Глава 11. Основные положения квантовой теории

11.1. Основные постулаты кв. теории

① Состояние кв. частицы.

Волновая функция $\underline{\Psi}$ — опр-ет сост. сист.

В коорд. представлении $\Psi = \Psi(\vec{r}_1, \ldots, \underline{\vec{r}_N, t})$.

$\vec{r}_i$, $i = \overline{1, N}$ — коорд. частиц в сист.

$$\underline{\Psi : \mathbb{R}^{3N+1} \to \mathbb{C}};$$

$$\Psi = \underbrace{\tilde{A}(\vec{r}_1, \ldots, \vec{r}_N, t)}_{\substack{\text{комп. ампл.} \\ \text{(медленно изм. ф-я} \\ \text{коорд. и } t)}} e^{i \underbrace{\Phi(\vec{r}_1, \ldots, \vec{r}_N, t)}_{\substack{\text{фаза} \\ \text{(быстро изм.} \\ \text{ф-я коорд. и вр.)}}}}$$

② **Принцип суперпозиции.** Если сист. может находится в сост., опис. ф-ями Ψ_1 и Ψ_2, то эта сист. может также находится в сост., волн. ф-я которого явл. суперпозицией Ψ_1 и Ψ_2:

$$\Psi = C_1\Psi_1 + C_2\Psi_2 \quad ; \quad C_1, C_2 \in \mathbb{C}$$

Кл. физ.

Физ. вел. L:

$1: \; L_1$

$2: \; L_2$

$1+2: \; L = L_1 + L_2$

Кв. физика

$1: \; \Psi_1 \, ; \; L_1$

$2: \; \Psi_2 \, ; \; L_2$

} 3 нел. физ. вел.

$1+2: \; \Psi = C_1 \Psi_1 + C_2 \Psi_2$

При измерении L в Ψ получаем:

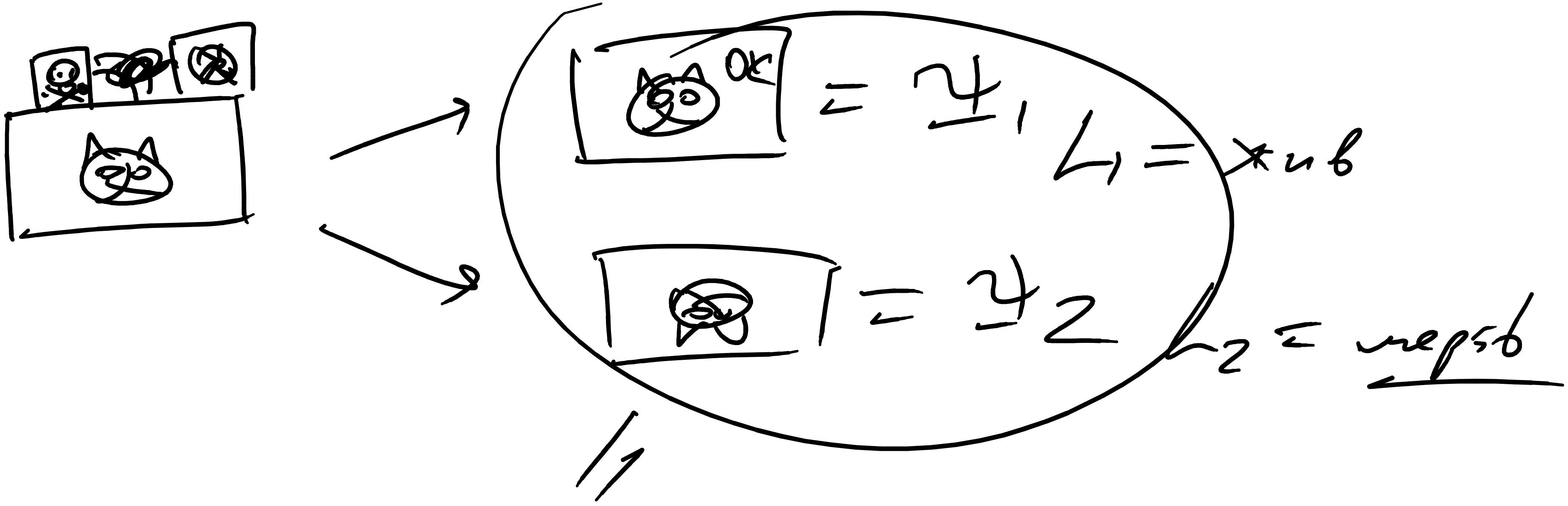
либо L_1 либо L_2

Вероятность обнаружить сост. в одном из сост. опр-я удельным весом сост. в суперпозиции:

$$P_1 = \frac{|C_1|^2}{|C_1|^2 + |C_2|^2} \quad ; \quad P_2 = \frac{|C_2|^2}{|C_1|^2 + |C_2|^2}$$

