Модель 2: Основные особенности квантовой механики

Лекция – практика 6.

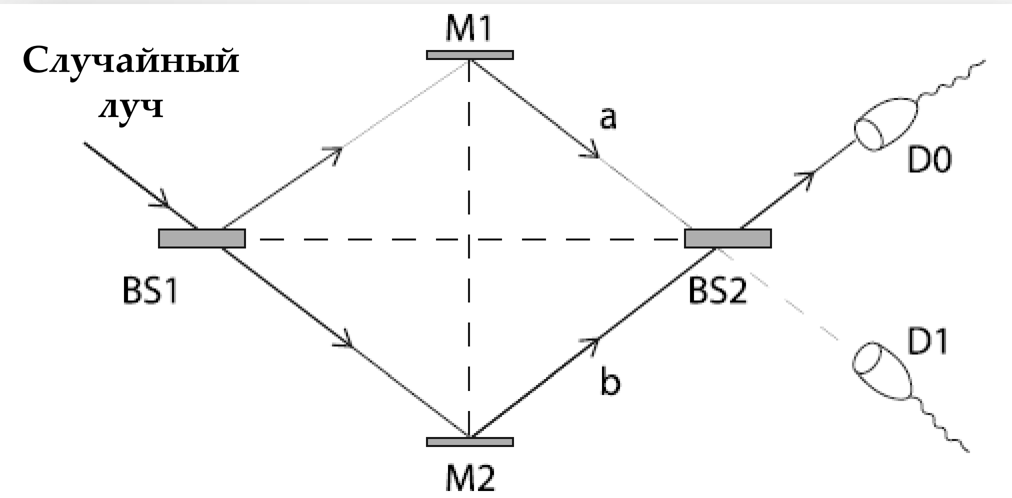
О чем говорим сегодня?

1. Линейность квантовой механики
2. Необходимость квантовых чисел
3. Потеря детерменизма
4. Необычные закономерности суперпозиции
5. Запутанность

4. Квантовая суперпозиция

Классическая физика	**Если мы имеем электрическое поле и другое ЭП, то при суперпозиции мы будем иметь снова ЭП и ничего более**

Интерферометр Маха-Цендера



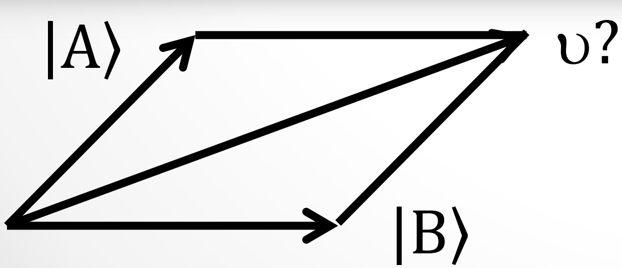
Рассмотрим состояния $|A\rangle$ и $|B\rangle$

Предположим, что при

- ✓ измерении свойства Q в состоянии $|A\rangle$ получаем *a*
- ✓ измерении свойства Q в состоянии $|A\rangle$ получаем *b*

Предположим, что новое физическое состояние $|\Psi\rangle$- суперпозиция

$$|\Psi\rangle = \boldsymbol{\alpha}|A\rangle + \boldsymbol{\beta}|B\rangle, \quad \alpha, \beta \in C$$



Чему равно значение свойства Q в состоянии $|\Psi\rangle$?

Может нечто промежуточное?

Вероятность

1Коэффициенты α и β в приведенной суперпозиции влияют на вероятности, с которыми мы можем получить два возможных значения. На самом деле, вероятности получить *a* или *b*

$$Prob(a) \sim |\alpha|^2 \quad Prob(b) \sim |\beta|^2$$

А. Мы будем измерять либо α, либо β, но никогда что-то промежуточное ~~α + β~~, но с разной вероятностью

$$Prob(a) = \frac{|\alpha|^2}{|\alpha|^2 + |\beta|^2} \quad Prob(b) \sim \frac{|\beta|^2}{|\alpha|^2 + |\beta|^2}$$

Если мы получаем значение *a*, промежуточные измерения тоже дадут *a* и состояние после измерения будет $|A\rangle$, аналогично для *b*

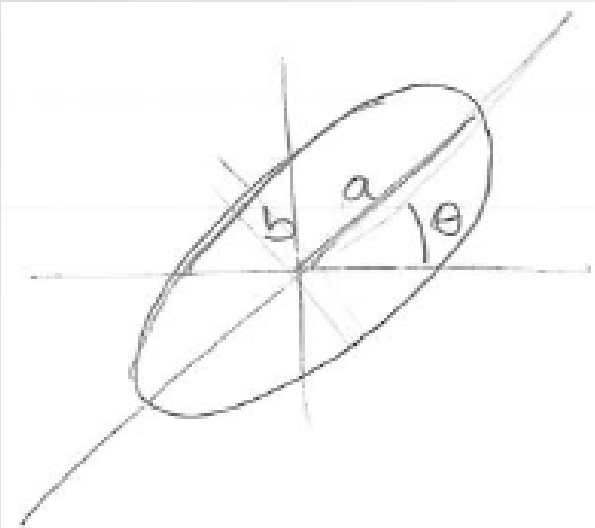
Б. Наложение состояния на себя не меняет физику

$$\boxed{|A\rangle \cong \mathbf{2}|A\rangle \cong -|A\rangle \cong \boldsymbol{i}|A\rangle \neq \mathbf{0}|A\rangle}$$

Нулевое состояние

Все эти состояния физически эквивалентны, пока коэффициент ненулевой, т.е. можем работать с тем состоянием, которое удобно – нормировка

Как проверить?



