§ Ур. Шрёд.

$$\boxed{i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi + U\cdot\Psi}$$

– временное ур. Шрёд-ие

$U \equiv U(x,y,z,t)$ – потенц. эн.

$\Psi(x,y,z,t) \equiv \Psi(\vec{r},t)$ – „пси-функция"

$\vec{F} = \vec{\nabla}U$

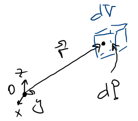
§ Физический смысл пси-функции

Правильн. интерпрет-я пси-функции Макс Борн (1926 г.):

$\Psi(\vec{r},t) \in \mathbb{C}$ явл. компл. ф-ей.

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

– плотность вер-ти обнаружить частицу в малом объеме dV вокруг точки с рад.-вектором $\vec{r}$ в заданный момент времени t



dP – вер-ть того, что частица находится в ∞-малом объеме dV в окрестности $\vec{r}$ в момент t.

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

Суммируя (интегрир-я) всевозможные полож-я частицы ⇒ вер-ть д. быть $= 1$:

$$P = \int dP = \int\limits_{\substack{\text{по всему}\\ \text{пр-ву местопол-й}\\ \text{частицы}}} |\Psi(\vec{r},t)|^2 dV = 1$$

$$\int |\Psi(\vec{r},t)|^2 dV = 1$$

– усл. нормировки

Ψ, удовл-я усл. нормир-ки, наз. нормированной!

т.к. Ψ хар-т вер-ть нахожд. частицы в точке простр-ва

Физич. смысл м. иметь только такие реш-я ур. Шрёд., для кот-х Ψ д. быть всюду:

- конечной
- однозначной
- непрерывной
- гладкой

} стандартные условия

§ Стацион. сост-я. Стацион. ур. Шрёд.

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi + U\cdot\Psi$$

Пусть потенц. эн-я частицы не зависит явно от времени

т.е. $U(\vec{r},t) = U(\vec{r})$

$$\Rightarrow \quad \Psi(\vec{r},t) = \Psi(\vec{r})\cdot e^{-\frac{i}{\hbar}E\cdot t}$$

где: E – полная эн-я частицы, кот. остаётся постоянной в стационарном поле $U(\vec{r})$

$$i\hbar\cdot\Psi(\vec{r})\cdot\cancel{e^{-\frac{i}{\hbar}E\cdot t}}\cdot\left(-i\frac{E}{\hbar}\right) = -\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\cancel{e^{-\frac{i}{\hbar}E\cdot t}}\cdot\nabla^2\Psi(\vec{r}) + U(\vec{r})\cdot\Psi(\vec{r})\cdot\cancel{e^{-\frac{i}{\hbar}E\cdot t}}$$

!

$$\Rightarrow \boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi(\vec{r}) + U(\vec{r})\cdot\Psi(\vec{r}) = E\cdot\Psi(\vec{r})}$$

– ур. Шрёдингера для стац. сост-й (стационарное ур. Шр.)

Стацион. сост-я – такие сост-я, в кот-х все наблюдаемые физическ. вел-ны не меняются с течен. времени

Дейст-но: в стац. сост-х:

$$|\Psi(\vec{r},t)|^2 = \Psi(\vec{r})\cdot\cancel{e^{-\frac{i}{\hbar}E\cdot t}}\cdot\Psi^*(\vec{r})\cdot\cancel{e^{\frac{i}{\hbar}E\cdot t}} = |\Psi(\vec{r})|^2$$

– не зависит от времени

+ Стац. ур. Шрёд. оказыв-ся разрешимой для некоторых дискретных значений эн-й E_i, кот-е естественно получ-е из стандартных усл-й

§ Основные постулаты квантовой мех-ки

§ Осн. постулаты кв. мех-ки.

$\Psi(\vec r, t)$

$\psi(\vec r)$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\nabla^2\psi + U\cdot\psi = E\cdot\psi$$

м. заметить, что

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\nabla^2\psi + U\cdot\psi = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U\right]\psi = \hat H\psi$$

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

– закодир-е действие

– оператор ?

Опр: Линейный оператор $\hat Q$ – .. правило: одной ф-ии (φ) ставится в соответ-е другая ф-я (f)

$$f = \hat Q\varphi$$

линейность:

$$\hat Q(\alpha_1\cdot\varphi_1 + \beta_1\cdot\varphi_2) = \alpha_1\cdot\hat Q\varphi_1 + \beta_1\cdot\hat Q\varphi_2$$

$\Rightarrow$ стац. ур. Шрёд: м. записать как $\hat H\psi = E\cdot\psi$

Постулаты

1. Всякой физ. вел. q м.б. сопоставлен $\hat Q$ (линейный, эрмитовский) опер-р. При чём совок-ть всевозм-х знач-й q, существ-х объективно и кот-е м.б. обнаружены в экспер-те, м.б. найдена из ур-я квантования: $\hat Q\psi = q\cdot\psi$

   – ур. на собственные знач-я опер-ра $\hat Q$

   совок-ть собственных значений $\{q_i\}$ наз. спектром собств. знач-й опер-ра $\hat Q$, а набор $\{\psi_i\}$ – наз. собствен-ми ф-ми.