С вероятностью P_1 получаем при измерении L_1

P_2 —— " —— L_2



$$\Psi = C_1 \Psi_1 + C_2 \Psi_2$$

L – жив/мертв

③ Физические величины

Физ. вел $\Rightarrow$ в кв. мех ей соотв. $\Rightarrow$ Оператор физ. вел.

Оператор – правило/алгоритм, согл. кот. одной ф-и ставится в соотв другая

$\hat{A}, \hat{B}$ – ① – обозн. оператора.

Если $\hat{A}$ ставит ф-и u в соотв. ф-ю v, то

$$\boxed{\hat{A}u = v}$$

Ⓔ $\hat{A} = \frac{d}{dx}$; $\hat{A}f(x) = f'(x)$

При измерении физ. вел. f, соотв. оператору $\hat{F}$, получаем знач-е $f_1, f_2, \dots, f_n, \dots$

$$\boxed{\hat{F}\Psi_n = f_n \Psi_n}$$

; ур-е на соб. знач. и соб. ф-и

Здесь $\{f_n\}$ – набор собственных значений оператора $\hat{F}$

$\{\Psi_n\}$ – набор собственных ф-й $\hat{F}$

Представим $\forall \Psi$ в виде: $\Psi = \sum_j C_j \Psi_j$ — собств. ф-ии оператора $\hat{F}$.

$\Rightarrow$ При измерении физ. вел. f получим знач-е f_n с вероятностью

$$\boxed{P_n = \frac{|C_n|^2}{\sum_j |C_j|^2}}$$

④ Средние значения наблюдаемых физ. вел.

Рассм. физ. вел. f, с оператором $\hat{F}$.

Тогда ср. знач. f в сост. Ψ:

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

Интегралы – по всей обл. изм-я перем.

Ψ^* – компл. сопр. ф-я Ψ.

Здесь $dV = dx_1 \cdot dx_2 \cdot \ldots \cdot dx_N$

$\Psi = \Psi(x_1, x_2, \ldots, x_N, t)$

произв-е всех дифф-лов перем., от кот завис. Ψ

Если $\int \Psi^* \Psi \, dV \equiv \int |\Psi|^2 dV = 1$, то

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

⑤ Уравнение движения

Ур. движ. описывает изм. сост. со временем — эволюцию сост.

В кв. мех. ур. движ.:

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

Уравнение Шредингера

Оператор Гамильтона (гамильтониан) — $\hat{H}$

Для одной нерел. частицы:

$$\boxed{\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + \hat{U}(\vec{r},t)}$$

$\hbar$ — пост. Планка

m — масса част.

$\hat{U}(\vec{r},t)$ — оператор потенц. эн.

В декс. СК: $\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$ — оператор Лапласа.

$$\Delta = \nabla^2$$

11.2. Волновая функция

Физ. вел. — св-во сист., кот. можно измерить

— сопоставить число. (вещественное)

Физ. вел. $\in \mathbb{R}$.

$\Psi \in \mathbb{C}$

$\Rightarrow$ Ψ — не явл. физ. вел

и не измерима!

Простейшая физ. инф-я, кот. можно извлеч. из волн ф-и

$$dP(\vec{r},t) = |\Psi(\vec{r},t)|^2 dV$$

вероятность того, что част. находится в объеме dV вокруг. точки с р-в $\vec{r}$.

$$\Rightarrow \boxed{|\Psi|^2 = \frac{dP}{dV}}$$ — плотность вероятности обнаружить частицу в данной точке пр-ва в данный мом. вр

Рассм. $\underbrace{\int |\Psi|^2 dV = \int dP}$

все пр-во

Т.к. вероятность того, что част. находится где-то в V равна 1

$$\Rightarrow \boxed{\int |\Psi|^2 dV = 1}$$ условие нормировки

Волн. ф-я Ψ опр-на с точностью до произв. множителя. И усл-е норм-ровки не явл. обязательным.