Например, фотон, попадающий на поляризатор

$$\alpha|\text{фотон}; \boldsymbol{x}\rangle + \beta|\text{фотон}; \boldsymbol{y}\rangle, \qquad \alpha, \beta \in \boldsymbol{C}$$

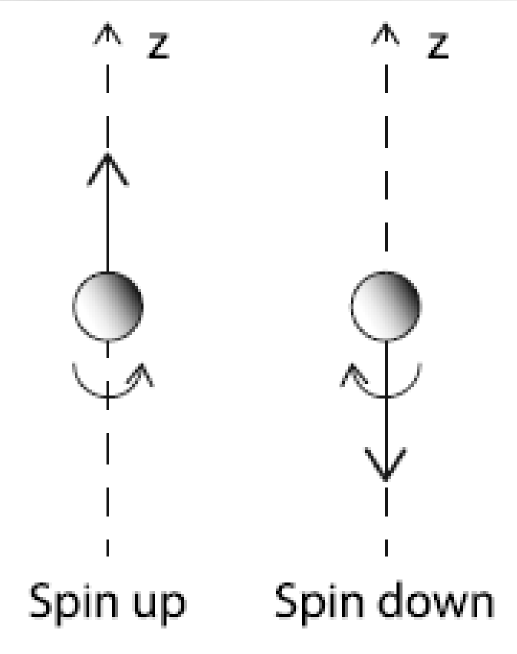
Имеем два комплексных параметра

$$|\text{фотон}; \boldsymbol{x}\rangle + \frac{\beta}{\boldsymbol{\alpha}}|\text{фотон}; \boldsymbol{y}\rangle$$

Имеем один комплексный параметр

$\frac{\beta}{\boldsymbol{\alpha}} = \gamma =$ **2 реальных параметра** $\left(\frac{\boldsymbol{a}}{\boldsymbol{b}}, \boldsymbol{\theta}\right)$

Спин



Свойство элементарной частицы

$$|\Psi\rangle = \left|\uparrow; z\right\rangle + \frac{\beta}{\alpha}\left|\downarrow; z\right\rangle$$

50% $\left|\uparrow; z\right\rangle$

50% $\left|\downarrow; z\right\rangle$

5. Запутанность

Мы говорим о запутанности, когда имеем две невзаимодействующие частицы

Предположим, что частицы могут быть в любом из этих состояний

Частица 1 $|u_1\rangle$ $|u_2\rangle$
Частица 2 $|v_1\rangle$ $|v_2\rangle$

Хотим описать квантовое состояние двух частиц
Частица 1 может делать $|u_1\rangle$, Частица 2 может делать $|v_1\rangle$
Математически $|u_1\rangle \otimes |v_1\rangle$
Теперь частицы делают нечто другое

$$(\alpha_1|u_1\rangle + \alpha_2|u_2\rangle)\otimes(\beta_1|v_1\rangle + \beta_2|v_2\rangle)=$$

$$\alpha_1\beta_1|u_1\rangle\otimes|v_1\rangle + \alpha_1\beta_2|u_1\rangle\otimes|v_2\rangle + \alpha_2\beta_1|u_2\rangle\otimes|v_1\rangle + \alpha_2\beta_2|u_2\rangle\otimes|v_2\rangle$$

Можем записать другое состояние

$$|u_1\rangle\otimes|v_1\rangle + |u_2\rangle\otimes|v_2\rangle = (\cdots)\otimes(\cdots)$$

Сравниваем $\alpha_1\beta_1 = 1, \alpha_2\beta_2 = 1, \alpha_1\beta_2 = 0, \alpha_2\beta_1 = 0$
То есть $|u_1\rangle\otimes|v_1\rangle + |u_2\rangle\otimes|v_2\rangle \neq (\cdots)\otimes(\cdots)$
это состояние описывается: говоря о том, что делает частица 1, мы знаем, что делает частица 2, а для того, чтобы знать о частице 2, нужно знать, что делает 1. Это и есть запутанность, связность

Странное состояние

Можем сконструировать запутанное состояние для двух частиц со спином 1/2

$$|\uparrow; \boldsymbol{z}\rangle_{\mathbf{1}} \otimes |\downarrow; \boldsymbol{z}\rangle_{\mathbf{2}} + |\downarrow; \boldsymbol{z}\rangle_{\mathbf{1}} \otimes |\uparrow; \boldsymbol{z}\rangle_{\mathbf{2}}$$

Волновые свойства частиц

- Представление о траектории движения частицы предполагает возможность одновременного точного измерения координаты и скорости частицы.
- В области микромира существует принципиально новый вид физических объектов, которые в одних случаях проявляют корпускулярные свойства, а в других ведут себя как волны
- Отказ от описания движения частицы с помощью траектории приводит к соотношению неопределенностей Гейзенберга

Соотношение неопределенностей

В. К. Гейзенберг
(1901 - 1976)

«Невозможно придумать аппарат для определения того, через какое отверстие проходит электрон, не возмущая электрон до такой степени, что интерференционная картина пропадет».

$$\Delta p_x \Delta x \geq \frac{\hbar}{2}$$

$$\Delta p_y \Delta y \geq \frac{\hbar}{2} \qquad (1)$$

$$\Delta p_z \Delta z \geq \frac{\hbar}{2}$$

$$\Delta E \Delta t \geq \hbar \qquad (2)$$

Этот фундамент квантовой теории позволяет качественно анализировать различные физические ситуации, не прибегая к точному решению задачи.

Задача 1. Оценете минимально возможную энергию электрона в атоме водорода.

Решение. Минимальная энергия частицы (энергия основного состояния) в классическом приближении определяется величиной минимального импульса:

$$E_{\text{кин}} = \frac{\Delta p^2}{2m}$$

В соответствие с соотношением неопределенностей минимально возможное значение импульса связано с размером области локализации частицы.

$$\Delta p_x \Delta x \geq \hbar$$

Выберем систему отсчета, связанную с ядром атома

$$\Delta x = \Delta y = \Delta z = 2r$$

$$\langle x \rangle = \langle y \rangle = \langle z \rangle = 0$$

выражения определяющие неопределенности проекций импульса на декартовы оси координат

$$\Delta p_x = \Delta p_y = \Delta p_z \approx \frac{\hbar}{2r}$$

Значение кинетической энергии связано с неопределенностью импульса

$$E_{\text{кин}} = \frac{{\Delta p_x}^2 + {\Delta p_y}^2 + {\Delta p_z}^2}{2m} = \frac{3}{2m}\left(\frac{\hbar}{2r}\right)^2$$

Учитывая потенциальную энергию, получаем выражение для полной энергии атома:

$$E(r) = \underbrace{\frac{3}{2m}\left(\frac{\hbar}{2r}\right)^2}_{E_{\text{кин}}} - \underbrace{\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{r}}_{U}$$

$$\frac{dE(r)}{dr} = -\frac{3\hbar^2}{4mr^3} + \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{r^2} = 0$$

$$\boldsymbol{r = \frac{3\pi\varepsilon_0\hbar^2}{me^2}}$$

$$\boldsymbol{E(r) = -\left(\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\right)^2\frac{2me^4}{3\hbar^2} \approx -2,9\cdot 10^{-18}}\text{Дж}$$

