

Атомная физика

Лекция 5

проф. Попов Александр Михайлович

Основы формализма квантовой механики (продолжение)

Схема работы аппарата квантовой механики

- 1) Умеем решать нестационарное уравнение Шредингера с заданным начальным условием
- 2) Знаем собственные значения и собственные функции операторов физических величин
- 3) Вычисляем средние значения и дисперсии интересующих нас физических величин
- 4) Проводим разложение решения НУШ по собственным функциям оператора интересующей нас физической величины и вычисляем вероятность того или иного процесса измерения

Пример: измерение энергии в некоторый момент времени

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\varphi_n + V(\vec{r})\varphi_n = E_n\varphi_n \quad \psi(\vec{r}) = \sum_n C_n\varphi_n(\vec{r})$$

$$C_n = \int \varphi_n^*(\vec{r})\psi(\vec{r})d^3r \quad - \text{амплитуда вероятности измерить значение, равное } E_n$$

Коммутация операторов

Может ли так быть, что сразу две величины имеют точно определенные значения?

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

$$[\hat{x}, \hat{p}_x]\psi(x, y, z) = -i\hbar\left(x\frac{\partial\psi}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x}(x\psi)\right) = i\hbar\psi(x, y, z) \longrightarrow [\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar$$
$$[\hat{x}, \hat{p}_y] = 0$$

1) Связь с соотношением неопределенностей

2) Состояния в которых две физических величины точно определены

Важная теорема.

Два оператора имеют совпадающие наборы собственных функций в том и только том случае, если они коммутируют.

Примеры: $[\hat{T}, \hat{p}] = 0$ $[\hat{H}, \hat{p}] = [\hat{V}, \hat{p}] = i\hbar\nabla V$

Коммутация операторов II

Важные примеры:

1) Правила коммутации для операторов момента

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar\hat{L}_z \quad [\hat{L}_y, \hat{L}_z] = i\hbar\hat{L}_x \quad [\hat{L}_z, \hat{L}_x] = i\hbar\hat{L}_y$$

$$[\hat{L}^2, \hat{L}_i] = 0 \quad i = x, y, z$$

Вывод: можно найти состояния, в которых квадрат момента и проекция на одну из координатных осей точно определены

2) Движение в центрально симметричном поле $V(\vec{r}) = V(|\vec{r}|)$

$$[\hat{L}^2, \hat{H}] = 0 \quad [\hat{H}, \hat{L}_i] = 0$$

В ц.с. поле (например, атом) можно найти состояния, в которых сразу три физических величины имеют точно определенное значение (энергия, квадрат момента и его проекция на одну из осей (например, ось z))

Многочастичная квантовая система

Двухчастичная волновая функция $\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ Двухчастичная плотность вероятности $\rho(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = |\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)|^2$

Одночастичные плотности вероятности $\rho_1(\vec{r}) = \int |\psi(\vec{r}, \vec{r}_2)|^2 d^3 r_2$ $\rho_2(\vec{r}) = \int |\psi(\vec{r}_1, \vec{r})|^2 d^3 r_1$

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \psi_1(\vec{r}_1)\psi_2(\vec{r}_2)$$

Можно ли ввести понятие одночастичных функций так, что

$$\rho_1(\vec{r}_1) = |\psi_1(\vec{r}_1)|^2 \quad \rho_2(\vec{r}_2) = |\psi_2(\vec{r}_2)|^2$$

Рассмотрим двухчастичную систему $\hat{H}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \hat{H}_1(\vec{r}_1) + \hat{H}_2(\vec{r}_2) + \hat{V}_{12}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ $\hat{H}_i(\vec{r}_i) = \hat{T}_i + \hat{V}_i(\vec{r}_i)$

$$\hat{H}\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = E\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$$

Попытаемся найти решение в виде $\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \psi_1(\vec{r}_1)\psi_2(\vec{r}_2)$

$$\psi_2(\hat{H}_1\psi_1) + \psi_1(\hat{H}_2\psi_2) = (E - \hat{V}_{12})\psi_1\psi_2 \quad \frac{\hat{H}_1\psi_1}{\psi_1} = -\frac{\hat{H}_2\psi_2}{\psi_2} + E - \hat{V}_{12}$$

$$\text{Если } \hat{V}_{12}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \equiv 0 \longrightarrow \frac{\hat{H}_1\psi_1}{\psi_1} = E_1 \quad \frac{\hat{H}_2\psi_2}{\psi_2} = E_2 = E - E_1$$

Если $\hat{V}_{12}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \neq 0$ факторизация невозможна

Концепция самосогласованного поля в атомной и ядерной физике.

