КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА

ЛЕКЦИЯ 3

Ψ

ПОСТУЛАТЫ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

Первый постулат квантовой механики:

Состояние частицы в квантовой механике описывается заданием волновой функции, являющейся функцией пространственных координат и времени: $\psi(x, y, z, t)$.

Знание волновой функции содержит полную информацию о движении частицы.

<u>Вероятностный смысл волновой функции.</u> Квадрат модуля волновой функции $\left|\psi(x, y, z, t)\right|^2$ определяет плотность вероятности того, что в момент времени t частица может быть обнаружена в элементе пространства, окружающем точку *(x,y,z)*.

ПОСТУЛАТЫ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

Условия на волновую функцию:

1. Волновая функция должна быть конечна во всем пространстве;
2. Волновая функция должна быть квадратично интегрируема на всей области определения;
3. $\psi -$ однозначная функция координат и времени;
4. Волновая функция должна быть непрерывна;
5. Должна иметь непрерывную производную.

ПОСТУЛАТЫ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

Принцип суперпозиции квантовых состояний :

(следствие линейности уравнения Шредингера)

Если частица может находиться в квантовом состоянии ψ_1 , а также в другом квантовом состоянии ψ_2 , то эта частица может находиться в состоянии, описываемом волновой функцией

$$\psi = c_1\psi_1 + c_2\psi_2,$$

где $c_1, c_2 -$ комплексные числа.

$|c_1|^2 -$ плотность вероятности нахождения частицы в состоянии ψ_1.

РЕШЕНИЕ УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА

ОБЩЕЕ РЕШЕНИЕ

$$i\hbar\frac{\partial\psi(\vec{r},t)}{\partial t}=\hat{H}\psi(\vec{r},t),$$

где $\hat{H}=\frac{\hbar^2}{2m_0}\nabla^2+V(\vec{r})$

Если $\psi(\vec{r},t)=\psi(\vec{r})\cdot\varphi(t)$

$$\psi(\vec{r})\cdot i\hbar\frac{\partial\varphi(t)}{\partial t}=\varphi(t)\hat{H}\psi(\vec{r})$$

ОБЩЕЕ РЕШЕНИЕ

$$\boxed{E = \frac{i\hbar}{\varphi(t)} \cdot \frac{\partial \varphi(t)}{\partial t}} = \boxed{\frac{1}{\psi(\vec{r})} \hat{H} \psi(\vec{r}) = E}$$

$$\frac{\partial \varphi(t)}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} E \varphi(t) \quad \xleftarrow{E_n} \quad H \psi_n(\vec{r}) = E_n \psi_n(\vec{r})$$

$$\varphi_n(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} \qquad E_n, \ \psi_n(\vec{r})$$

$$\psi_n(\vec{r}, t) = \psi_n(\vec{r}) \cdot \varphi_n(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} \psi_n(\vec{r})$$

$$\psi_n{}^*(\vec{r}, t) = \psi_n{}^*(\vec{r}) \cdot \varphi_n{}^*(t) = e^{\frac{i}{\hbar} E_n t} \psi_n{}^*(\vec{r})$$

ПРИНЦИП СУПЕРПОЗИЦИИ

Общее решение - линейная комбинация частных решений:

$$\psi(\vec{r},t) = \sum_n C_n e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}\psi_n(\vec{r}),$$

$$\psi^*(\vec{r},t) = \sum_n C_n^* e^{\frac{i}{\hbar}E_n t}\psi_n^*(\vec{r}),$$

где C_n, C_n^* - некоторые произвольные числовые коэффициенты

$$(E-\hat{H})\psi_n(\vec{r},t) = \sum_n C_n e^{\frac{i}{\hbar}E_n t}(E_n - \boxed{\hat{H})\psi_n(\vec{r})} = 0$$

$$\hat{H}\psi_n = E_n\psi_n$$

СТАЦИОНАРНОЕ УРАВНЕНИЕ ШРЕДИНГЕРА

$$\hat{H}\psi = E\psi,$$

где $$\hat{H} = \frac{\hbar^2}{2m_0}\nabla^2 + V(\vec{r})$$

$$\nabla^2\psi + \frac{2m_0}{\hbar^2}(E - V(\vec{r}))\psi = 0.$$

РЕШЕНИЕ УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА

Решение волнового уравнения существует лишь при некоторых значениях параметра.

Таким параметром является энергия.

Возможные значения энергии

$$E_1, E_2, E_3, \ldots, E_n, \ldots$$ – *собственные значения*
– энергетический спектр

$$\psi_1, \psi_2, \psi_3, \ldots, \psi_n, \ldots$$ – *собственные функции*

квантовые числа

$$\hat{H}\psi_n = E_n \psi_n$$

Определение собственных значений – квантование энергетического спектра.