Гипотеза де Бройля

L. P.R. deBroglie

«Каждая материальная частица обладает волновыми свойствами, причем соотношения, связывающие волновые и корпускулярные характеристики частицы остаются такими же, как и в случае ЭМИ»

$$\boxed{\boldsymbol{\omega} = \frac{\boldsymbol{E}}{\hbar}}$$

$$\boxed{\lambda_{Б} = \frac{\boldsymbol{2\pi}\hbar}{\boldsymbol{p}}}$$

Плоская волна может быть представлена в комплексной форме

$$\boxed{k = \frac{2\pi}{\lambda}}$$

$$\xi(x,t) = Aexp[-i(\omega t - kx)]$$

1929

Согласно гипотезе, свободной частице с E и p, движущейся вдоль оси x, соответствует плоская волна

$$\boxed{\Psi(x,t) = Aexp\left[-\frac{i}{\hbar}(Et - px)\right]}$$

Свойства волн де Бройля

1. **В процессе распространения могут отражаться, преломляться, интерферировать и дифрагировать по обычным волновым законам**

Фазовая скорость волн де Бройля $\upsilon_{\text{фаз}}$ **- скорость распространения точек с постоянной фазой - из условия постоянства фазы волны:**

$$\boldsymbol{Et - px = const}$$

$$\upsilon_{\text{фаз}} = \frac{dx}{dt} = \frac{E}{p}$$

Поскольку

$$\boldsymbol{E = mc^2, p = mc}$$

$$\boxed{\upsilon_{\text{фаз}} = \frac{c^2}{\upsilon}}$$

m – релятивистская масса частицы,
υ - скорость частицы

2. Так как υ < с, то $\upsilon_{\text{фаз}}$ > с

3. Групповая скорость волн де Бройля $\upsilon_{\text{гр}}$ равна скорости движения частицы:

$$\upsilon_{\text{гр}} = \frac{d\omega}{dk} = \frac{d(\hbar\omega)}{d(\hbar k)} = \frac{dE}{dp}$$

Согласно теории относительности

$$E^2 = p^2c^2 + m_0{}^2c^4 \Longrightarrow$$

Дифференцируем:

$$2EdE = 2pc^2dp$$

m_0 –масса покоя частицы,

$$\frac{dE}{dp} = \frac{pc^2}{E}$$

Таким образом,

$$\boxed{\upsilon_{\text{гр}} = \frac{pc^2}{E} = \frac{pc^2}{mc^2} = \frac{p}{m} = \upsilon}$$

Длина волны де Бройля для не- и релятивистских частиц

1. Случай нерелятивистской частицы со скоростью $\upsilon \ll c$:

$$E_{\text{кин}} = \frac{m_0 \upsilon^2}{2} = \frac{p^2}{2m_0}$$

$$\boxed{\lambda_{\text{Б}} = \frac{2\pi\hbar}{p} = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2m_0 E_{\text{кин}}}}}$$

2. Случай релятивистской частицы с $\upsilon \sim c$:

$$p = \frac{1}{c}\sqrt{E_{\text{кин}}(E_{\text{кин}} + 2m_0 c^2)} = \sqrt{2m_0 E_{\text{кин}}}\sqrt{1 + \frac{E_{\text{кин}}}{2m_0 c^2}}$$

$$\boxed{\lambda'_{\text{Б}} = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2m_0 E_{\text{кин}}}\sqrt{1 + \frac{E_{\text{кин}}}{2m_0 c^2}}} = \frac{\lambda_{\text{Б}}}{\sqrt{1 + \frac{E_{\text{кин}}}{2m_0 c^2}}}}$$

Длина волны де Бройля для микро- и макрообъектов

1. Чтобы отчетливо представить себе порядок дебройлевских длин волн микрочастиц найдем длину волны электрона, прошедшего ускоряющую разность потенциалов U. Предположим, что электрон – нерелятивистская частица

$$\lambda_Б = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2m_0E_{кин}}} = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2m_0eU}} = \sqrt{\frac{150{,}4}{U}} \cdot 10^{-10} м$$

$m_0 = 9{,}10938291(40)\cdot10^{-31}$ кг
$e = -1{,}6021766208(98)\cdot10^{-19}$ Кл
$\hbar = 1{,}054\,571\,800(13) \times 10^{-34}$ Дж·с

Т.о., если (1-x·10)В < U < (1-x·10)kВ, длина волны электрона имеет порядок 10^{-10} м – аналогично расстоянию между атомами и молекулами в твердых телах

2. Для макрообъекта – пылинки, массой m = 10^{-6} г, и υ = 1 мм/с:

$$\lambda_Б = \frac{2\pi\hbar}{m\upsilon} = \frac{6{,}6\cdot10^{-34}}{10^{-9}10^{-3}} = 6{,}6\cdot10^{-22} м$$

Меньше размеров самой пылинки и даже радиуса атомного ядра 10^{-15} м.

Задача 2. Какую разность потенциалов должен пройти электрон, чтобы его де Бройлевская длина волны была равна комптоновской?

Решение. Работа электрического поля численно равна кинетической энергии, приобретенной электроном при прохождении ускоряющей разности потенциалов:

$$eU = T$$

Кинетическую энергию релятивистского электрона найдем из условия

$$mc^2 + T = \sqrt{p^2c^2 + m^2c^4}$$

$$T^2 + 2mc^2T - p^2c^2 = 0$$

$$D = 4m^2c^4 + 4p^2c^2$$

$$T = \frac{-2mc^2 + 2c\sqrt{p^2 + m^2c^2}}{2} - mc = c\left(\sqrt{p^2 + m^2c^2} - mc\right)$$

$$\lambda_C = \frac{2\pi\hbar}{mc} \qquad \lambda_{\text{де Бр}} = \frac{h}{p} \qquad \frac{2\pi\hbar}{mc} = \frac{h}{p} \rightarrow p = mc$$

$$T = c\left(\sqrt{p^2 + m^2c^2} - mc\right) = \mathrm{c}\left(mc\sqrt{2} - mc\right) = mc^2\left(\sqrt{2} - 1\right)$$

$$U = \frac{T}{e} = \frac{mc^2\left(\sqrt{2} - 1\right)}{e} = \frac{(9{,}31 \cdot 10^{31}\text{кг})(3 \cdot 10^8\text{м/с})^2\left(\sqrt{2} - 1\right)}{1{,}6 \cdot 10^{-19}\text{Кл}} = 0{,}21 \cdot 10^6\text{В}$$

Волна - частица

- **Волновая природа излучения максимально проявляется в тех случаях, когда длина волны излучения сопоставима с характерными размерами системы** $\lambda \sim L$
- **Если** $\lambda \ll L$**, то волновые свойства излучения становятся несущественными и можно пользоваться геометрической (лучевой) оптикой.**

