

$$\begin{aligned} \frac{\mathrm{d}\tilde{x}}{\mathrm{d}\varepsilon} &= \mathrm{i}\tilde{t}\,, & \tilde{x}(0) &= x\,, \\ \frac{\mathrm{d}\tilde{t}}{\mathrm{d}\varepsilon} &= 0\,, & \tilde{t}(0) &= t\,, \\ \frac{\mathrm{d}\tilde{\psi}}{\mathrm{d}\varepsilon} &= -\tilde{x}\tilde{\psi}\,, & \tilde{\psi}(0) &= \psi\,. \end{aligned} \tag{18}$$

Řešení druhé rovnice je triviální $\tilde{t} = t$ a po dosazení za $\tilde{t}$ do první rovnice a integraci dostaneme

$$\tilde{x} = \mathrm{i}t\varepsilon + x\,.$$

Poslední rovnici přepíšeme po dosazení za $\tilde{x}$ do tvaru

$$\frac{\mathrm{d}\tilde{\psi}}{\tilde{\psi}} = -(\mathrm{i}t\varepsilon + x)\mathrm{d}\varepsilon\,.$$

Integrací a využitím počáteční podmínky nakonec obdržíme

$$\tilde{\psi} = \psi \mathrm{e}^{-x\varepsilon - \frac{\mathrm{i}}{2}t\varepsilon^2}.$$

Nové řešení nyní získáme z řešení $\psi = f(x,t) = A$ transformací

$$\tilde{\psi}(\tilde{x},\tilde{t}) = f(x,t)\mathrm{e}^{-x\varepsilon-\frac{\mathrm{i}}{2}t\varepsilon^2} = f(\tilde{x}-\mathrm{i}\tilde{t}\varepsilon,\tilde{t})\mathrm{e}^{-(\tilde{x}-\mathrm{i}\tilde{t}\varepsilon)\varepsilon-\frac{\mathrm{i}}{2}\tilde{t}\varepsilon^2},$$

neboli

$$\tilde{\psi}(\tilde{x},\tilde{t}) = A\mathrm{e}^{-\tilde{x}\varepsilon+\frac{\mathrm{i}}{2}\tilde{t}\varepsilon^2}.$$

Pro komplexní parametr $\varepsilon = \mathrm{i}k$ jde o standardní řešení ve tvaru rovinných vln

$$\tilde{\psi}(\tilde{x},\tilde{t}) = A\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E\tilde{t}-\mathrm{i}k\tilde{x}},$$

kde energie je dána vztahem $E = k^2/2$.

(b) **Invariantní řešení metodou přímé substituce**
Invariantní řešení $\psi = f(x,t)$ Schrödingerovy rovnice (16) musí splňovat dodatečnou podmínku

$$X(\psi = f(x,t))|_{\psi=f(x,t)} = 0\,, \quad \text{neboli} \quad \frac{\partial f}{\partial x} = \frac{\mathrm{i}xf}{t}\,. \tag{19}$$

Derivováním podle x obdržíme

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} = \frac{\mathrm{i}f}{t} + \frac{\mathrm{i}x}{t}\frac{\partial f}{\partial x} = \frac{\mathrm{i}f}{t} - \frac{x^2 f}{t^2} \tag{20}$$

a dosazením do (16) dostaneme

$$\mathrm{i}\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{1}{2}\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} = \mathrm{i}\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\mathrm{i}f}{2t} - \frac{x^2 f}{2t^2} = 0\,.$$

V této rovnici hraje x roli parametru a můžeme ji tedy řešit jako obyčejnou diferenciální rovnici pro funkci $f(x,t)$ závislou „pouze“ na čase t. Přímou integrací dostáváme

$$\ln f(x,t) = \frac{\mathrm{i}x^2}{2t} - \frac{1}{2}\ln t + c(x)\,,$$

kde integrační konstanta je libovolnou funkcí x a položíme ji rovnu $c(x) = \ln A(x)$. Pro funkci $f(x,t)$ pak máme obecný předpis

$$f(x,t) = \frac{A(x)}{\sqrt{t}}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}x^2}{2t}}.$$

Aby tato funkce byla invariantním řešením Schrödingerovy rovnice (16), musíme ještě určit funkci $A(x)$ tak, aby byla splněna podmínka (19). Dosazením obdržíme jednoduchou podmínku

$$\frac{\mathrm{d}A(x)}{\mathrm{d}x} = 0\,,$$

neboli $A(x) = A$ musí být konstantní. Obdrželi jsme další partikulární řešení Schrödingerovy rovnice (16)

$$\psi(x,t) = \frac{A}{\sqrt{t}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}x^2/2t}\,.$$