РЕШЕНИЕ УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА

1. Постулат Бора «об устойчивых квантовых состояниях» старой квантовой теории выполняется автоматически при решении уравнения Шредингера.

$$E_1, E_2, E_3, \dots, E_n, \dots$$

2. Условие частот :

$$\omega = \omega_{nn'} = \frac{E_n - E_{n'}}{\hbar}$$

РЕШЕНИЕ УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА

(1) $$\psi(\vec{r},t)=\sum_n C_n e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}\psi_n(\vec{r}),$$

решения стационарного уравнения

$$\hat{H}\psi_n(\vec{r})=E_n\psi_n(\vec{r})$$

Функции стационарных состояний ортонормированы :

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_n^*\cdot\psi_{n'}d^3x=\delta_{nn'}=\begin{cases}1, & n=n',\\ 0, & n\neq n'.\end{cases}$$

Множество собственных функций образует базис в пространстве функций.

Общее решение нормировано, если ортонормированы частные :

$$\sum_{n,n'}C_{n'}^*C_n e^{-\frac{i}{\hbar}t(E_n-E_{n'})}\int\psi_{n'}^*(\vec{r})\cdot\psi_n(\vec{r})dV=1.$$

РЕШЕНИЕ УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА

$$\sum_{n,n'} C_{n'}^{*} C_n e^{-\frac{i}{\hbar}t(E_n - E_{n'})} \int \psi_{n'}^{*}(\vec{r}) \cdot \psi_n(\vec{r}) dV = 1.$$

$$\sum_{n,n'} C_{n'}^{*} C_n \cdot \delta_{nn'} = \sum_{n} \left| C_n \right|^2 = 1$$

$\left| C_n \right|^2 -$ вероятность нахождения частицы в состоянии n .

ПОСТУЛАТЫ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

Второй постулат квантовой механики:

Каждой физической величине соответствует оператор этой физической величины. <u>Оператор</u> – это математическое правило, согласно которому можно преобразовать одну функцию в другую.

Оператором физической величины может быть только **линейный эрмитов (самосопряженный)** оператор.

$$\hat{F}^{+} = \hat{F},$$

$$\int \psi_k^* \hat{F} \psi_n(\vec{r}) dV = \int \left(\hat{F}^{+} \psi_k\right)^* \psi_n(\vec{r}) dV.$$

ПОСТУЛАТЫ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

Значения, которые может принимать данная физическая величина называют ее собственными значениями.

Если при действии оператора на функцию получается та же самая функция, умноженная на число, то есть

$$\hat{F}\psi = f\psi$$

то такую функцию называют собственной функцией оператора $\hat{F}$,

f – его собственное значение.

ПОСТУЛАТЫ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

Собственные значения оператора могут быть

непрерывными $\psi_p(\vec{r},t)$

или

дискретными $\psi_n(\vec{r},t)$.

Собственные значения оператора могут быть

невырожденными $E_n \rightarrow \psi_n$

и

вырожденными $E_n \rightarrow \psi_{n1}, \psi_{n2}, \psi_{n3}, \ldots, \psi_{ns}$,

где s- кратность вырождения собственного значения.

ПОСТУЛАТЫ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

Спектр собственных значений эрмитова оператора вещественен.

Пусть $\hat{F}^{+} = \hat{F}$ и $\hat{F}\psi = f\psi$

справедливо $$\left(\hat{F}\psi\right)^{*} = f^{*}\psi^{*}.$$

$$\int \psi^{*}\hat{F}\psi\, dV = \int \left(\hat{F}\psi\right)^{*}\psi\, dV.$$

$$f\int \psi^{*}\psi\, dV = f^{*}\int \psi^{*}\psi\, dV.$$

$$\Downarrow$$

$$f = f^{*}$$

ПОСТУЛАТЫ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

Свойство ортогональности собственных функций квантовомеханических операторов

Пусть ψ_k, ψ_n – собственные функции эрмитова оператора $\hat{F}$, т.е. выполняется:

$$\hat{F}\psi_k = f_k\psi_k; \qquad \hat{F}\psi_n = f_n\psi_n.$$

Из условия эрмитовости $\int \psi_k^* \hat{F}\psi_n dV = \int \left(\hat{F}\psi_k\right)^* \psi_n dV$

$$f_n \int \psi_k^* \psi_n dV = f_k \int \psi_k^* \psi_n dV$$

$$\boxed{(f_n - f_k)\int \psi_k^* \psi_n dV = 0}$$

при $n \neq k$ $f_n - f_k \neq 0$ следует $\int \psi_k^* \psi_n dV = 0$

при $n = k$ $f_n - f_k = 0$ следует $\int \psi_k^* \psi_n dV = 1$

Свойство ортогональности собственных функций квантовомеханических операторов

$$\boxed{\int \psi_k^* \psi_n dV = \begin{cases} 1, & k = n; \\ 0, & k \neq n. \end{cases}}$$

