Квантовая механика

Волновая функция и её статистический смысл

1925 г В. Гейзенберг (матричная квант. механика)
1926 г Э. Шредингер (волновая квант. механика)
1926 г М. Борн – волновая функция и её статистический смысл, эквивалентность волновой и матричной квантовой механики
1928 г П. Дирак – релятивистское волновое ур-е.

Главное понятие – волновая функция

Волновая функция – комплекснозначная величина, описывающая состояние квантовомеханической системы. Функция, зависящая от физич. величин, с помощью которых задают состояние системы: координаты, время, энергии, импульсы, моменты импульса, спины и др. характеристики частиц или системы.

Квадрат модуля волновой функции равен плотности вероятности (вероятности) того, что эти величины имеют определенные значения

В простейшем случае одной частицы (без учета спина), находящейся во внешнем поле, часто обозначают

$\Psi(\vec{r},t) = \Psi(x,y,z,t)$ – волновая функция („пси-функция") или амплитуда вероятности того, что частица в момент времени t находится в точке $\vec{r} = \vec{i}x + \vec{j}y + \vec{k}z$

$$\boxed{|\Psi(\vec{r},t)|^2 = \frac{dW}{dV}}$$ – плотность вероятности того, что частица в момент врем. t находится в элементе объема $dV = dx\,dy\,dz$ в т. $\vec{r}$.

$$\boxed{dW = |\Psi(\vec{r},t)|^2 dV}$$ – вероятность — " — " — " — " — " — " —

$\Psi = |\Psi| e^{i\alpha}$, $|\Psi|^2 = \Psi \Psi^*$

амплитуда фаза

комплексно сопряженное число

Ψ - вероятностная характеристика

$$W = \int_V dW = \int_V |\Psi|^2 dV$$ - вероятность того, что в момент времени t частица находится в объеме V.

Нормировка

$$\int_{V=\infty} |\Psi|^2 dV = 1$$ - полная вер-ть найти частицу "где"

$\Psi(\vec{r},t)$ – конечна, однозначна, непрерывна.

Квантовомеханическое среднее величины $f(\vec{r},t)$

$$\langle f(\vec{r},t) \rangle = \int_{V=\infty} f(\vec{r},t) |\Psi(\vec{r},t)|^2 dV$$

Например:

$$\langle \vec{r} \rangle = \int_{V=\infty} \vec{r} |\Psi(\vec{r},t)|^2 dV$$ – средний радиус-вектор (координата) частицы

Принцип суперпозиции состояний:

если система может находиться в различных состояниях, описываемых волнов. функциями $\Psi_1, \Psi_2, \ldots, \Psi_n, \ldots$, то она может находиться и в состоянии, описываемом волновой функцией

$$\Psi = \sum_n C_n \Psi_n$$ ← суперпозиция состояний Ψ_n

где C_n – комплексные коэффициенты (амплитуды вероятности) найти систему в состоянии Ψ_n.

$$|\Psi|^2 = \sum_n |C_n|^2 |\Psi_n|^2 + \sum_{n,n'} C_n C_{n'}^* \Psi_n \Psi_{n'}^*$$

полная вероятность — сумма вероятностей — интерференция состояний

Уравнение Шредингера.

(1) $\boxed{\hat{H}\Psi = i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}}$ — волновое уравнение для одной частицы, движущейся в силовом поле

$\hat{H} = \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m} + U(\vec{r})$ — оператор Гамильтона, оператор энергии $H = \frac{p^2}{2m} + U(\vec{r})$

$\hat{\vec{p}} = -i\hbar\vec{\nabla}$ — оператор импульса $\left(\hat{p}_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)$

$\vec{\nabla} = \vec{i}\frac{\partial}{\partial x} + \vec{j}\frac{\partial}{\partial y} + \vec{k}\frac{\partial}{\partial z}$ — оператор „набла" (градиент)

$\hat{\Delta} = (\vec{\nabla})^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$ — оператор Лапласа (лапласиан)

$\frac{\hat{p}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta = -\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2$ — оператор кинетической энергии частицы с массой m

$U(\vec{r})$ — потенциальная энергия этой частицы в точке $\vec{r} = i x + j y + k z$

$(= U(x, y, z))$

т. е.

