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

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

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

Коммутация операторов

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

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

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

$$\left[\hat{x},\hat{p}_y\right]=0$$

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

Коммутация операторов II

Важные примеры:

1) Правила коммутации для операторов момента

$$\left[\hat{L}_x, \hat{L}_y\right] = i\hbar\hat{L}_z \qquad \left[\hat{L}_y, \hat{L}_z\right] = i\hbar\hat{L}_x \qquad \left[\hat{L}_z, \hat{L}_x\right] = i\hbar\hat{L}_y$$

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

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

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

$$\left[\hat{L}^2, \hat{H}\right] = 0 \qquad \left[\hat{H}, \hat{L}_i\right] = 0$$

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

Можно ли ввести понятие одночастичных функций так, что

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Решение $\psi_E = \begin{cases} \exp(ikx), \\ \exp(-ikx), \end{cases}$ $\qquad E = \hbar^2k^2/2m \qquad p = \pm\hbar k$

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

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

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

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

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

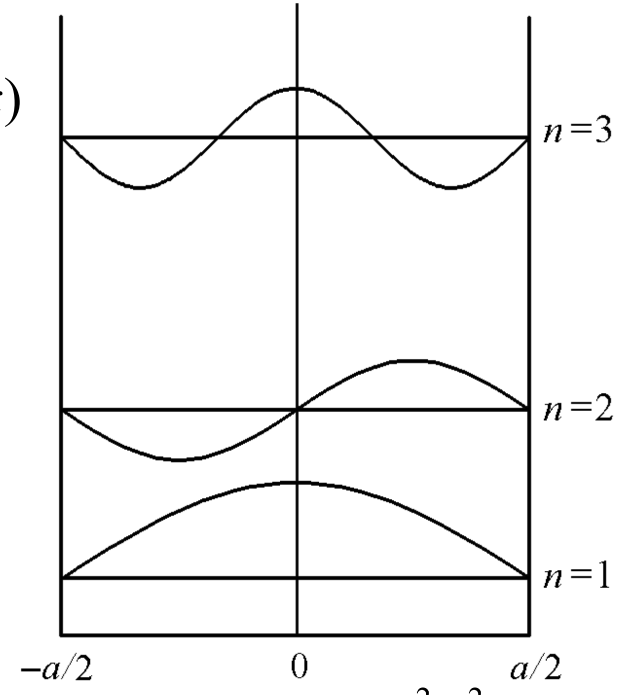
Граничные условия $\quad \psi(x = \pm a/2) = 0$

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

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

$$k_n = \frac{n\pi}{a} \qquad n = 1,2,\ldots$$

Полуцелое число длин волн де Бройля



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

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

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

Чисто дискретный спектр

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

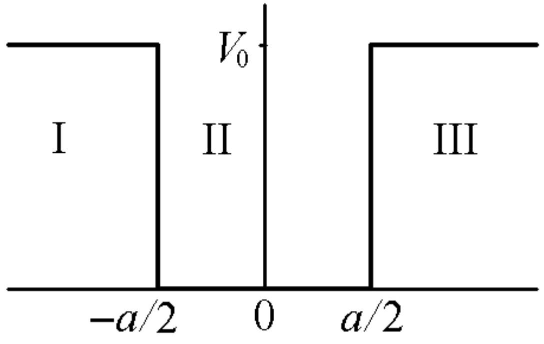
Коммутация $\left[\hat{P}, \hat{H}\right] = 0$ $\longrightarrow$ стационарные состояния системы будут характеризоваться определенной четностью

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

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



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

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

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

Связанные состояния частицы в яме $E < V_0$

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

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

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

$$\psi_I(x) = A_I \exp(-\kappa x) + B_I \exp(\kappa x)$$
$$\psi_{II}(x) = A_{II} \sin(kx) + B_{II} \cos(kx)$$
$$\psi_{III}(x) = A_{III} \exp(-\kappa x) + B_{III} \exp(\kappa x)$$