2. Среднее знач-е любой физ. вел-ны q, реализуемое в экспер-те, находится по ф-ле:

$$\langle q\rangle = \int \psi^*\hat Q\psi\, dV$$

3. (Постулат соответ-я) Соотнош. квант. теор. д. переходить в соотнош. класс. теории

В классич. мех-ки:

$$E = \frac{\vec p^{\,2}}{2m} + U(x,y,z)$$

$\leftarrow$

В квант. мех-ки:

$$\hat H\psi = E\psi$$

$$\hat H = \underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2}_{\text{только от имп-са}} + \underbrace{U(x,y,z)}_{\text{зависит только от координат}}$$

Этот переход возможен, если:

$$\hat p_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\qquad \hat p_y = -i\hbar\frac{\partial}{\partial y}\qquad \hat p_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial z}$$

– операторы импульса

$$\hat x = x\cdot\qquad \hat y = y\cdot\qquad \hat z = z\cdot$$

– операторы координат – это опер-ры умнож-я на соответ-е координаты

Правило перехода:

Формулы класс-й физики в квант. теории следует писать, как формулы, связывающие опер-ры этих физич. вел-н

$$L(\vec r, \vec p) \longrightarrow \hat L(\hat{\vec r}, \hat{\vec p})$$

$$\hat p_i = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x_i}$$

$$\hat x_i = x_i\cdot$$

\# 1) $E = T + U = \dfrac{\vec p^{\,2}}{2m} + U(x,y,z) \rightarrow \hat H = -\dfrac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U(x,y,z)$

$\Rightarrow$ Ур-е на собствен. знач-я:

$$\hat H\psi = E\cdot\psi$$

2) $\vec L = [\vec r, \vec p] \rightarrow \vec L = \begin{vmatrix} i & j & k \\ x & y & z \\ p_x & p_y & p_z \end{vmatrix} \rightarrow \hat{\vec L} = \begin{vmatrix} i & j & k \\ x & y & z \\ \hat p_x & \hat p_y & \hat p_z \end{vmatrix}$

– момент импульса

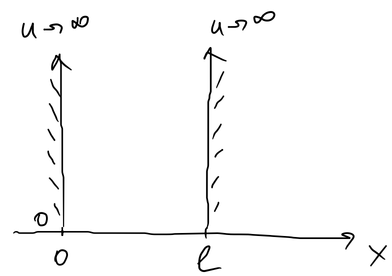
$$\hat L\psi = L\cdot\psi$$

Гл. Простейшие случаи применения ур. Шр.

§ Электрон в 1D бескон. глубокой потенц. яме.

Стац. ур. Шред. –

– $\hat{H}\psi = E\psi$ – ур. квантования для энергии!



„∞ – глубокий колодец"
или „∞ – высокая шахта"

Внутри ямы ⇒ $U = 0$

Ур. Шр.:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} + U\cdot\psi = E\cdot\psi$$

Внутри ямы $(U=0)$ ⇒ $\underline{\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}E\cdot\psi = 0}$ $\quad 0 \le x \le l$

Частица не м. выйти за пределы ямы ⇒ $\psi(0) = \psi(l) = 0$

Пусть: $k^2 = \frac{2m}{\hbar^2}E$ ⇒ $\frac{d^2\psi}{dx^2} + k^2\psi = 0$

– ур. гармон. колеб-й

$$\Rightarrow \psi(x) = A\cdot\sin(kx + \alpha)$$

$\psi(0) = A\cdot\sin\alpha = 0 \Rightarrow \alpha = 0$

$\psi(l) = A\cdot\sin k\cdot l = 0 \Rightarrow k\cdot l = \pm\pi\cdot n$

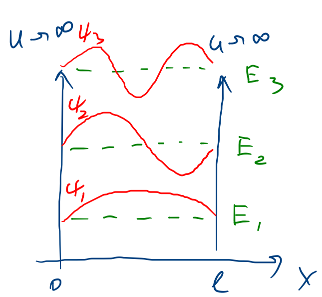
$\Downarrow$

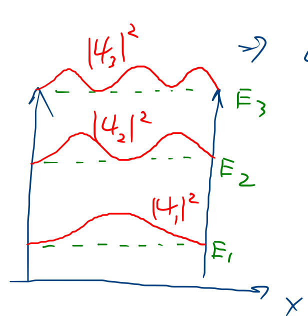
$$E_n = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ml^2}\cdot n^2 \;; \quad n = 1, 2, 3, \ldots$$

$$\Rightarrow \psi_n(x) = A\cdot\sin\frac{\pi\cdot n\cdot x}{l}$$

$$\int dp = \int_0^l |\psi(x)|^2 dx = 1$$

$$\Rightarrow \int_0^l A^2\cdot\sin^2\frac{\pi n\cdot x}{l}dx = 1 \Rightarrow A = \sqrt{\frac{2}{l}}$$



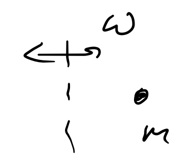


$$\Rightarrow \psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{l}}\cdot\sin\frac{n\cdot\pi\cdot x}{l}$$

⇒ для $n = 1$ частица локализована в середине ямы!

§ Гармонический осциллятор

– матер. точка (заряж-я частица), соверш-я колеб-е вблизи полож-я равновесия под действием $F_{упр} = -k\cdot x$



$\Rightarrow k = m\omega^2$

$$F = -k\cdot x \Rightarrow U = \frac{kx^2}{2}$$

$$\hat{H} = T + U = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \frac{kx^2}{2} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \frac{m\omega^2x^2}{2}$$

$$\Rightarrow \hat{H}\psi = E\cdot\psi$$

стац. ур. Шрёд.: $$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E - \frac{m\omega^2x^2}{2}\right)\psi = 0$$

– сложная задача;

решения однозначные, непрерывн. и конечные возможны, если

разрешён-е знач-е энергии: $$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega \qquad n = 0, 1, 2, \dots$$

$$\psi_n(x) = C_n \cdot e^{-\xi^2/2} \cdot H_n(\xi)$$

$$\xi = x\cdot\sqrt{m\omega/\hbar}$$

$H_n(\xi)$ – полиномы Эрмита