Система собственных функций оператора является полной системой функций

Система собственных функций квантовомеханических операторов **является полной системой функций**. Это означает, что всякая волновая функция , определенная в той же области переменных, что и собственные функции оператора, может быть разложена по собственным функциям, то есть представлена в виде ряда:

$$\int \psi_m^* dV \ \cdot \quad \Big| \quad \psi = \sum_n c_n \psi_n$$

$$\int \psi_m^* \psi \, dV = \sum_n c_n \int \psi_m^* \psi_n \, dV$$

помним

$$\int \psi_k^* \psi_n dV = \begin{cases} 1, & k = n; \\ 0, & k \neq n. \end{cases}$$

$$\int \psi_m^* \psi \, dV = \sum_n c_n \delta_{mn} = c_m \quad \Rightarrow \quad \boxed{c_m = \int \psi_m^* \psi \, dV}$$

ПОСТУЛАТЫ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

Спектры собственных значений квантовомеханических операторов

1. Спектр собственных значений оператора координаты непрерывен. Действительно, так как действие этого оператора на волновую функцию сводится к умножению ее на координату, то уравнение задачи на собственные значения оператора, имеет вид:

$$\hat{x}\psi = x\psi$$

2. Спектр собственных значений оператора импульса также непрерывен. Уравнение задачи на собственные значения оператора, имеет вид:

$$\hat{p}_x\psi = -i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial x} = p_x\psi$$

$$\psi_p(x) = C\cdot e^{\frac{i}{\hbar}xp_x}$$

Спектры собственных значений квантовомеханических операторов

3. Примером дискретного спектра является спектр собственных значений оператора проекции момента импульса :

$$\hat{L}_z\psi = -i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial\varphi} = L_z\psi$$

дискретно меняющееся собственное значение

Общее решение $$\psi(\varphi) = C\cdot e^{\frac{i}{\hbar}L_z\varphi},$$

где $$L_z = m\hbar, \quad m = 0, \pm1, \pm2, \ldots$$

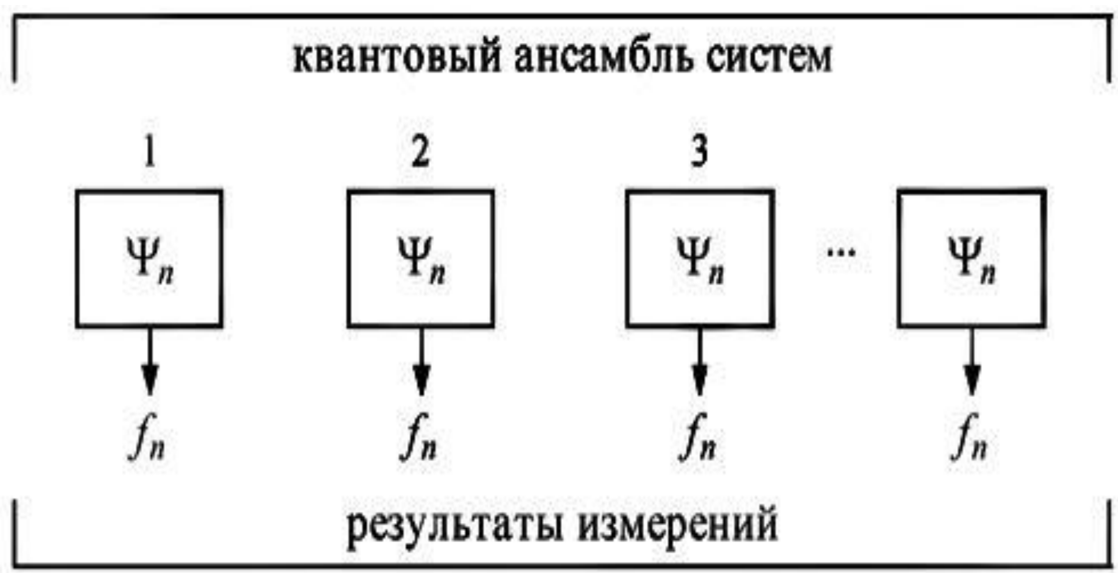
Проблема измерений в квантовой механике

Третий постулат квантовой механики:
результате измерений физической величины f в любой квантовой системе могут быть получены только такие значения, которые являются собственными значениями соответствующего оператора $\hat{F}$.