четные состояния

$$\psi_I(x) = B_I \exp(\kappa x)$$
$$\psi_{II}(x) = B_{II} \cos(kx)$$
$$\psi_{III}(x) = B_I \exp(-\kappa x)$$

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

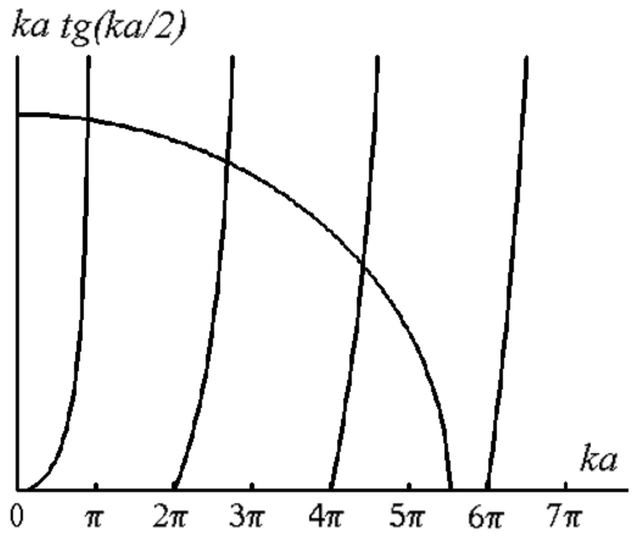
$$B_{II} \cos(ka/2) = A_{III} \exp(-\kappa a/2)$$
$$-kB_{II} \sin(ka/2) = -\kappa A_{III} \exp(-\kappa a/2)$$

Частица в прямоугольной потенциальной яме конечной глубины (продолжение)

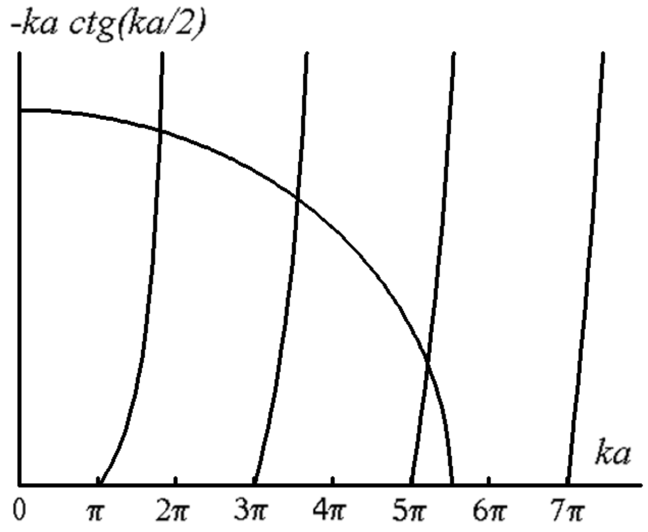
$$ka \cdot tg(ka/2) = \sqrt{\frac{2mV_0 a^2}{\hbar^2} - (ka)^2}$$

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

четные



нечетные



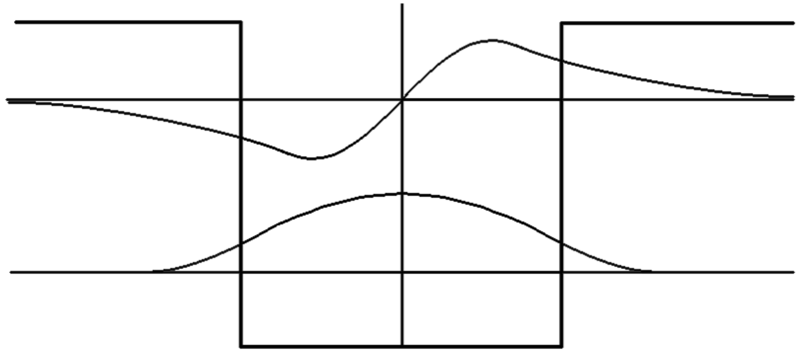
Число уровней в дискретном спектре определяется параметром $B = 2mV_0 a^2 / \hbar^2$

При $B \to \infty$ 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

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