$\Rightarrow$ Соотн. для dP выше — для норм. ф-и.

Для не норм. ф-и:

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

$\exists$ случаи, когда $\int |\Psi|^2 dV$ расходится

$\Rightarrow$ используют не норм. ф-ции Ψ,

либо другие усл. нормировки.

Волн. ф-я свободной частицы (плоская волна де Бройля)

$$\Psi = \tilde{A} e^{-i(\omega t - \vec{k}\vec{r})}$$

$$\omega = \frac{E}{\hbar}; \qquad \vec{k} = \frac{\vec{p}}{\hbar};$$

$$\varphi = -\omega t + \vec{k}\vec{r}$$

$$\Psi^*\Psi = (\tilde{A}e^{+i\varphi})^*\tilde{A}e^{i\varphi} = \tilde{A}^*e^{-i\varphi}\tilde{A}e^{i\varphi} =$$

$$= \tilde{A}^*\tilde{A}e^{-i\varphi+i\varphi} = |\tilde{A}|^2 = const$$

$\int |\Psi|^2 dV = \int |\tilde{A}|^2 dV$ — расходится.

11.3. Операторы физ. вел.

Св-ва операторов:

1) Сумма $\hat{S} = \hat{A} + \hat{B}$

$$\forall u, \quad \hat{S}u = \hat{A}u + \hat{B}u$$

2) Произв-е на число $\hat{F} = k \cdot \hat{A}$

$$\forall u \quad \hat{F}u = k \cdot \hat{A}u$$

3) Произв-е операторов $\hat{P} = \hat{A} \cdot \hat{B}$

$$\forall u: \quad \hat{P}u = \hat{A}(\hat{B}u)$$

	Дистрибутивность	Коммутативность
Сумма	+	+
Произв. на число	+	+
Произв-е операторов	+	—

Т.о. в общ. случае $\underline{\hat{A}\hat{B} \neq \hat{B}\hat{A}}$ — :

$\hat{A}\hat{B} \neq \hat{B}\hat{A}$ — операторы $\hat{A}$ и $\hat{B}$ не коммутируют

$\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A}$ — $\hat{A}$ и $\hat{B}$ коммутируют

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

Св-ва операторов физ. вел.

1) Линейность. Следствие принципа суперпозиции

$$\hat{F}(C_1\Psi_1 + C_2\Psi_2) = C_1\hat{F}\Psi_1 + C_2\hat{F}\Psi_2$$

$\hat{F}$ – линейный оператор

2) Самосопряженность (эрмитовость)

$\forall\ \hat{F}\ \exists\ \hat{F}^{+}$ – $\boxed{\text{эрмитово сопряженный}}$ $\hat{F}$,

т.ч. $\int \psi^{*} \hat{F} \varphi \, dV = \int (\hat{F}^{+} \psi^{*}) \varphi \, dV$

$\hat{F} = \hat{F}^{+}$ – (эрмитов) самосопр. оператор

$$\int \psi^{*} \hat{F} \varphi \, dV = \int (\hat{F} \psi^{*}) \varphi \, dV$$

Следствие требования $\underline{\langle f \rangle = \langle f \rangle^{*}}$ –

вещественность ср. знач. физ. вел.

11.4. Теорема Эренфеста

Как найти оператор физ. вел. ?

Теорема Эренфеста. Если в кл. физике для некот. физ. вел. справедливо соот-е / формула, то в кв. мех. такое же соот-е / формула справедливо для операторов этих физ. вел.

В кл. мех. коорд. и имп. сист. (в т.ч. обобщ.) явл. динамич. перем., а все физ. вел. — ф-и дин. перем.