Методы Хартри, 1928, (Хартри-Фока) и одночастичная оболочечная модель

Энергетические спектры простейших квантовых систем

Свободное движение частицы

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi_E}{dx^2} = E \psi_E$$

Введем $k^2 = 2mE/\hbar^2 > 0$ $\psi_E'' + k^2 \psi_E = 0$

Решение $\psi_E = \begin{cases} \exp(ikx), \\ \exp(-ikx), \end{cases} \quad E = \hbar^2 k^2 / 2m \quad p = \pm \hbar k$ В этих состояниях одновременно точно определены импульс и энергия

Непрерывный спектр

Вырождение состояний Кратность вырождения $g = 2$

Чему равна кратность вырождения спектра в случаях двумерного или трехмерного движения??

Возможен и другой набор базисных состояний $\psi_E = \begin{cases} \sin(kx), \\ \cos(kx). \end{cases}$ В этих состояниях энергия точно определена, но импульс - нет!

Из двух базисных состояний можно построить бесконечное число состояний с заданной энергией

$$\psi_E = A \exp(ikx) + B \exp(-ikx)$$

Энергетические спектры простейших квантовых систем II

Частица в прямоугольной бесконечно глубокой потенциальной яме

$$V(x) = \begin{cases} 0, & |x| \leq a/2, \\ \infty, & |x| > a/2. \end{cases}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V(x)\psi = E\psi \quad \psi(|x| > a/2) \equiv 0$$

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

$$x \in (-a/2, a/2)$$

Введем $k^2 = 2mE/\hbar^2 > 0$ $\psi'' + k^2\psi = 0$ $\psi(x) = A \sin(kx) + B \cos(kx)$

Граничные условия $\psi(x = \pm a/2) = 0$

$$A \sin \frac{ka}{2} + B \cos \frac{ka}{2} = 0,$$

$$-A \sin \frac{ka}{2} + B \cos \frac{ka}{2} = 0.$$

$$\begin{vmatrix} \sin \frac{ka}{2} & \cos \frac{ka}{2} \\ -\sin \frac{ka}{2} & \cos \frac{ka}{2} \end{vmatrix} = 0$$

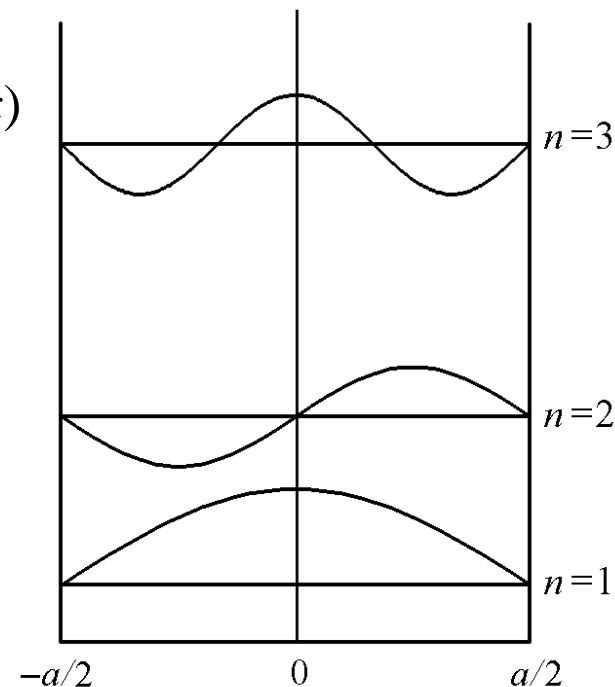
$$k_n = \frac{n\pi}{a} \quad n = 1, 2, \dots$$