Аналогия:* *классическая механика соответствует геометрической оптике,
квантовая (волновая механика) – волновой оптике

Экспериментальные подтверждения гипотезы де Бройля

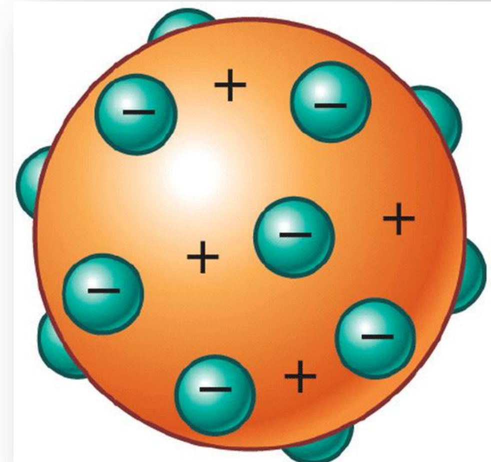
1. Дэвиссон К., Джермер Л, 1927– дифракция электронов на кристаллической решетке
2. Томсон Дж, Тартаковский П.С. 1929– дифракция электронов на поликристаллах
3. Фабрикант В.А. 1949 – дифракционные исследования со слабым пучком электронов
4. Эффект Рамзауэра – рассеяние электрона на атомах инертных газов (без кристалла)
5. Дифракция нейтронов и пучков частиц

Модели атомов. От Дж. Томсона до Н. Бора

1. Атом Томсона (1903)

плотность положительного заряда ρ_0 связана с размером шара *R*

$$e = \frac{4}{3}\pi R^3 \rho_0$$



Напряженность поля на расстоянии $\vec{r}$ от центра шара легко найти из теоремы Гаусса:

$$\mathrm{E}\cdot 4\pi r^2 = 4\pi\cdot\frac{4}{3}\pi R^3\rho_0 \Longrightarrow \vec{E} = \frac{e}{R^3}\vec{r}$$

Тогда уравнение движения электрона запишем в виде

$$m\ddot{\vec{r}} = -\frac{e^2}{R^3}\vec{r}$$

$$\boxed{\ddot{\vec{r}} + \omega_0{}^2\vec{r} = 0 \quad \omega_0 = \sqrt{\frac{e^2}{mR^3}}}$$

Вывод:

атом – гармонический осциллятор

Если R = 1 Å, $\omega_0 = 10^{16}\text{c}^{-1}$ - УФ диапазон

Решение уравнения имеет вид

$$\boxed{\vec{r}(t) = \vec{r_0}\cos\omega_0 t}$$

Модель не учитывает потери энергии на излучение, при ускоренном движении электрона, т.е. существования дополнительной силы – силы радиационного трения

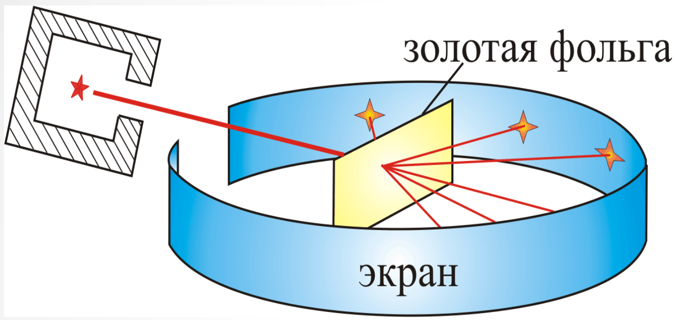
Опыты Резерфорда

2. Планетарная модель атома

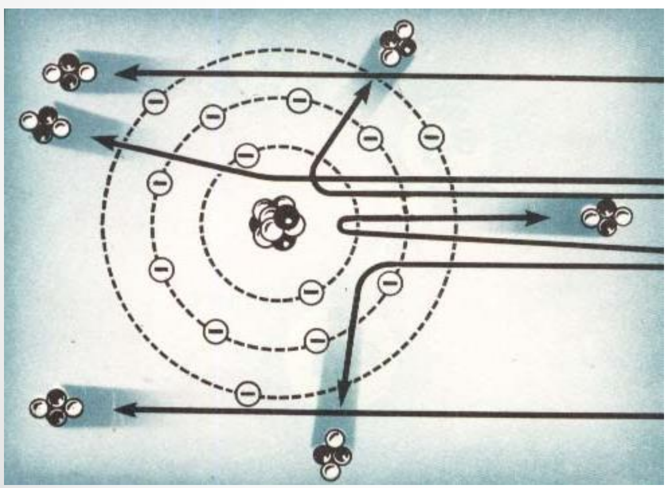
Э. Резерфорд
1871-1937

1908

опыты по рассеянию α - частиц



Некоторые α-частицы отклонялись на большие углы, до 180^0.



Резерфорд : такое отклонение возможно лишь при встрече с положительно заряженной частицей большей массы. А малая вероятность отклонения на большие углы указывала на то, что эта положительная частица имеет малые размеры (~10^{-15} м).

Электроны движутся вокруг ядра, излучают ЭМВ, теряют энергию и… падают на ядро.

Вывод: атом нестабильный, живет конечное время $\tau \approx 10^{-11}$ c

3. Атом Бора (1913)

Нильс Бор
1885-1962

1. Постулат стационарных состояний:
Атом может находиться в определенных стационарных состояниях с E_1, E_2, … , где атом не излучает и не поглощает энергию.

Постулат находится в противоречии с классической механикой, согласно которой энергия движущихся электронов может быть любой, и в противоречии с электродинамикой Максвелла, т.к. допускает возможность ускоренного движения без излучения ЭМВ.

2) При переходе атома из одного стационарного состояния в другое он излучает (поглощает) квант света (фотон) с энергией

$$\boxed{\hbar\omega = E_2 - E_1}$$

Постулат противоречит электродинамике Максвелла, т.к. частота излученного света свидетельствует не об особенностях движения электрона, а лишь об изменении энергии атома.

3. Динамика электрона на стационарной орбите определяется уравнениями классической теории

4. Правило квантования орбит: круговые стационарные орбиты определяются условием квантования момента импульса:

$$m_e \upsilon r = n\hbar \text{, где } n = 1, 2, 3, \ldots$$

Достижения теории Бора

- вычисление постоянной Ридберга для водородоподобных систем
- объяснение структуры линейчатых спектров
- теоретическое определение отношения массы протона к массе электрона $m_p/m_e = 1847$.

