*ЛЕКЦИИ №*14-15
Уравнение Шредингера. Операторы физических величин

(Для студентов элитного отделения ЭТО –II)

Содержание лекции

- 1. Волновая функция. Свойства волновой функции
- 2. Уравнение Шредингера
- 3. Движение свободной частицы
- 4. Электрон в потенциальном ящике с бесконечно высокими стенками
- 5. Потенциальные барьеры

Свойства волновой функции

- Волновая функция описывает состояние частицы и отражает её корпускулярные свойства
- Волновая функция принципиально не наблюдаема
- Информацию несёт квадрат модуля волновой функции – это плотность вероятности нахождения частицы в данной точке пространства в данный момент времени

$$\left|\psi(\vec{r},t)\right|^2 = \frac{dP}{dV}$$

Свойства волновой функции

- Условие нормировки

$$P = \int_V \left|\psi(\vec{r},t)\right|^2 dV = 1.$$

- Среднее значение наблюдаемой величины напрямую связано с волновой функцией

$$\langle f(x,y,z)\rangle = \int f(x,y,z)|\psi|^2 dV$$

- Принцип суперпозиции волновых функций.

$$\psi = C_1\psi_1 + C_2\psi_2.$$

Эрвин Шредингер

- 1887-1961

Уравнение Шрёдингера

- Временное уравнение Шрёдингера

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

- Стационарное уравнение Шрёдингера

$$\nabla^2\psi+\frac{2m}{\hbar^2}(E-U)\psi=0$$

Условия, накладываемые на волновую функцию

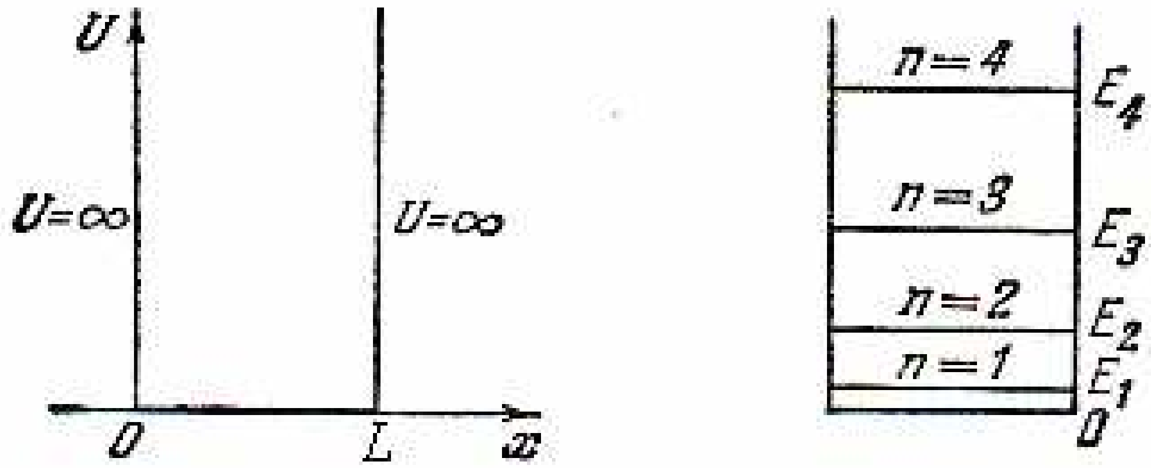
- Волновая функция должна быть конечной, непрерывной и однозначной
- Первые производные волновой функции по координатам и времени должны быть конечны, непрерывны и однозначны
- Интеграл $\int_V |\psi(\vec{r},t)|^2 \, dV$ должен сходиться

Плотность вероятности свободной частицы

$$\psi(\vec{r},t)\psi^*(\vec{r},t) = Ae^{-i(\omega t - \vec{k}\vec{r})}Ae^{i(\omega t - \vec{k}\vec{r})} = A^2 = \mathrm{const}$$

