

Доказательство Теоремы 3

Пусть φ_n – собственная функция оператора \hat{A} , т. е. $\hat{A}\varphi_n = a_n\varphi_n$ (1)

Подействуем на уравнение (1) оператором \hat{B} слева (чтобы не испортить равенство)

$$\hat{B}(\hat{A}\varphi_n) = \hat{B}(a_n\varphi_n)$$

Так как оба оператора линейны, то a_n можно вынести из под оператора \hat{B}

А так как операторы коммутируют, то их можно поменять местами

$$\hat{A}(\hat{B}\varphi_n) = a_n(\hat{B}\varphi_n) \quad \text{или} \quad \hat{A}(\psi_n) = a_n(\psi_n)$$

то есть функция $\psi_n \equiv \hat{B}\varphi_n$ есть собственная функция оператора \hat{A} и таким образом совпадает с φ_n в общем случае с точностью до константы, которую обозначим через b_n , $\rightarrow \psi_n \equiv b_n\varphi_n$ Отсюда $\hat{B}\varphi_n \equiv b_n\varphi_n$

Другими словами, собственные функции коммутирующих операторов совпадают (с точностью до константы $b_n = c a_n$)

Доказательство Теоремы 3

Пусть – собственная функция оператора A , т. е.

Подействуем на уравнение (1) оператором B слева (чтобы не испортить равенство)

Так как оба оператора линейны, то можно вынести из под оператора B

А так как операторы коммутируют, то их можно поменять местами

или

то есть функция есть собственная функция оператора A

и таким образом совпадает с в общем случае с точностью до константы,

которую обозначим через Отсюда

Другими словами, собственные функции коммутирующих

операторов совпадают (с точностью до константы)

Постулат 4. Уравнение Шредингера

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H}\Psi; \quad \hat{H} = \hat{T} + \hat{U}$$

Оператор Гамильтона =
сумме операторов кинетической энергии \hat{T}
и потенциальной энергии \hat{U}

$$\hbar = \frac{h}{2\pi} \approx 10^{-27} \text{ эрг} \cdot \text{сек}; \quad h \approx 6,626 \cdot 10^{-35} \text{ Дж} \cdot \text{с}$$

$$\hat{T} = \frac{mv^2}{2} = \frac{\hat{p}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}$$

Постулат 4. Уравнение Шредингера

Оператор Гамильтона =
сумме операторов кинетической энергии \hat{T}
и потенциальной энергии \hat{U}

Одномерное уравнение Шредингера

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x,t) \right] \Psi(x,t)$$

Одномерное уравнение Шредингера

Стационарное уравнение Шредингера

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H}\Psi; \quad \hat{H} = \hat{T} + \hat{U}, \text{ если } \hat{H} \neq f(t)$$

$$\Psi(x, t) = \varphi(x) \exp\left(-i \frac{E}{\hbar} t\right)$$

$$\hat{H}\varphi(x) = E\varphi(x)$$

Стационарное уравнение Шредингера

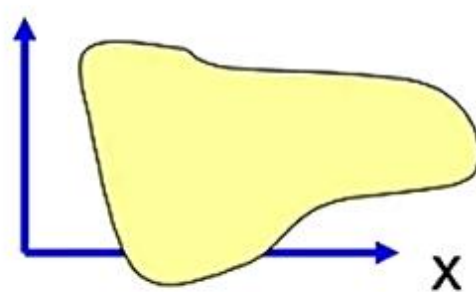
$$\Psi = T(t)X(x); \quad i\hbar X \frac{\partial T}{\partial t} = T \hat{H} X; \quad \frac{1}{XT}; \quad i\hbar \frac{1}{T} \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{1}{X} \hat{H} X \equiv E;$$

$$i\hbar \frac{dT}{T} = E dt; \quad T(t) = \exp\left(-i \frac{E}{\hbar} t\right)$$

$$\hat{H}X(x) = EX(x)$$

Стационарное уравнение Шредингера

Двумерное уравнение Шредингера

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H}\Psi;$$
$$\Psi = \Psi(x, y, t);$$
$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{U} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{\hat{p}_y^2}{2m} + \hat{U}(x, y, t);$$