Недостатки теории Бора

- **внутренняя противоречивость: соединение классической физики с квантовыми постулатами.**
- **неполнота:**
  - ✓ **не может объяснить вопрос об интенсивностях спектральных линий.**
  - ✓ **не может описать особенности динамики атомных электронов**
- **ограниченность: абсолютная невозможность применить теорию для объяснения спектров гелия (*He*) (два электрона на орбите, и уже теория Бора не справляется).**

Основные постулаты квантовой механики

Задача: формализовать описание движения микрочастиц.

1. Состояние частицы описывается волновой функцией $\Psi(x, y\ z, t)$ пространственных координат и времени

2. Каждой физической величине соответствует определенный оператор этой физической величины. Соотношения между операторами в квантовой механике аналогичны соотношениям между соответствующими физическими величинами в классической механике.

3. В результате измерения физической величины f в любой квантовой системе могут быть получены только такие значения, которые являются собственными значениями оператора $\hat{\Phi}$, соответствующего этой величине

Волновая функция

Волновая функция – основная величина, описывающая состояние системы и позволяющая находить вероятности и средние значения характеризующих её физических величин.

$$\boxed{w = \frac{dP}{dV} = |\Psi|^2}$$

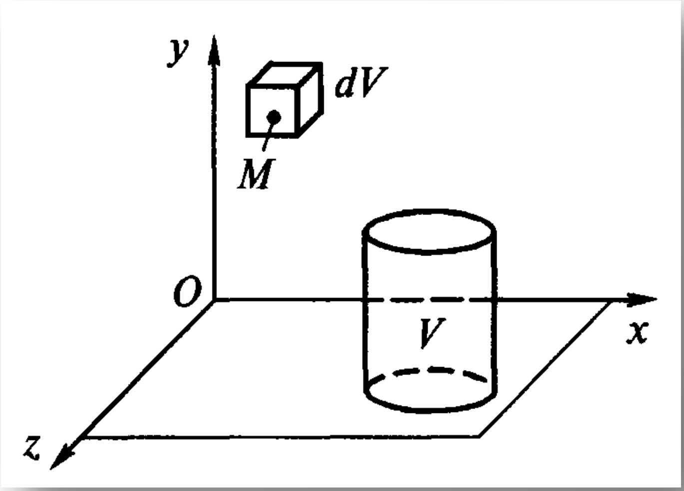
Плотность вероятности обнаружить частицу в точке с координатой *r* в момент *t*

Волновая функция в общем случае является комплексной, поэтому физический смысл имеет не сама волновая функция, а квадрат ее модуля – действительная величина – получается путем умножения Ψ на комплексно-сопряженную

$$\boxed{dP = |\Psi|^2 dV = \Psi^* \Psi dV}$$

Вероятность того, что для заданного квантового состояния частицы , ее можно обнаружить в dV

$$dV = dx \quad dV = dxdy \quad dV = dxdydz$$



Свойства волновой функции

1. **Условие нормировки:** если в качестве области пространства взять все пространство $\Re^N$, для которого V → ∞, то обнаружение частицы является достоверным событием

$$\int_{V\to\infty} |\Psi|^2 dV = 1$$

$$\int_{V\to\infty} \Psi^* \Psi dV = 1$$

Замечание: Здесь нас ожидает «неприятность». Единственная волновая функция, которую мы знаем –волна де Бройля, соответствующая частице с заданным значением импульса. Для этой волны

$$\left|\psi(\vec{r},t)\right|^2 = \left|\exp\left(\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\vec{r} - Et)\right)\right|^2 \equiv 1$$

нормировочный интеграл расходится.

$$\Delta x \approx \frac{\hbar}{\Delta p_x} \to \infty$$

С другой стороны, такая ситуация понятна. Если импульс известен точно, то из соотношения неопределенностей

$$\int_V \psi^*_{p'}(\vec{r})\psi_p(\vec{r})dV = \delta(p - p')$$

Условие нормировки на δ - функцию используется в квантовой теории всякий раз, когда волновая функция не может быть нормирована

2. **Условие конечности:** волновая функция не может принимать бесконечных значений, таких, что интегралы станут расходящимися. Поэтому волновая функция должна быть квадратично интегрируемой. В задачах с нормированной волновой функцией квадрат модуля волновой функции должен стремиться к нулю на бесконечности

3. **Условие однозначности:** волновая функция должна быть однозначной функцией координат и времени, так как плотность вероятности обнаружения частицы должна определяться однозначно.

4. **Условие непрерывности:** в любой момент времени волновая функция должна быть непрерывной функцией пространственных координат. Кроме того непрерывными должны быть также частные производные волновой функции $\frac{\partial\Psi}{\partial x}, \frac{\partial\Psi}{\partial y}, \frac{\partial\Psi}{\partial z}$

Принцип суперпозиции квантовых состояний

Из линейности уравнения Шредингера для волновой функции следует, что если частица может находиться в квантовом состоянии, описываемом Ψ_1, а также в другом квантовом состоянии, описываемом Ψ_2, то эта частица может находится также в состоянии, описываемом волновой функцией

$$\boxed{\Psi = C_1\Psi_1 + C_2\Psi_2}$$

$$\boxed{\Psi = C_1\Psi_1 + C_2\Psi_2 + \cdots + C_N\Psi_N = \sum_{n=1}^{N} |C_n|^2}$$

Задача 2. Волновая функция некоторой частицы, движущейся вдоль оси *OX*, имеет вид

$$\psi(x,t) = Ax \cdot \exp i(\omega t - kx).$$

При $x < 0$ и при $x > b > 0$ значение A = 0.

Определите значение *A* при $0 \le x \le b$. Найдите:

1) плотность вероятности, с которой частицу можно обнаружить в точке с координатой $x = b$;

2) средние значения *x и* x^2 в интервале $[0,b]$.