Плотность вероятности свободной частицы постоянна во всем пространстве

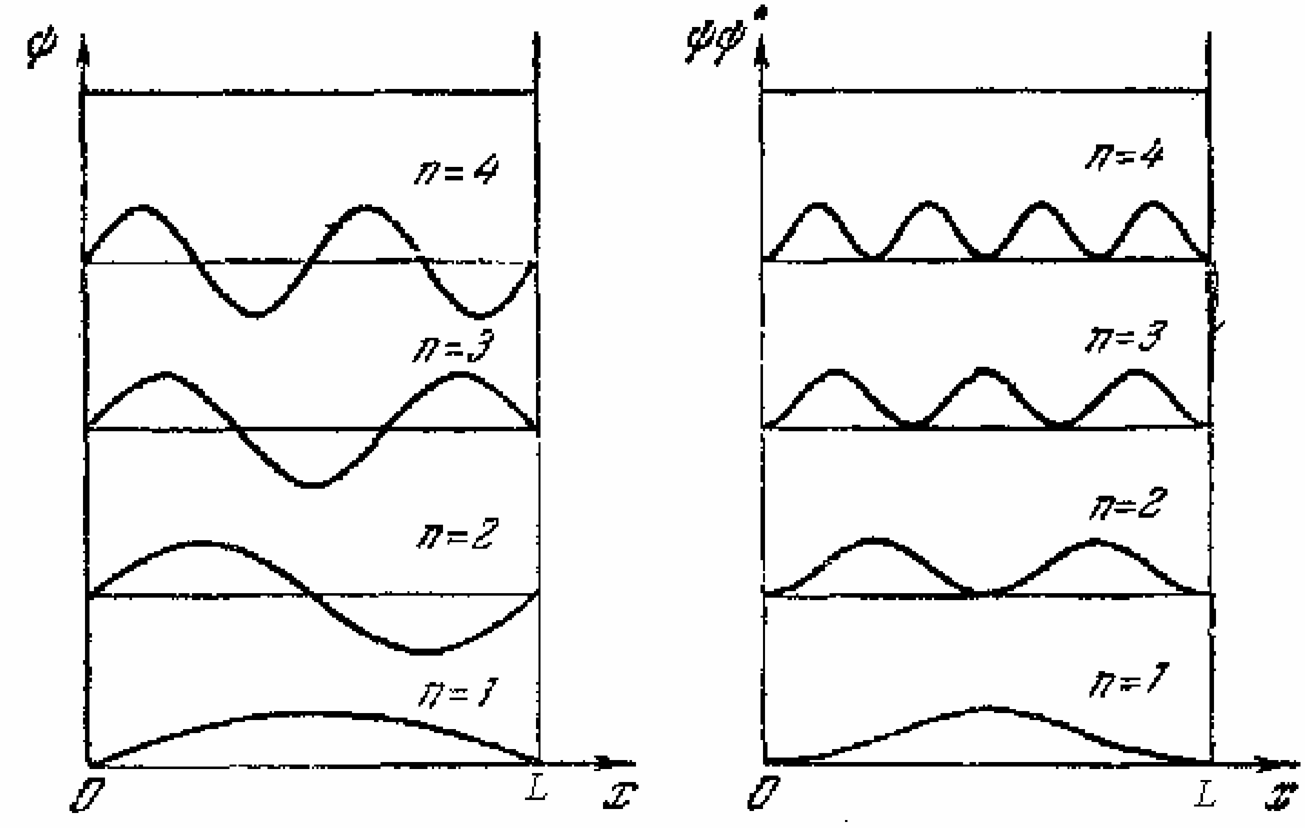
Электрон в потенциальном ящике с бесконечно высокими стенками



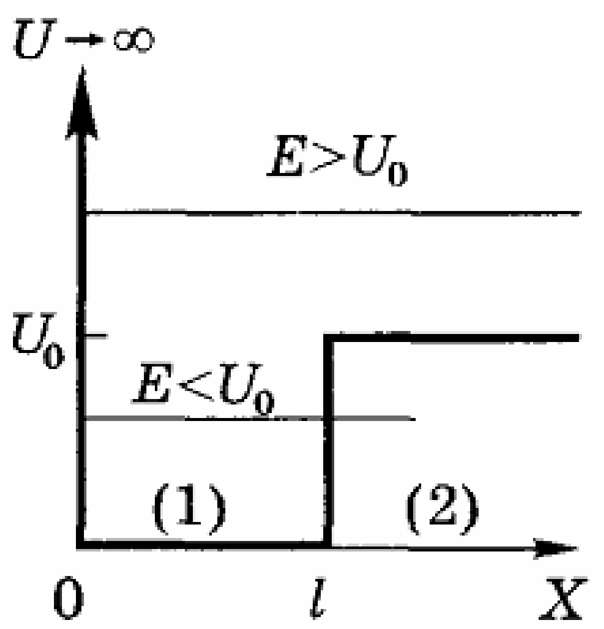
$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} n^2$$