? Какое конкретное собственное значение оператора $\hat{F}$ будет результатом измерения физической величины в квантовом состоянии, описываемом волновой функцией ψ.

Возможность 1

Если состояние частицы в квантовой системе описывается волновой функцией ψ_n, которая является одной из собственных функций оператора $\hat{F}$, то в этом квантовом состоянии физическая величина имеет определенное значение, равное f_n.



ПОСТУЛАТЫ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

Возможность 2

- Если волновая функция ψ не будет является собственной функцией оператора $\hat{F}$. Тогда физическая величина не имеет определенного значения.

- Измерения в различных системах квантового ансамбля будут давать различные значения $f_1, f_2, f_{n3},\dots, f_n$

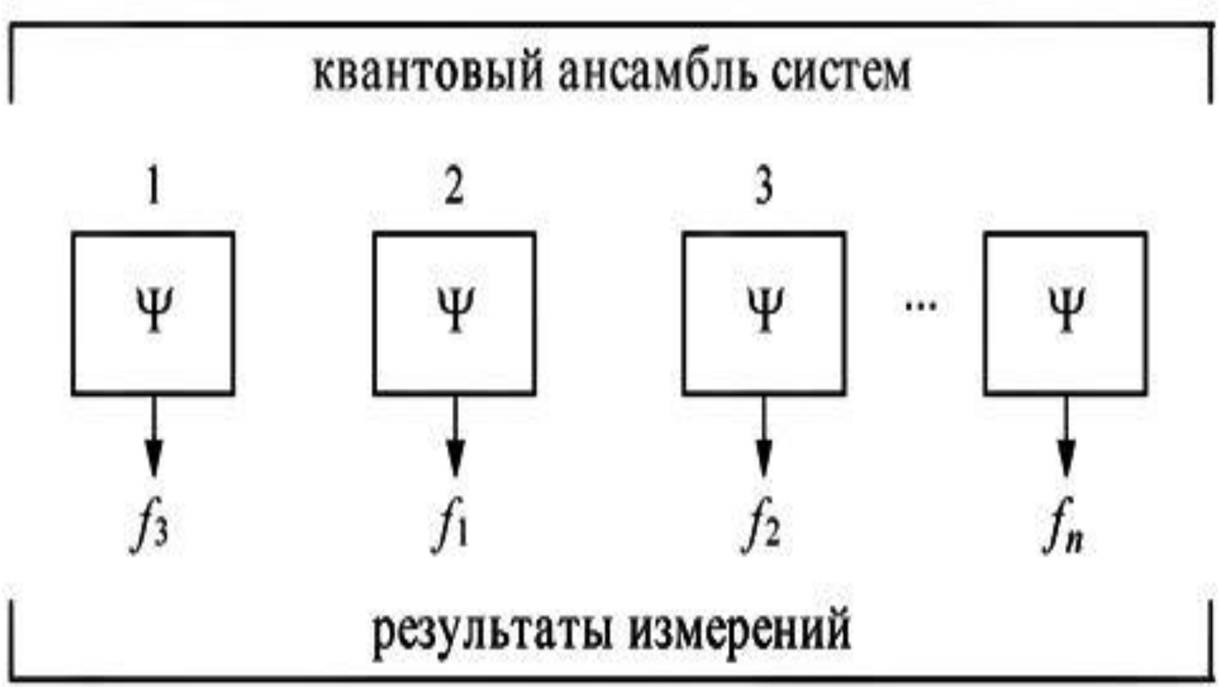
- Каждое значение f_i в квантовом ансамбле будет обнаруживаться с определенной вероятностью ρ_i.

- В таких квантовых системах, в которых физическая величина не имеет определенного значения, находят среднее значение, то есть математическое ожидание результатов измерений в серии из большого числа измерений :

$$\langle f \rangle = \sum_{i=1}^{n} \rho_i f_i$$

Возможность 2

- Измерения в различных системах квантового ансамбля будут давать различные значения $f_1, f_2, f_{n3}, \ldots, f_n$.