Рассм. волн. ф-ю своб. частиц. (Волна де Бройля):

$$\Psi = \tilde{A}\, e^{-i(\omega t - \vec{k}\vec{r})} = \tilde{A}\, e^{-\frac{i}{\hbar}(Et - \vec{p}\vec{r})}$$

$\vec{p}\vec{r} = p_x x + p_y y + p_z z$

Рассм. $\dfrac{\partial \Psi}{\partial x} = \tilde{A}\left(-\dfrac{i}{\hbar}\right)(-p_x)\, e^{-\frac{i}{\hbar}(Et - \vec{p}\vec{r})}$

Ψ

$$\Rightarrow \frac{\partial \Psi}{\partial x} = \frac{i}{\hbar} p_x \cdot \Psi$$

Согласно 3-му постулату: $\hat{p}_x \Psi = p_x \Psi$

$$p_x \Psi = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial \Psi}{\partial x} = \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\right)\Psi$$

$\Rightarrow$ $\boxed{\hat{P}_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}}$ Оператор проекции x импульса

Аналогично $\hat{P}_y = -i\hbar\frac{\partial}{\partial y}$; $\hat{P}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial z}$;

$\hat{\vec{p}} = -i\hbar\nabla$ | оператор (вектора) импульса

В коорд. пр-и оператором координаты явл. оператор умножения на эту коорд.:

$$\hat{x}\Psi = x\cdot\Psi$$

Физ. вел.	Класс. ф-ла	Кв. ф-ла
Радиус-в-р.	$\vec{r} = \vec{e}_x x + \vec{e}_y y + \vec{e}_z z$	$\hat{\vec{r}} = \vec{e}_x \hat{x} + \vec{e}_y \hat{y} + \vec{e}_z \hat{z}$
Импульс	$\vec{p} = \vec{e}_x p_x + \vec{e}_y p_y + \vec{e}_z p_z$	$\hat{\vec{p}} = -i\hbar \nabla$
Кин. эн.	$T = p^2/2m$	$\hat{T} = \frac{\hat{p}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta$
Мех. момент (импульса)	$\vec{L} = [\vec{r}\vec{p}] = \begin{vmatrix} \vec{e}_x & \vec{e}_y & \vec{e}_z \\ x & y & z \\ p_x & p_y & p_z \end{vmatrix}$	$\hat{\vec{L}} = [\hat{\vec{r}}\hat{\vec{p}}] = -i\hbar \begin{vmatrix} \vec{e}_x & \vec{e}_y & \vec{e}_z \\ x & y & z \\ \partial/\partial x & \partial/\partial y & \partial/\partial z \end{vmatrix}$
Проекции мех. момента	$L_x = y p_z - z p_y$	$\hat{L}_x = -i\hbar\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right)$
	$L_z = x p_y - y p_x$	$\hat{L}_z = -i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right)$
в сф. СК	$L_\varphi = p_\varphi$	$\hat{L}_\varphi = -i\hbar\, \underline{\partial/\partial\varphi}$

Пот. эн. для одноэл. атома	$U = -\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r}$	$\hat{U} = -\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r}$ $\hat{r} = r$
Полная энергия одноэл. атома	$E = T + U$	$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta - \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r}$

11.5. Точное измерение физ. вел.

При многокр. изм. физ. вел. — получаем разные знач. в общ. случ.

Хар-ка откл-я от ср. знач. — дисперсия

$$\sigma^2 = \langle (f - \langle f \rangle)^2 \rangle.$$

Точн. изм — все знач. одинаковы!

Критерий точного изм. $\sigma^2 = 0$

В кв. мех.: $f \to \hat{F}$; $\delta f = f - \langle f \rangle \to \hat{\delta f} = \hat{F} - \langle f \rangle$

Рассм. $\sigma^2 = \langle (\delta f)^2 \rangle = /$ Пусть $\int |\Psi|^2 dV = 1 / =$

$= \int \Psi^* (\hat{\delta f})^2 \Psi dV = \int \Psi^* (\hat{F} - \langle f \rangle)^2 \Psi dV =$

$=$ / применяем эрмитовость / $=$

$$= \int (\hat{F} - \langle f \rangle) \Psi^* \cdot (\hat{F} - \langle f \rangle) \Psi \, dV =$$

$$= / \langle f \rangle = \langle f \rangle^* ; \ \hat{F}^+ = \hat{F} / = \int \left((\hat{F} - \langle f \rangle) \Psi \right)^* \times$$

$$\times (\hat{F} - \langle f \rangle) \Psi \, dV = \int |(\hat{F} - \langle f \rangle) \Psi|^2 \underline{dV = 0}$$

Т.к. $\underline{|(\hat{F} - \langle f \rangle)\Psi|^2 \geq 0} \ \forall \Sigma$.

$$\Rightarrow \quad \underline{\hat{F} \Psi = \langle f \rangle \Psi} ; \qquad \text{и т.к. } \langle f \rangle = f$$

$$\Rightarrow \hat{F} \Psi = f \Psi$$

Т.е. физ. вел. измерима точно только в сост., опис. соб. ф-ей оператора физ. вел.