Решение. 1) Необходимо провести нормировку волновой функции

$$\int_{sp} \Psi(r,t)\Psi^*(r,t)dr = 1$$

$$\int_0^b Axe^{i(\omega t - kx)} Axe^{-i(\omega t - kx)} dx = 1$$

$$\int_0^b (Ax)^2 dx = \frac{A^2 b^3}{3} = 1$$

$$A = \sqrt{\frac{3}{b^3}}$$

$$|\Psi(x)|^2 = (Ax)^2 = \frac{3}{b^3} x^2$$

При $x = b$ плотность вероятности

$$|\Psi(x)|^2 = \frac{3}{b}$$

2) вычисления среднего значения

$$\Psi(x,t) = \sqrt{\frac{3}{b^3}}\, x\cdot expi(\omega t - kx)$$

$$\langle x \rangle = \int_0^b x|\Psi|^2\, dx = \int_0^b x\Psi\Psi^* dx = \int_0^b x\,\frac{3}{b^3}\, xe^{i(\omega t - kx)} xe^{-i(\omega t - kx)} dx$$

$$\int_0^b \frac{3}{b^3}\, x^3 dx = \frac{3}{4} b$$

$$\langle x^2 \rangle = \int_0^b x^2|\Psi|^2\, dx = \int_0^b x^2\Psi\Psi^* dx =$$

$$= \int_0^b x^2\,\frac{3}{b^3}\, xe^{i(\omega t - kx)} xe^{-i(\omega t - kx)} dx = \int_0^b \frac{3}{b^3}\, x^4 dx = \frac{3}{5} b^2$$

Уравнение Шредингера

Попробуем угадать волновое уравнение, решением которого является плоская волна да Бройля

$$\psi(x,t) = e^{\frac{i}{\hbar}(p_x x - Et)} = e^{i(k_x x - \omega t)}$$

Дисперсионное соотношение

$$E = \frac{p^2}{2m} \quad \text{или} \quad \hbar\omega = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

Дифференцируем *ψ*(*x*,*t*) один раз по времени и дважды – по пространственной координате

$$\frac{\partial\psi}{\partial t} = -i\omega\psi \qquad \frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} = -k^2\psi$$

Сопоставляем с дисперсионным соотношением: искомое уравнение будет уравнением первого порядка по времени и - второго по пространственной координате.

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \hbar\omega\psi, \qquad -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} = -\frac{\hbar^2 k^2}{2m}\psi$$

Стационарное уравнение Шредингера

Сравнивая, получаем уравнение, которое описывает движение частицы в свободном пространстве – уравнение Шредингера

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\psi$$

Обобщение на трехмерный случай делается элементарно.

$$\psi(\vec{r},t) = e^{i(\vec{k}\vec{r}-\omega t)}$$

$$\hbar\omega = \frac{\hbar^2}{2m}\left(k_x{}^2 + k_y{}^2 + k_z{}^2\right)$$

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}\right) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi$$

$$i = \sqrt{-1}$$

$$\Delta \equiv \nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

Нестационарное уравнение Шредингера

Обобщим уравнение на случай движения частицы массой m_0 в потенциальном силовом поле $\vec{F} = -grad\,U(r,t)$, описываемом скалярной потенциальной функцией $U(x,y,z,t)$. Вспомним, что в правой части уравнения фактически стоит кинетическая энергия частицы. При наличии потенциального поля ее следует заменить на полную энергию, т.е. добавить потенциальную энергию

$$\boxed{i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + U(\vec{r},t)\psi}$$

нестационарное уравнение Шредингера, описывающее движение частицы в произвольном потенциальном поле

проведенные рассуждения ни в коей мере не являются «выводом» уравнения Шредингера, которое не может быть получено из каких-либо более общих физических законов. Это лишь некоторый способ «угадать» его

Уравнение непрерывности

Уравнение Шредингера учитывает свойства симметрии пространства и времени. Поэтому из основного уравнения квантовой механики могут быть получены другие общие законы, как, например, закон сохранения заряда.

Запишем уравнение Шредингера

$$\psi^* \cdot \quad i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + U(\vec{r},t)\psi$$

Уравнение, комплексно сопряженное ему: $\quad -$

$$\psi \cdot -i\hbar\frac{\partial\psi^*}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi^* + U(\vec{r},t)\psi^*$$

$$-i\hbar\left(\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial t} + \psi\frac{\partial\psi^*}{\partial t}\right) = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\psi^*\nabla^2\psi + \psi\nabla^2\psi^*\right)$$

Вектор плотности тока вероятности

или

$$\frac{\partial|\Psi|^2}{\partial t} = -\frac{\hbar}{2mi}\nabla(\Psi^*\nabla\Psi - \Psi\nabla\Psi^*)$$

Вспоминаем, что плотность вероятности $P(\vec{r},t) = |\Psi|^2$

И вводим обозначение

вектор плотности тока вероятности

$$\boxed{\vec{j} = \frac{\hbar}{2mi}(\Psi^*\nabla\Psi - \Psi\nabla\Psi^*)}$$

Уравнение непрерывности: плотность вероятности перетекает из одной пространственной точки в другую подобно заряду в электродинамике, или массе в гидродинамике.

$$\boxed{\frac{\partial P(\vec{r},t)}{\partial t} + div\vec{j} = 0}$$

$$\rho_m = m_0|\Psi|^2, \overrightarrow{j_m} = m_0\vec{j}$$

Если умножить на массу частицы m_0, то получим плотность, поток массы вещества и уравнение непрерывности, или на заряд – объемная плотность заряда и плотность тока, закон сохранения заряда

$$\boxed{\frac{\partial \rho_m}{\partial t} + div\overrightarrow{j_m} = 0}$$

$$\rho_q = q|\Psi|^2, \overrightarrow{j_q} = q\vec{j}$$

$$\boxed{\frac{\partial \rho_q}{\partial t} + div\overrightarrow{j_q} = 0}$$

Уравнение Шредингера в центральном поле

Центрально-симметричное поле - потенциальная энергия поля зависит только от модуля разности координат $U(|\vec{r}_2 - \vec{r}_1|)$ взаимодействующих частиц - проблема системы двух взаимодействующих тел сводится к решению задачи о движении одной частицы в поле центральных сил.

В микромире - задачи об атоме водорода, одноэлектронных ионах He^{+}, Li^{+2},..., о позитронии (система, состоящая из электрона и позитрона) ….

Обычно в такой задаче переходят в систему отсчета, связанную с центром масс двух частиц и разделяют поступательное движение центра масс системы из двух частиц и их относительное движение.

Если масса одного тела значительно больше массы другого $M \gg m_0$, то можно считать, что центр масс находится в центре массивной частицы и рассматривать движение одной частицы m_0 в поле $U(r)$, где r – ее расстояние от второй, более массивной частицы M.

Оператор Лежандра

Рассматривается стационарное уравнение Шредингера:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U(\vec{r},t)\right]\psi(\vec{r}) = E\,\psi(\vec{r})$$

В сферической системе координат оператор Лапласа имеет вид:

$$\widehat{\nabla^2} \equiv \Delta = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2}\hat{\Lambda} \equiv \hat{\nabla}_r^{\,2} + \frac{1}{r^2}\hat{\Lambda}$$

где угловая часть оператора Лапласа, называемая оператором Лежандра, имеет вид:

$$\hat{\Lambda} = \frac{\partial}{\sin\theta\,\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}$$

оператор Лежандра не зависит от радиуса *r* и конкретного вида потенциала *U*(*r*).