ПОСТУЛАТЫ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

Необходимо рассчитать вероятности ρ_i обнаружения f_i значения.

$$\psi = \sum_i c_i \psi_i,$$

где ψ_i – собственные функции оператора $\hat{F}$.

$$\rho_i = |c_i|^2$$

$$\langle f \rangle = \sum_{i=1}^{n} \rho_i f_i = \sum_{i=1}^{n} |c_i|^2 f_i = \sum_{i=1}^{n} c_i^* c_i f_i \qquad = \int \psi^* \hat{F} \psi \, dV$$

$$c_i = \int \psi_i^* \psi \, dV$$

Формула для расчета среднего значения

$$\boxed{\langle f \rangle = \int \psi^* \hat{F} \psi \, dV}$$

Четвертый постулат квантовой механики.

ПОСТУЛАТЫ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

Скорость изменения со временем среднего значения физической величины

Пусть оператор $\hat{F}$ не зависит явно от времени.

$$\langle f \rangle = \int \psi^* \hat{F} \psi \; dV$$

$$\frac{\partial \langle f \rangle}{\partial t} = \int \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \hat{F} \psi \; dV + \int \psi^* \hat{F} \frac{\partial \psi}{\partial t} \; dV$$

$$-i\hbar \frac{\partial \psi^*}{\partial t} = \hat{H} \psi^* \qquad i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H} \psi$$

ПОСТУЛАТЫ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

$$\frac{\partial \langle f \rangle}{\partial t} = \frac{i}{\hbar} \int \psi^* \left(\hat{H}\hat{F} - \hat{F}\hat{H} \right) \psi \ \mathrm{dV}.$$

$$\int \psi^* \frac{\partial \hat{F}}{\partial t} \psi \ \mathrm{dV} = \int \psi^* \frac{i}{\hbar} \left(\hat{H}\hat{F} - \hat{F}\hat{H} \right) \psi \ \mathrm{dV}.$$

$$\frac{\partial \hat{F}}{\partial t} = \frac{i}{\hbar} \left(\hat{H}\hat{F} - \hat{F}\hat{H} \right) = \frac{i}{\hbar} \left[\hat{H}, \hat{F} \right].$$

ПОСТУЛАТЫ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

$$\frac{\partial \hat{F}}{\partial t} = \frac{i}{\hbar}\left(\hat{H}\hat{F} - \hat{F}\hat{H}\right) = \frac{i}{\hbar}\left[\hat{H}, \hat{F}\right].$$

Если оператор $\hat{F}$ некоторой физической величины не зависит явно от времени и коммутирует с гамильтонианом $\hat{H}$, то среднее значение этой физической величины не изменятся со временем.

В квантовой механике такие величины называются интегралами движения, соответствующими различным законам сохранения.

Одновременное измерение разных физических величин

Физическая величина a может быть точно измерена только в системе, квантовое состояние которой описывается одной из собственных функций соответствующего этой физической величине оператора $\hat{A}$.

$$\hat{A}\psi_n = a_n \psi_n$$

Физическая величина b может быть одновременно измерена с a, если операторы $\hat{A}$ и $\hat{B}$ имеют общую систему собственных функций .

Если два оператора имеют общую систему собственных функций, то между ними существуют коммутационные соотношения :

$$\left[\hat{A}, \hat{B}\right] = 0.$$

Одновременное измерение разных физических величин

$$\hat{B} \quad \Big| \qquad \hat{A}\psi_n = a_n\psi_n$$

$$\hat{A} \quad \Big| \qquad \hat{B}\psi_n = b_n\psi_n$$

Одновременное измерение разных физических величин

$$\hat{B}\hat{A}\psi_n = a_n\hat{B}\psi_n = \boxed{a_n b_n \psi_n}$$

$$\hat{A}\hat{B}\psi_n = b_n\hat{A}\psi_n = \boxed{b_n a_n \psi_n}$$

$$\Downarrow$$

$$\hat{B}\hat{A}\psi_n = \hat{A}\hat{B}\psi_n$$

$$\Downarrow$$

$$\left[\hat{A}, \hat{B}\right] = 0 \quad \Leftarrow \quad \hat{B}\hat{A} = \hat{A}\hat{B}$$

Одновременное измерение разных физических величин

В квантовой механике две физические величины могут быть одновременно измерены, если их операторы коммутируют.

Коммутативность операторов служит выражением возможности одновременного точного измерения соответствующих им физических величин.

Обратно, некоммутативность операторов указывает на невозможность такого одновременного точного измерения двух соответствующих им физических величин.

Нельзя одновременно точно измерить координату частицы и проекцию ее импульса.

$$\left[\hat{p}_x, \hat{x}\right] = -i\hbar$$

Соотношения неопределенностей Гейзенберга говорят о том же.

$$\Delta\hat{p}_x \Delta\hat{x} \geq h$$