Атомная физика

Лекция 4

проф. Попов Александр Михайлович

Основы формализма квантовой механики

Волновая функция свободно движущейся частицы

$$\psi(x,t) = \exp\left(\frac{i}{\hbar}(px - Et)\right) = \exp(i(kx - \omega t))$$

Уравнение для волновой функции при свободном движении?

$$E = p^2/2m \longrightarrow \hbar\omega = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \longrightarrow i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}$$

нестационарное уравнение Шредингера для свободной частицы

Обобщение на трехмерный случай

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

Обобщение на случай движения частицы в потенциальном поле

$$\boxed{i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + V(\vec{r},t)\psi(\vec{r},t)}$$

НУШ для движения частицы в произвольном потенциальном поле, 1926

Основы формализма квантовой механики II

Волновая функция и ее свойства. Макс Борн (1926)

$$\rho(\vec{r},t) = |\psi(\vec{r},t)|^2 \qquad \int_V |\psi(\vec{r},t)|^2 d^3r = 1$$

Проблема

$$|\psi(\vec{r},t)|^2 = \left|\exp\left(\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\vec{r} - Et)\right)\right|^2 \equiv 1 \qquad \Delta x \sim \hbar/\Delta p_x \to \infty$$

Как работать с функциями с неинтегрируемым квадратом?

$$\psi_p(x) = A\exp\left(\frac{i}{\hbar}px\right)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*_{p'}(x)\psi_p(x)dx = \delta(p - p') \qquad \psi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\exp(\frac{i}{\hbar}px)$$

Обобщение на трехмерный случай

$$\int \psi^*_{p'}(\vec{r})\psi_p(\vec{r})d^3r = \delta(\vec{p} - \vec{p}') \qquad \psi_p(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\exp(\frac{i}{\hbar}\vec{p}\vec{r})$$

Плотность вероятности и плотность тока вероятности

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi+V(\vec{r},t)\psi(\vec{r},t) \qquad -i\hbar\frac{\partial\psi^*}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi^*+V(\vec{r},t)\psi^*(\vec{r},t)$$

$$i\hbar\left(\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial t}+\psi\frac{\partial\psi^*}{\partial t}\right)=-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\psi^*\nabla^2\psi-\psi\nabla^2\psi^*\right)$$

$$\frac{\partial\left|\psi(\vec{r},t)\right|^2}{\partial t}=-\frac{\hbar}{2mi}\nabla\left(\psi^*\nabla\psi-\psi\nabla\psi^*\right) \qquad \frac{\partial\rho}{\partial t}+div\,\vec{j}=0$$

уравнение непрерывности

$$\rho(\vec{r},t)=\left|\psi(\vec{r},t)\right|^2 \qquad \boxed{\vec{j}=\frac{\hbar}{2mi}\left(\psi^*\nabla\psi-\psi\nabla\psi^*\right)}$$

вектор плотности тока вероятности

В одномерном случае $\displaystyle \frac{\partial\rho}{\partial t}=-\frac{\partial j}{\partial x} \qquad j=\frac{\hbar}{2mi}\left(\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x}-\psi\frac{\partial\psi^*}{\partial x}\right)$

Вероятность перетекает из одной пространственной области в другую подобно заряду в электродинамике или массе в гидродинамике

Пример: $\psi=A\times exp(ikx)\Rightarrow j=|A|^2\frac{\hbar k}{m}=|A|^2 v$

Постановка задачи о движении микрообъекта в квантовой теории

- Классическая теория

$$m\frac{d^2\vec{r}}{dt^2} = -grad\, V(\vec{r},t) \qquad \vec{r}(t=0)=\vec{r}_0,\ \vec{v}(t=0)=\vec{v}_0$$

- Квантовая теория

$$\boxed{i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + V(\vec{r},t)\psi(\vec{r},t)} \qquad \psi(\vec{r},t=0)=\varphi(\vec{r})$$