Полуцелое число длин волн де Бройля

$$\psi_n(x) = \begin{cases} B_n \cos \frac{n\pi x}{a}, & n = 1, 3, 5, \dots \\ A_n \sin \frac{n\pi x}{a}, & n = 2, 4, 6, \dots \end{cases}$$

$$A_n = B_n = \sqrt{2/a}$$

Чисто дискретный спектр



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

Четность состояния

Введем оператор четности $\hat{P}\psi(\vec{r}) = \psi(-\vec{r})$

Задача на собственные значения оператора четности $\hat{P}\psi(\vec{r}) = \lambda\psi(\vec{r})$

$$\hat{P}(\hat{P}\psi(\vec{r})) = \hat{P}(\psi(-\vec{r})) = \psi(\vec{r})$$

$$\hat{P}(\hat{P}\psi(\vec{r})) = \hat{P}(\lambda\psi(\vec{r})) = \lambda\hat{P}\psi(\vec{r}) = \lambda^2\psi(\vec{r})$$

$$\lambda^2 = 1$$

$$\lambda = \pm 1$$

собственные значения оператора четности

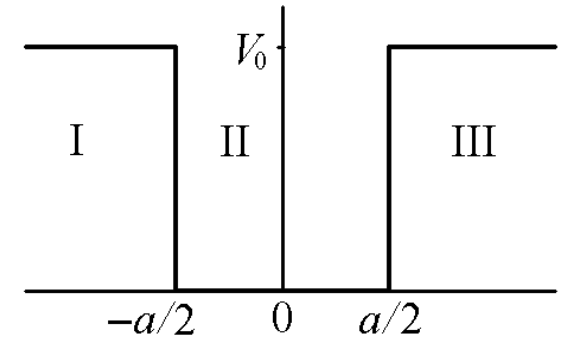
Коммутация $[\hat{P}, \hat{H}] = 0$ \longrightarrow стационарные состояния системы будут характеризоваться определенной четностью

Если $V(\vec{r}) = V(-\vec{r})$ то операторы Гамильтона и четности коммутируют

Энергетические спектры простейших квантовых систем III

Частица в прямоугольной потенциальной яме конечной глубины

$$V(x) = \begin{cases} 0, & |x| \leq a/2, \\ V_0, & |x| > a/2. \end{cases}$$



$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V(x)\psi = E\psi$$

$$\text{I, III} \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V_0\psi = E\psi$$

$$\text{II} \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi$$

Связанные состояния

частицы в яме $E < V_0$

Введем $k^2 = 2mE/\hbar^2 > 0$ $\kappa^2 = 2m(V_0 - E)/\hbar^2$

$$\text{I, III} \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V_0\psi = E\psi \quad \psi'' - \kappa^2\psi = 0$$

$$\text{II} \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi \quad \psi'' + k^2\psi = 0$$

$$\psi_I(x) = A_I \exp(-\kappa x) + B_I \exp(\kappa x)$$

$$\psi_{II}(x) = A_{II} \sin(kx) + B_{II} \cos(kx)$$

$$\psi_{III}(x) = A_{III} \exp(-\kappa x) + B_{III} \exp(\kappa x)$$

четные состояния

$$\psi_I(x) = B_I \exp(\kappa x)$$

$$\psi_{II}(x) = B_{II} \cos(kx)$$

$$\psi_{III}(x) = B_{III} \exp(-\kappa x)$$

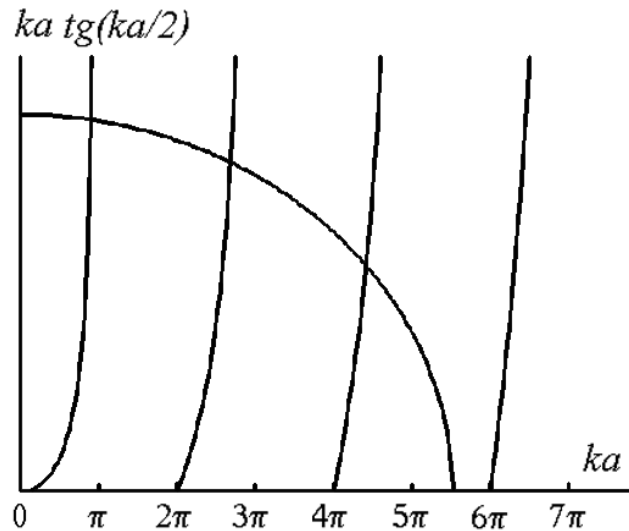
Сшиваем функции и производные в точке $x = a/2$