(1') $\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi + U(\vec{r})\Psi = i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}}$

нестационарное (общее) уравнение Шредингера (дифференциальное ур-е в частных производных 2-го порядка по координатам и 1-го порядка по времени)

Свободная частица ($U(\vec{r}) = 0$) движущаяся вдоль оси X

$\Psi_0 = A e^{-\frac{i}{\hbar}(Et - pX)} = A e^{i(\omega t - kX)}$, $E = \hbar\omega$, $p = \hbar k$ — числа

$\frac{\partial\Psi_0}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar}E\Psi$, $\frac{\partial^2\Psi_0}{\partial x^2} = -\frac{1}{\hbar^2}p^2\Psi$ подстав. в (1')

имеем $\boxed{\frac{p^2}{2m} = E}$ — энергия равна кинетической энергии $\frac{p^2}{2m} = \frac{mv^2}{2}$

Стационарные состояния и стационарное уравнение Шредингера

Стационарные состояния — состояния с фиксированным значением энергии (энергия сохраняется)

при этом $U(\vec{r}) = U(x,y,z)$ не зависит от времени t ↑ потенциальная энергия

подставляем в (1'):

$\Psi(x,y,z,t) = \psi(x,y,z)\,\psi_t(t)$ — переменные $\vec{r}$ и t разделяются

(а) $\frac{\partial \psi_t(t)}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} E \psi_t(t) \Rightarrow \psi_t(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$

(б) $-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + U\psi = E\psi$, E — константа (параметр) разделения переменных (энергия частицы)

(2) $\boxed{\Delta\psi + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U(\vec{r}))\psi = 0}$ ← стационарное уравнение Шредингера

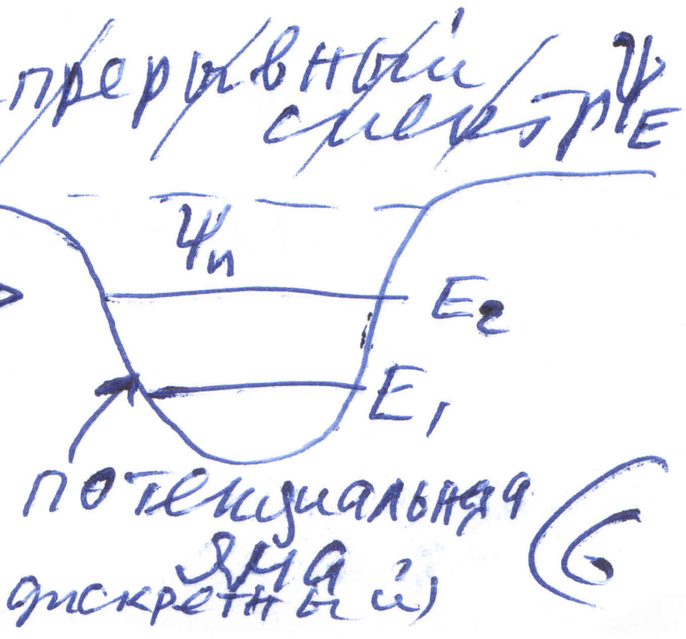
(2') $\boxed{\hat{H}\psi = E\psi}$ — задача на собственные значения энергии (оператора $\hat{H}$)

$\boxed{\Psi(\vec{r},t) = \psi(\vec{r})\,e^{-\frac{i}{\hbar}Et}}$ — реш-е (1') в стац. состоянии

$\psi(\vec{r})$ — однозначна, конечна, непрерывна (как и $\frac{\partial\psi}{\partial x}, \frac{\partial\psi}{\partial y}, \frac{\partial\psi}{\partial z}$)

Спектр энергии — допустимые значения E по (2) и (2')

а) непрерывный спектр E, ψ_E

б) дискретный спектр E_n, ψ_n

n — целое число (номер уровня энергии и состояния)