Графики собственных волновых функций частицы в потенциальном ящике

$$\psi(x) = A\sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) = \sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$$



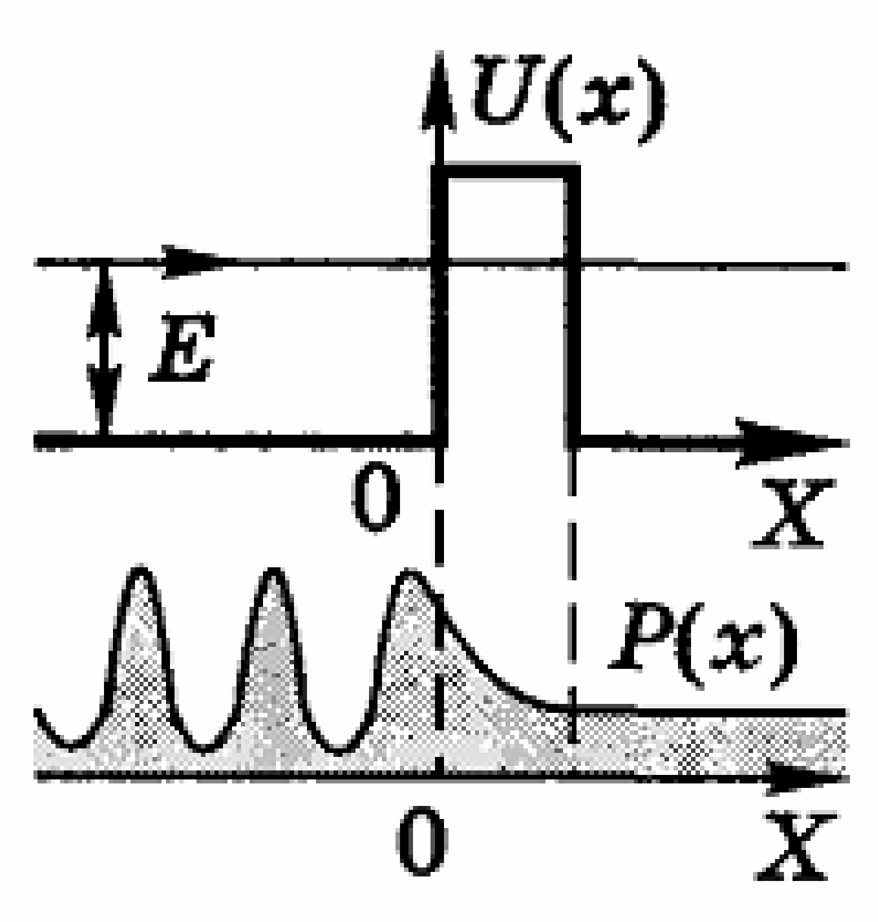
Прохождение частицы через прямоугольный потенциальный барьер