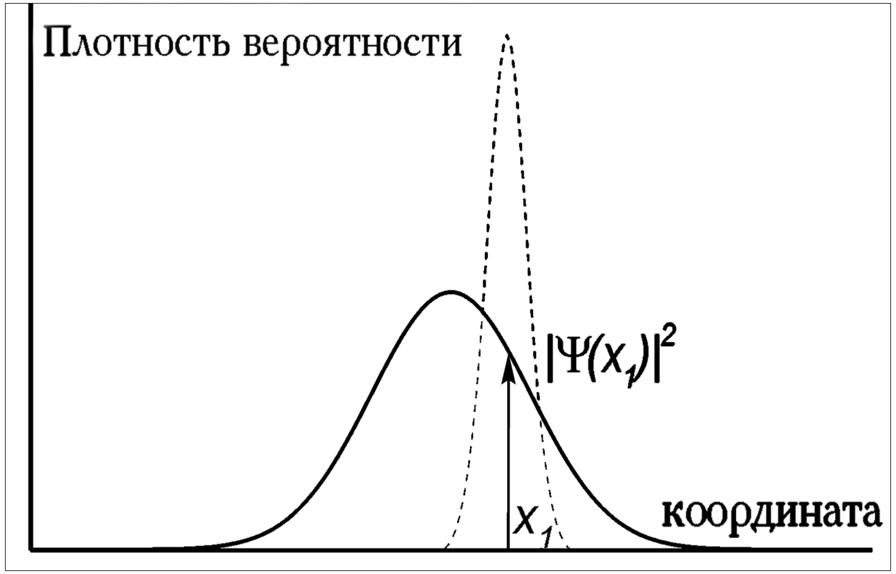
Знание волновой функции полностью исчерпывает возможную информацию о системе

Роль соотношения неопределенностей и отсутствие траектории у квантового объекта

Как интерпретировать полученные результаты?

Измерение координаты: «квантовое» среднее и дисперсия

$$dW(t) = \left|\psi(\vec{r},t)\right|^2 d^3r$$



Не путать с усреднением по времени и по ансамблю частиц

$$\langle \vec{r}(t)\rangle = \int \vec{r}\left|\psi(\vec{r},t)\right|^2 d^3r = \int \psi^*(\vec{r},t)\vec{r}\psi(\vec{r},t)d^3r$$

$$\langle x(t)\rangle = \int x\left|\psi(\vec{r},t)\right|^2 d^3r = \int \psi^*(\vec{r},t)x\psi(\vec{r},t)d^3r$$

$$D_x = \left\langle \left(x - \langle x\rangle\right)^2\right\rangle = \left\langle x^2 - 2x\langle x\rangle + \langle x\rangle^2\right\rangle = \left\langle x^2\right\rangle - \langle x\rangle^2$$

$$\left\langle x^2(t)\right\rangle = \int \psi^*(\vec{r},t)x^2\psi(\vec{r},t)d^3r$$

Важно: при измерении изменяется исходное (невозмущенное) состояние

Понятие о квантовом ансамбле

Как интерпретировать полученные результаты? II

Измерение импульса в состоянии $\psi(x,t)$

Состояние с точно определенным импульсом $$\psi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\exp\left(\frac{i}{\hbar}px\right)$$

Что означает состояние $\psi(x) = \sum_i C_{p_i}\psi_{p_i}(x)$?

$|C_{p_1}|^2$ - вероятность измерить значение импульса, равное p_i !!