Разделение переменных

Независимость оператора Лежандра от расстояния между частицами и конкретного вида потенциального взаимодействия позволяет разделить уравнение Шредингера на две части: одна зависит только от радиуса *r*, другая – от угловых переменных *θ* и *φ*. Убедимся в этом, если представим волновую функцию в виде произведения двух функций:

$$\boxed{\psi(\vec{r},\theta,\varphi) = R(\vec{r})\Upsilon(\theta,\varphi)}$$

Такой вид волновой функции приводит к разделению переменных в уравнении Шредингера. Представим его в более удобном виде:

$$\left(\hat{\nabla}_r^{\,2} + \frac{1}{r^2}\hat{\Lambda}\right)\psi + k^2(\vec{r})\psi = 0$$

$$k^2(\vec{r}) = \frac{2m_0}{\hbar^2}\left(E - U(\vec{r})\right)$$

где k^2 -квадрат волнового числа в классической механике - зависит только от радиуса *r*.

Разделение уравнения Шредингера

Независимость оператора Лежандра от расстояния между частицами и конкретного вида потенциального взаимодействия позволяет разделить уравнение Шредингера на две части: одна зависит только от радиуса *r*, другая – от угловых переменных θ и φ. Убедимся в этом, если представим волновую функцию в виде произведения двух функций:

$$\boxed{\psi(\vec{r},\theta,\varphi) = R(\vec{r})\Upsilon(\theta,\varphi)}$$

Такой вид волновой функции приводит к разделению переменных в уравнении Шредингера. Представим его в виде:

$$\left(\hat{\nabla}_r^{\,2} + \frac{1}{r^2}\hat{\Lambda}\right)\psi + k^2(\vec{r})\psi = 0$$

$$k^2(\vec{r}) = \frac{2m_0}{\hbar^2}\left(E - U(\vec{r})\right)$$

где k^2 -квадрат волнового числа в классической физике - зависит только от радиуса *r*.

Умножим это уравнение на

$$\frac{r^2}{\psi} = \frac{r^2}{R\cdot Y}$$

$$\underbrace{\frac{r^2}{R(r)}\hat{\nabla}_r^{\,2}R(r) + r^2k^2(\vec{r})}_{\text{Зависит только от r}} = \underbrace{-\frac{1}{\Upsilon(\theta,\varphi)}\hat{\Lambda}\Upsilon(\theta,\varphi)}_{\text{Зависит только от } \theta \text{ и} \varphi} = \lambda$$

Уравнение для радиальной части

Рассмотрим уравнение для радиальной части:

$$\boxed{\hat{\nabla}_r^{\,2}\boldsymbol{R}(\boldsymbol{r}) + k^2(\vec{r})\boldsymbol{R}(\boldsymbol{r}) = \frac{\lambda}{\boldsymbol{r}^2}\hat{\nabla}_r^{\,2}\boldsymbol{R}(\boldsymbol{r})}$$

Или, подставляя оператор Лапласа в сферической системе координат и k^2, получаем:

$$\widehat{\nabla^2} \equiv \Delta = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2}\hat{\Lambda}$$

$$k^2(\vec{r}) = \frac{2m_0}{\hbar^2}\left(E - U(\vec{r})\right)$$

$$\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)\boldsymbol{R}(\boldsymbol{r}) + \left[\frac{2m_0}{\hbar^2}\left(E - U(\vec{r})\right) - \frac{\lambda}{\boldsymbol{r}^2}\right]\boldsymbol{R}(\boldsymbol{r}) = 0$$

Производя дифференцирование и вводя $\boldsymbol{k}^2$, получаем **уравнение для радиальной части волновой функции**:

$$\boxed{R'' + \frac{2}{r}R' + \left(k^2 - \frac{\lambda}{r^2}\right)R = 0}$$

Уравнение для радиальной части волновой функции зависит от потенциала $U(r)$. Обычно делается замена:

$$\boxed{\boldsymbol{R}(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{\boldsymbol{r}}\chi(\boldsymbol{r})}$$

$$R' = \frac{\chi'}{r} - \frac{\chi}{r^2}$$

$$R'' = \frac{\chi''}{r} - \frac{2\chi'}{r^2} + \frac{2\chi}{r^3}$$

$$\boxed{\chi'' + \left(k^2 - \frac{\lambda}{r^2}\right)\chi = 0}$$

Уравнение для угловой части

Угловая часть волновой функции :

$$-\frac{1}{Y(\theta,\varphi)}\widehat{\Lambda}Y(\theta,\varphi)=\lambda$$

$$\widehat{\Lambda}Y(\theta,\varphi)+\lambda Y(\theta,\varphi)=0$$

Записывая явный вид оператора Лежандра , имеем:

$$\frac{1}{sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)Y(\theta,\varphi)+\frac{1}{sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}Y(\theta,\varphi)+\lambda Y(\theta,\varphi)=0$$

$$\boxed{Y_\theta{}'' + ctg\theta Y_\theta{}' + \frac{1}{sin^2\theta}Y_\varphi{}'' + \lambda Y=0}$$

Получили уравнение для угловой части волновой функции $Y(\theta,\varphi)$ частицы в центрально- симметричном поле. Уравнение для угловой части не зависит от конкретного вида потенциала U(r) и для всех центральных полей имеет одно и то же решение. Поэтому имеет смысл рассмотреть его решение в общем виде.

Операторы физических величин

Постулат 2: Каждой физической величине соответствует определенный оператор этой физической величины. Соотношения между операторами имеют ту же структуру, что и соотношения между соответствующими им физическими величинами в классической механике.

Оператор – математическое правило, следуя которому можно преобразовать одну функцию в другую.

Задать оператор – определить принцип преобразования (умножение на число или функцию, дифференцирование функции, перестановка аргументов функции, $\nabla \equiv grad, \Delta = \nabla^2, div \equiv (\nabla \ldots), rot \equiv [\nabla]$).

Условие: оператор пишется всегда слева от функции, на которую он действует.

В квантовой механике применяются только *линейные операторы*, чтобы не нарушался принцип суперпозиции состояний.

$$\boxed{\hat{F}(C_1\varphi_1 + C_2\varphi_2) = C_1\hat{F}\varphi_1 + C_2\hat{F}\varphi_2}$$

Символ оператора – величина со шляпкой - $\hat{x}, \widehat{p_x}, \hat{U}$

Оператор предполагается действующим на функцию (волновая). Равенство двух функций $\hat{A}\Psi = \hat{B}\Psi$ в операторной форме записывается как равенство операторов $\hat{A} = \hat{B}$.