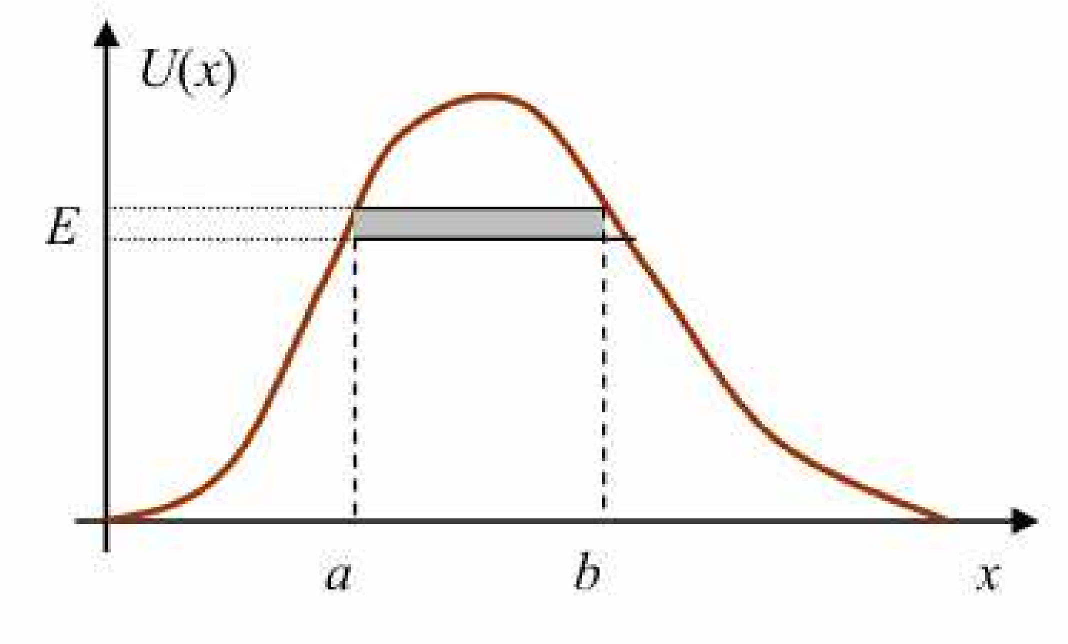
$$E < U_0$$

$$D \approx e^{-\frac{2}{\hbar}\sqrt{2m(U_0 - E)}L}$$

Туннельный эффект

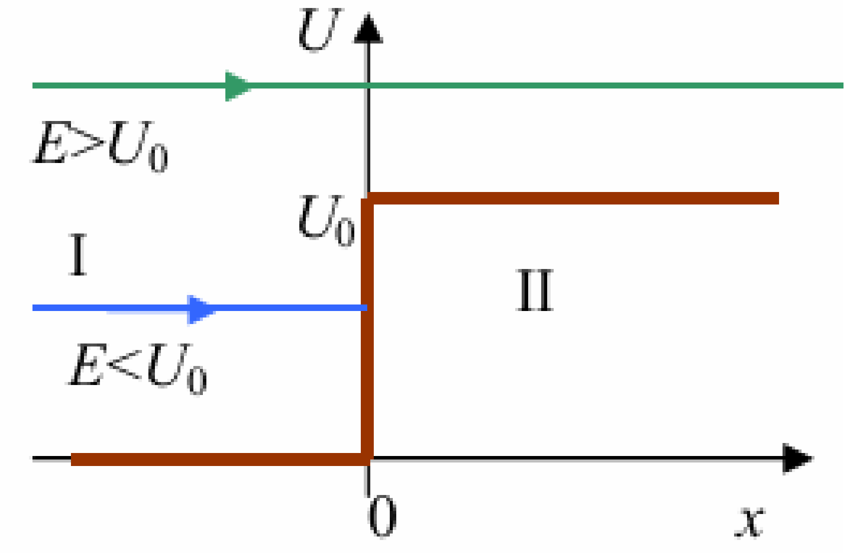


Потенциальный барьер произвольной формы



$$D \approx \exp[-\frac{2}{\hbar}\int_a^b \sqrt{2m(U_0 - E)}dx]$$

Низкий потенциальный барьер



Задача: найти коэффициент отражения *R* и коэффициент пропускания *D*.

$$E > U_0$$

$$R = \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}\right)^2; \qquad D = \frac{4k_1 k_2}{(k_1 + k_2)^2}$$

Операторы физических величин

- 1. Понятие оператора $\hat{A}$.
- 2. Некоторые свойства операторов
  - Сложение операторов. Умножение операторов. Линейные операторы
- 3. Оператор проекции импульса. Собственные функции и собственные значения операторов
- 4. Основной постулат квантовой механики
- 5.Оператор момента импульса
- 6. Оператор полной энергии. Оператор Гамильтона
- 7. Коммутативность операторов

Понятие оператора. Некоторые свойства операторов

Математический символ, указывающий какие действия (операции) и в каком порядке нужно совершить над стоящей справа от него функции , называется оператором.

Обозначения оператора физической величины

$$\hat{A}$$

Свойства операторов

- **Сложение операторов.** Операторы складываются $(\hat{A}+\hat{B})f(x)$

$$(\hat{A}+\hat{B})f(x)=\hat{A}f(x)+\hat{B}f(x)$$

- **Произведение операторов** – результат действия которого на функцию $\psi(x)$ равен:

$$\hat{A}(\hat{B}\psi(x))$$

Оператор $\hat{A}$ называется линейным, если для любых двух функций ψ_1 и ψ_2 и любых постоянных C_1 и C_2

выполняется соотношение

$$\hat{A}(C_1\psi_1+C_2\psi_2)=C_1\hat{A}\psi_1+C_2\hat{A}\psi_2$$

Оператор проекции импульса

Волновая функция свободной частицы

$$\psi(\vec{r},t) = ae^{-\frac{i}{\hbar}(Et - p_x x - p_y y - p_z z)} = ae^{\frac{i}{\hbar}(p_x x + p_y y + p_z z - Et)}.$$

Продифференцируем функцию по x

$$\frac{\partial \psi}{\partial x} = a\frac{i}{\hbar}p_x e^{\frac{i}{\hbar}(p_x x + p_y y + p_z z - Et)} = \frac{i}{\hbar}p_x \psi(\vec{r},t).$$

Умножим левую и правую части уравнения на $-i\hbar$

$$-i\hbar\frac{\partial \psi}{\partial x} = p_x \psi.$$

Если в результате действия оператора на функцию, получается та же функция, умноженная на постоянный коэффициент, имеющий смысл некоторой физической величины, то оператору присваивается название этой физической величины.