Импульс пробегает непрерывный набор значений $\psi(x) = \int C_p \psi_p dp$

- представление заданной функции в виде суперпозиции состояний с заданным значением импульса (разложение в интеграл Фурье

$$C_p = \int \psi(x)\exp\left(-\frac{i}{\hbar}px\right)\frac{dx}{\sqrt{2\pi\hbar}} = \int \psi(x)\psi_p^*(x)dx$$

Тогда $\langle p\rangle = \int p|C_p|^2 dp$

Оказывается, то можно переписать так: $\langle p\rangle = \int \psi^*(x)(\hat{p}\psi(x))dx$ $\quad \hat{p} = -i\hbar\,\partial/\partial x$

$$D_p = \langle p^2\rangle - \langle p\rangle^2 \qquad \langle p^2\rangle = \int p^2|C_p|^2 dp = \int \psi^*(x)\left(-\hbar^2\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}\right)dx = \int \psi^*(x)\hat{p}^2\psi(x)dx$$

Операторы физических величин

Координата и импульс

$$\langle x(t)\rangle == \int \psi^*(\vec r,t)x\psi(\vec r,t)d^3r$$

$$\langle p\rangle = \int \psi^*(\vec r,t)(-i\hbar\,\partial\psi(\vec r,t)/\partial x)d^3r$$

$$\langle A(t)\rangle = \int \psi^*(\vec r,t)\hat A\psi(\vec r,t)d^3r$$

$$\hat x\psi(\vec r,t) = x\psi(\vec r,t)$$

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

Обобщение. Каждой физической величине, введенной в классической механике, в квантовой механике ставится в соответствие оператор этой величины. При этом соотношение между величинами в классической механике в квантовой механике переносится на оператор.

$$\hat{\vec p} = -i\hbar\nabla$$

$$\hat T = \frac{\hat p^2}{2m} = \frac{\hat p_x^2 + \hat p_y^2 + \hat p_z^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2$$

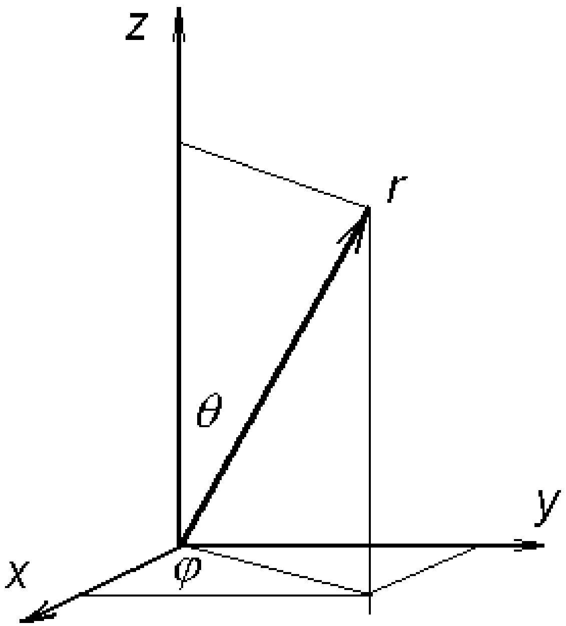
$$\hat V\psi(\vec r,t) = V(\vec r,t)\psi(\vec r,t)$$

$$\hat H = \hat T + \hat V = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\vec r,t)$$

оператор Гамильтона

Нестационарное уравнение Шредингера $i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \hat H\psi$

Операторы физических величин II



Оператор момента количества движения

$$\vec{L} = [\vec{r} \times \vec{p}] \quad \Rightarrow \quad \hat{\vec{L}} = -i\hbar[\vec{r} \times \nabla]$$

В декартовом базисе

$$\hat{L}_x = -i\hbar(y\,\partial/\partial z - z\,\partial/\partial y),$$

$$\hat{L}_y = -i\hbar(z\,\partial/\partial x - x\,\partial/\partial z),$$

$$\hat{L}_z = -i\hbar(x\,\partial/\partial y - y\,\partial/\partial x).$$

$$\hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2$$

В сферическом базисе

$$\nabla^2 = \frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}r + \frac{1}{r^2}\Delta_{\theta\varphi} \qquad \Delta_{\theta\varphi} = \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}$$

$$\hat{L}_z = -i\hbar\,\partial/\partial\varphi \qquad \hat{L}^2 = -\hbar^2\Delta_{\theta\varphi}$$