$$\begin{aligned} B_{II} \cos(ka/2) &= A_{III} \exp(-\kappa a/2) \\ -kB_{II} \sin(ka/2) &= -\kappa A_{III} \exp(-\kappa a/2) \end{aligned}$$

Частица в прямоугольной потенциальной яме конечной глубины (продолжение)

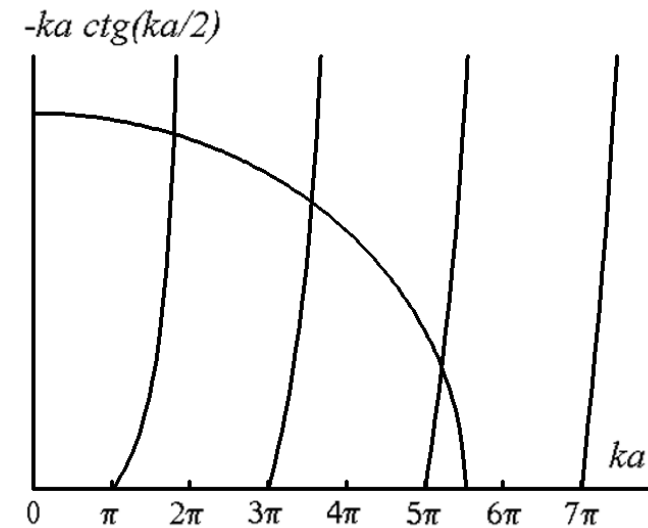
$$ka \cdot \operatorname{tg}(ka/2) = \sqrt{\frac{2mV_0 a^2}{\hbar^2} - (ka)^2}$$

четные



$$-ka \cdot \operatorname{ctg}(ka/2) = \sqrt{\frac{2mV_0 a^2}{\hbar^2} - (ka)^2}$$

нечетные



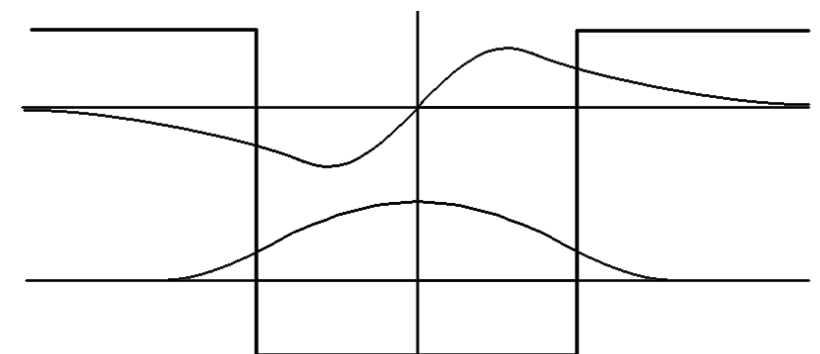
Число уровней в дискретном спектре определяется параметром $B = 2mV_0 a^2 / \hbar^2$

При $B \rightarrow \infty$ получаем бесконечно глубокую яму.

Четные и нечетные уровни чередуются

Один четный уровень есть всегда

Частица может находиться в области классически запрещенного движения



В области $E > V_0$ континуум состояний

Общие свойства одномерного движения

- 1) Если движение происходит в ограниченной области пространства, то спектр собственных состояний гамильтониана дискретен, в противном случае – непрерывен
- 2) В случае дискретного спектра координатная часть волновой функции является действительной

Ток вероятности в стационарном состоянии при движении в ограниченной области пространства

$$j = \frac{\hbar}{2mi} \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial x} \right) = 0 \quad \longrightarrow \quad \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} = \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial x}$$