Оператор проекции импульса и координаты– основные коммутаторы в квантовой механике

$$-i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial x} = p_x\psi.$$

Оператор проекции импульса на ось *x*

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

Уравнение Шредингера для проекции импульса в операторном виде

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

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

За оператор координаты принимают саму координату

$$\hat{x}=x,\hat{y}=y,\hat{z}=z.\quad \hat{U}(x,y,z)=\hat{U}(x,y,z).$$

Постулат квантовой механики

Между операторами квантовой механики существует такие же тождественные соотношения , как и между соответствующими величинами классической механики. Связь между значениями физических величин в физических формулах заменяется связью операторов этих величин.

Оператор момента импульса

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

$$L_x = yp_z - zp_y; \qquad \hat{L}_x = y\hat{p}_z - z\hat{p}_y;$$

$$L_y = zp_x - xp_z; \qquad \hat{L}_y = z\hat{p}_x - x\hat{p}_z;$$

$$L_z = xp_y - yp_x. \qquad \hat{L}_z = x\hat{p}_y - y\hat{p}_x.$$

Оператор полной энергии –оператор Гамильтона (гамильтониан)

- Функция Гамильтона

$$E = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{p_y^2}{2m} + \frac{p_z^2}{2m} + U(x, y, z)$$

Согласно основному постулату квантовой механики

$$\hat{E} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{\hat{p}_y^2}{2m} + \frac{\hat{p}_z^2}{2m} + \hat{U}(x, y, z)$$

$$\hat{p}_x^2 = \hat{p}_x(\hat{p}_x\psi) = (-i\hbar\frac{\partial}{\partial x})(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x})\psi = -\hbar^2\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}; \quad \hat{p}_y^2 = -\hbar^2\frac{\partial^2\psi}{\partial y^2}. \quad \hat{p}_z^2 = -\hbar^2\frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}.$$

Оператор кинетической энергии $\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m}(\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2$

Уравнение Шредингера в операторном виде

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

Оператор Гамильтона. Оператор полной энергии

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

Уравнение Шредингера в операторном виде

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

Другой вид уравнения Шредингера

$$\psi(E,\vec{p}) = Ae^{-\frac{i}{\hbar}(Et - p_x x - p_y y - p_z z)}.$$

$$\frac{\partial\psi}{\partial t} = -A\frac{i}{\hbar}Ee^{-\frac{i}{\hbar}(Et - p_x x - p_y y - p_z z)}.$$

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = EAe^{-\frac{i}{\hbar}(Et - p_x x - p_y y - p_z z)} = E\psi$$

$$\hat{E} = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$$

Коммутатор операторов

Операторы $\hat{A}$ и $\hat{B}$ коммутативны, если их коммутатор

$$[\hat{A},\hat{B}]\psi = (\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})\psi = 0.$$

Доказано, что систему можно одновременно охарактеризовать двумя определенными значениями физических величин *A* и *B*, если отображающие их операторы коммутативны.

$$[\hat{y}\hat{p}_x]\psi = -yi\hbar\frac{\partial\psi}{\partial x} + i\hbar\frac{\partial(\psi y)}{\partial x} = -yi\hbar\frac{\partial\psi}{\partial x} + yi\hbar\frac{\partial\psi}{\partial x} + i\hbar\psi\frac{\partial y}{\partial x} \equiv 0$$

$$\widehat{x}\widehat{p}_x\psi = x(-i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial x}) = -i\hbar x\frac{\partial\psi}{\partial x}.$$

$$\widehat{x}\widehat{p}_x\psi = x(-i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial x}) = -i\hbar x\frac{\partial\psi}{\partial x}.$$

$$[\hat{x}\hat{p}_x]\psi = i\hbar \neq 0.$$

Это − соотношение неопределенностей в операторной форме