1. Оператор координаты

Действие оператора на волновую функцию = умножение на соответствующую координату:

$$\boxed{\hat{x}\Psi = x\Psi, \hat{y}\Psi = y\Psi, \hat{z}\Psi = z\Psi}$$

В символической операторной форме записи:

$$\boxed{\hat{x} = x, \hat{y} = y, \hat{z} = z}$$

$$\boxed{\hat{\vec{r}} = \overrightarrow{e_x}\hat{x} + \overrightarrow{e_y}\hat{y} + \overrightarrow{e_z}\hat{z}}$$

2. Оператор импульса

Определяется с помощью операций дифференцирования:

$$\boxed{\widehat{p_x} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}, \widehat{p_y} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial y}, \widehat{p_z} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial z}}$$

$$\boxed{\hat{\vec{p}} = \overrightarrow{e_x}\widehat{p_x} + \overrightarrow{e_y}\widehat{p_y} + \overrightarrow{e_z}\widehat{p_z} = -i\hbar\nabla}$$

$$\nabla = \overrightarrow{e_x}\frac{\partial}{\partial x} + \overrightarrow{e_y}\frac{\partial}{\partial y} + \overrightarrow{e_z}\frac{\partial}{\partial z}$$

3. Оператор квадрата импульса:

$$p^2 = {p_x}^2 + {p_y}^2 + {p_z}^2 = p_x p_x + p_y p_y + p_z p_z$$

$$\boxed{\begin{aligned}\hat{p}^2 &= (\widehat{p_x})^2 + \left(\widehat{p_y}\right)^2 + (\widehat{p_z})^2 \\ &= -\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\end{aligned}}$$

$$\boxed{\hat{p}^2 = -\hbar^2 \Delta}$$

4. Оператор момента импульса:

$$\vec{L} = [\vec{r}, \vec{p}] = m[\vec{r}, \vec{\upsilon}]$$

$$\hat{\vec{L}} = [\vec{r}, \hat{\vec{p}}] = -i\hbar[\vec{r}, \hat{\nabla}]$$

$$\hat{\vec{L}} = \widehat{L_x}\vec{e}_x + \widehat{L_y}\vec{e}_y + \widehat{L_z}\vec{e}_z$$

$$\widehat{L_x} = \hat{y}\widehat{p_z} - \hat{z}\widehat{p_y} = -i\hbar\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right)$$

$$\widehat{L_y} = \hat{z}\widehat{p_x} - \hat{x}\widehat{p_z} = -i\hbar\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right)$$

$$\widehat{L_z} = \hat{x}\widehat{p_y} - \hat{y}\widehat{p_x} = -i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right)$$

5. Оператор проекции момента импульса

Поскольку нас будет интересовать приложение теории момента импульса к движению частицы в центральном поле, то удобнее представлять его в сферической системе координат (*r*,θ,φ):

$$x = r sin\theta cos\varphi \quad y = r sin\theta sin\varphi \quad z = r cos\theta$$

Пусть меняется только одна координата – угол φ, найдем производную от функции ψ по координате φ (т.е. осуществляется вращение вокруг оси *z*):

$$\frac{\partial\Psi}{\partial\varphi} = \frac{\partial\Psi}{\partial x}\frac{\partial x}{\partial\varphi} + \frac{\partial\Psi}{\partial y}\frac{\partial y}{\partial\varphi} + \frac{\partial\Psi}{\partial z}\frac{\partial z}{\partial\varphi} =$$

$$= \frac{\partial\Psi}{\partial x}(-r sin\theta sin\varphi) + \frac{\partial\Psi}{\partial y} r sin\theta cos\varphi + \frac{\partial\Psi}{\partial z}\cdot 0 = \left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right)\psi$$

Тогда умножая последнее равенство на множитель «-*i*ħ», имеем:

$$\boxed{-i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi} = -i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right) = \hat{L}_z}$$

координат оператор проекции момента импульса на ось *z* в сферической системе

6. Оператор квадрата момента импульса

$$\hat{L}^2 = \hat{L}_x\hat{L}_x + \hat{L}_y\hat{L}_y + \hat{L}_z\hat{L}_z$$

Оператор момента импульса в сферической системе координат:

$$\widehat{L_x} = -i\hbar\left(sin\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} + ctg\theta cos\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)$$

$$\widehat{L_y} = -i\hbar\left(cos\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} - ctg\theta sin\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)$$

$$\widehat{L_z} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}, \hat{L}^2 = -\hbar^2\Delta_{\theta,\varphi}$$

$$\Delta_{\theta,\varphi} = \frac{1}{sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(sin\varphi\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}$$

7. Операторы энергии

$$\hat{\mathrm{E}}_{\text{кин}} = \frac{\hat{p}^2}{2m_0} = -\frac{\hbar^2}{2m_0}\Delta$$

$$\hat{U} \cdot \Psi = U \cdot \Psi, \qquad \hat{U} = U$$

$$\hat{H} = \hat{\mathrm{E}}_{\text{кин}} + \hat{U} = \frac{\hat{p}^2}{2m_0} + U = -\frac{\hbar^2}{2m_0}\Delta + \mathrm{U}(x, y, z)$$

гамильтониан

$$\hat{H}\Psi = i\hbar\frac{\partial \Psi}{\partial t}$$

Нестационарное уравнение Шредингера

Правила действия с операторами

1. **Суперпозиция действия операторов**

$$\hat{G}(C_1\varphi_1 + C_2\varphi_2) = C_1\hat{G}\varphi_1 + C_2\hat{G}\varphi_2$$

2. **Сумма операторов**

$$\left(\hat{F} + \hat{G}\right)\Psi = \hat{F}\Psi + \hat{G}\Psi$$

3. **Произведение операторов**

$$\left(\hat{G}\hat{F}\right)\Psi = \hat{G}\left(\hat{F}\Psi\right)$$

4. **Коммутатор (скобки Пуассона)**

$$\left[\hat{A},\hat{B}\right] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$$

1). Физические величины, которым соответствуют некоммутативные операторы, не могут иметь одновременно определенные значения, не могут быть одновременно точно измерены.

2). Физические величины, чьи операторы коммутируют, могут быть измерены с любой точностью одновременно.

Примечание:

- ✓ Коммутирующие операторы $\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A}$, $\left[\hat{A},\hat{B}\right] = 0$
- ✓ Антикоммутирующие операторы $\hat{A}\hat{B} = -\hat{B}\hat{A}$, $\hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}$ $=\left\{\hat{A},\hat{B}\right\}=0$