Общее правило: $\langle A(t)\rangle = \int \psi^*(\vec{r},t)\hat{A}\psi(\vec{r},t)d^3r \qquad D_A = \langle A^2\rangle - \langle A\rangle^2$

Состояния с точно определенным значением физической величины

Задача на собственные значения и собственные функции квантовомеханических операторов

$$\hat{A}\psi_a = a\psi_a \quad \langle A\rangle = \int \psi_a^* \hat{A}\psi_a d\tau = a\int \psi_a^*\psi_a d\tau = a \quad \langle A^2\rangle = a^2 \qquad D_A = \langle A^2\rangle - \langle A\rangle^2 = 0$$

Если волновая функция есть собственная функция оператора физической величины, то эта величина имеет в данном состоянии имеет точно определенное значение, равное собственному значению.

Набор собственных значений образует спектр оператора, который может быть как дискретным, так и непрерывным. Соответствующий набор собственных функций ψ_n образует полную ортонормированную систему:

$$\psi = \sum_n C_n\psi_n \qquad \int \psi_m^*\psi_n d\tau = \delta_{mn}$$

$$\psi = \int C_a\psi_a da \qquad \int \psi_a^*\psi_{a'} d\tau = \delta(a-a')$$

Физический смысл коэффициентов разложения

$$w_n = |C_n|^2 \qquad C_n = \int \psi\psi_n^* d\tau$$

$$dw = |C_a|^2 da \qquad C_a = \int \psi\psi_a^* d\tau$$

Все операторы физических величин линейные и эрмитовы (их собственные значения действительны)

Примеры задач на собственные значения и собственные функции операторов физических величин

Импульс

$$\hat{p}_x \psi_p = p\psi_p \qquad \psi_p = \exp\left(\frac{i}{\hbar} px\right)$$

волна де Бройля!

Это оператор с непрерывным спектром

Момент импульса (z- проекция)

$$\hat{L}_z \psi_{L_z} = L_z \psi_{L_z} \qquad -i\hbar\, \partial\psi_{L_z} / \partial\varphi = L_z \psi_{L_z}$$

$$\psi_{L_z} = \exp\left(\frac{i}{\hbar} L_z \varphi\right)$$

условие периодичности $\psi_{L_z}(\varphi) = \psi_{L_z}(\varphi + 2\pi) \Longrightarrow \exp\left(\frac{i}{\hbar} L_z \cdot 2\pi\right) = 1$

$$L_z = m\hbar \qquad m = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots \qquad \psi_m = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(im\varphi)$$

Получили что-то похожее на условие квантования Бора

Это оператор с дискретным спектром

Энергия. Собственные значения оператора Гамильтона (не зависит от времени)

$$\hat{H}\psi = E\psi \qquad -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + V(\vec{r})\psi = E\psi$$

Стационарное уравнение Шредингера

Спектр может быть и дискретным и непрерывным

Стационарное уравнение Шредингера

Стационарные состояния как собственные состояния оператора Гамильтона

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

Эволюция стационарного состояния во времени $$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \hat{H}\Psi$$

Пусть $\psi(\vec{r}, t = 0) = \varphi_n(\vec{r})$ Тогда $\psi(\vec{r}, t) = \varphi_n(\vec{r}) \times exp\left(-\frac{i}{\hbar}E_n t\right)$

В стационарные состояниях плотность вероятности и все средние, дисперсии не зависят от времени

Нестационарные состояния – это всегда суперпозиция стационарных

Общее решение нестационарного уравнения Шредингера с гамильтонианом не зависящим от времени

$$\psi(\vec{r}, t) = \sum_n C_n\varphi_n(\vec{r})\exp\left(-\frac{i}{\hbar}E_n t\right)$$

Коэффициенты разложения определим из начального условия $$\psi(\vec{r}, t = 0) = \phi(\vec{r}) = \sum_n C_n\varphi_n(\vec{r})$$

$$C_n = \int \varphi_n^*(\vec{r})\phi(\vec{r})d^3r$$