$\{f_n\}$ – спектр.

11.6. Одновременное измерение двух физ. вел.

1) Рассм. физ. вел. a и b с соотв. операторами $\hat{A}$ и $\hat{B}$.

Пусть a и b одновременно измеримы.

$\Rightarrow \exists$ волн. ф-я Ψ, кот. явл. с.ф. для $\hat{A}$ и $\hat{B}$;

$$\hat{A}\underline{\psi} = a\underline{\psi}; \quad \hat{B}\underline{\psi} = b\underline{\psi};$$

Рассм. $\hat{A}\hat{B}$ и $\hat{B}\hat{A}$:

$$\hat{A}\hat{B}\underline{\psi} = \hat{A}(\hat{B}\underline{\psi}) = \hat{A}(b\underline{\psi}) = b(\hat{A}\underline{\psi}) = b\cdot a\underline{\psi}.$$

$$\hat{B}\hat{A}\underline{\psi} = a\cdot b\cdot\underline{\psi}.$$

$$\Rightarrow (\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})\underline{\psi} = (ba - ab)\underline{\psi} = 0.$$

$$\Rightarrow \quad [\hat{A}, \hat{B}] = 0.$$

2) Рассм. коммутирующие операторы $\hat{A}$ и $\hat{B}$:

$$[\hat{A},\hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = 0; \Rightarrow \hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A}.$$

Пусть Ψ – соб. ф-я $\hat{B}$ с соб. числом b: $\hat{B}\Psi = b\Psi$.

$$\Rightarrow \hat{B}(\hat{A}\Psi) = \hat{A}\hat{B}\Psi = \hat{A}(b\Psi) = b(\hat{A}\Psi).$$

$$\Psi' = \hat{A}\Psi \Rightarrow \hat{B}\Psi' = b\Psi'$$

Т.о. $\Psi' = const \cdot \Psi$ Обозн. $const = a$

$$\Rightarrow a\Psi = \hat{A}\Psi.$$

$\Rightarrow$ Необх. и дост. усл-ем точного измерения двух физ. вел. в одном сост. кв. сист. явл. коммутативность соотв. операторов

$$\boxed{[\hat{A}\hat{B}] = 0}$$

Рассм. некомм-е операторы $\hat{A}$ и $\hat{B}$:

$\underline{[\hat{A}\hat{B}] = i\hat{C}}$; $\hat{C}$ – явл. эрм. и лин. опер. и ему соотв. некая физ. вел.

Можно показать, что если $[\hat{A}\hat{B}] = i\hat{C}$, то

$$\langle \delta a^2 \rangle \langle \delta b^2 \rangle \geqslant \frac{\langle c^2 \rangle}{4};$$

$\langle \delta a^2 \rangle = \sigma^2$

Неопр-сть физ. вел. f: $\Delta f = \sqrt{\sigma^2}$

Тогда $\boxed{\Delta a \cdot \Delta b \geqslant \frac{\langle |c| \rangle}{2}}$ Соотн. неопр-ей Гейзенберга

Рассм. $a = x$; $b = p_x$: $[\hat{x}\hat{p}_x]\Psi = \hat{x}(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x})\Psi - (-i\hbar\frac{\partial}{\partial x})(\hat{x}\Psi) =$

$$= -i\hbar\left(x\frac{\partial \Psi}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x}(x\Psi)\right) = -i\hbar\left(\cancel{x\frac{\partial \Psi}{\partial x}} - \Psi - \cancel{x\frac{\partial \Psi}{\partial x}}\right) = i\hbar\Psi$$

$$\Rightarrow \underline{[\hat{x}\hat{p}_x] = i\hbar} \Rightarrow \Delta x \Delta p_x \geqslant \hbar/2$$

$[\hat{y}\,\hat{p}_x] = 0$; y и p_x измеримы одновременно!