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial y^2} + U \right] \Psi$$

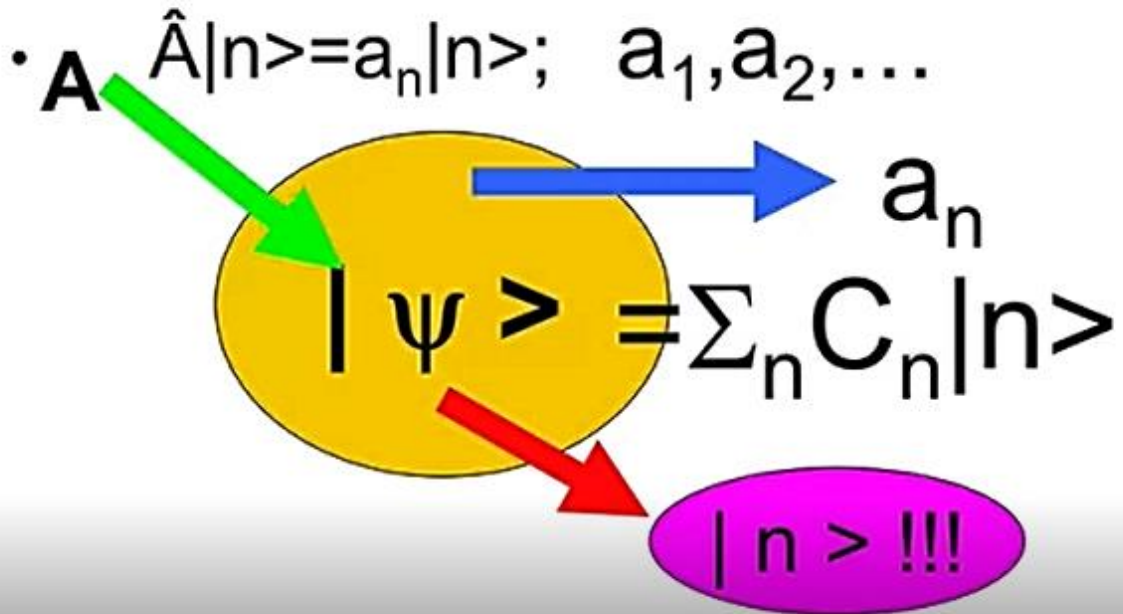
Двумерное уравнение Шредингера

Трёхмерное уравнение Шредингера

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H}\Psi; \quad \Psi = \Psi(x, y, z, t) = \Psi(\vec{r})$$
$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{U} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{\hat{p}_y^2}{2m} + \frac{\hat{p}_z^2}{2m} + \hat{U}(x, y, z, t);$$
$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial y^2} - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + U \right] \Psi$$
$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r})}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U \right] \Psi(\vec{r})$$

Трёхмерное уравнение Шредингера

Постулат 5. Постулат об измерении физической величины



Постулат 5. Постулат об измерении физической величины

Обзор теории

- Система
- Оператор Гамильтона
- Уравнение Шредингера
- Решение уравнения Шредингера
- Спектр или вероятности переходов
- Анализ свойств волновой функции
- Связь с классической теорией

Обзор теории
Система
Оператор Гамильтона
Уравнение Шредингера
Решение уравнения Шредингера
Спектр или вероятности переходов
Анализ свойств волновой функции
Связь с классической теорией

Предельный переход от квантовой механики к классической

$$\Psi = \Psi(x, t) = \exp\left(i \frac{S(x, t)}{\hbar}\right)$$

$$-\frac{\partial S}{\partial t} = \frac{1}{2m} \left(\frac{\partial S}{\partial x}\right)^2 + U(x, t) - i \frac{\hbar}{2m} \left(\frac{\partial^2 S}{\partial x^2}\right)$$

$$S \gg \hbar$$

Сравнить

Предельный переход от квантовой механики к классической
Сравнить

Часть 2

ПРИМЕРЫ ПРИМЕНЕНИЯ КВАНТОВОЙ ТЕОРИИ

- Частица в яме
- Мячик в поле тяжести
- Осциллятор
- Свободное движение
- Атом водорода
- Атом во внешнем поле

Часть 2

ПРИМЕРЫ ПРИМЕНЕНИЯ КВАНТОВОЙ ТЕОРИИ

Частица в яме

Мячик в поле тяжести

Осциллятор

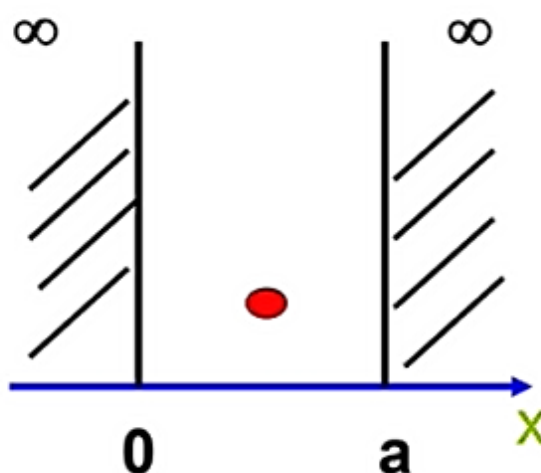
Свободное движение

Атом водорода

Атом во внешнем поле

Частица в яме с двумя бесконечно высокими стенками

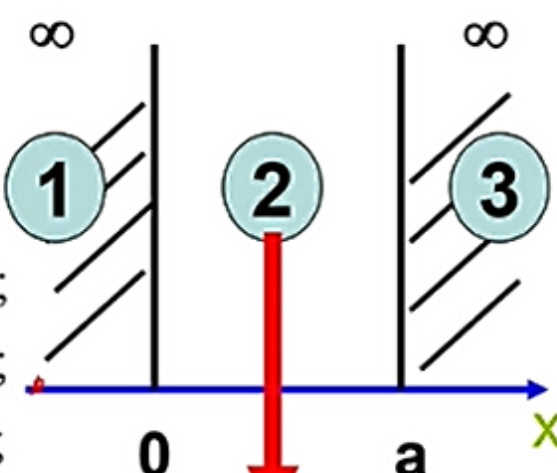
$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{U}$$

$$\hat{U}(x) = \begin{cases} \infty & x < 0 \\ 0 & 0 \leq x \leq a \\ \infty & x > a \end{cases}$$


Частица в яме с двумя бесконечно высокими стенками

Частица в яме с двумя бесконечно высокими стенками

$$\hat{H}\varphi(x) = E\varphi(x);$$

$$\varphi(x) = \begin{cases} \varphi_1(x) = 0; & x < 0; \\ \varphi_2(x); & 0 \leq x \leq a; \\ \varphi_3(x) = 0; & x > a; \end{cases}$$


$$\hat{H}\varphi_2(x) = E\varphi_2(x);$$

Частица в яме с двумя бесконечно высокими стенками

Частица в яме с двумя бесконечно высокими стенками

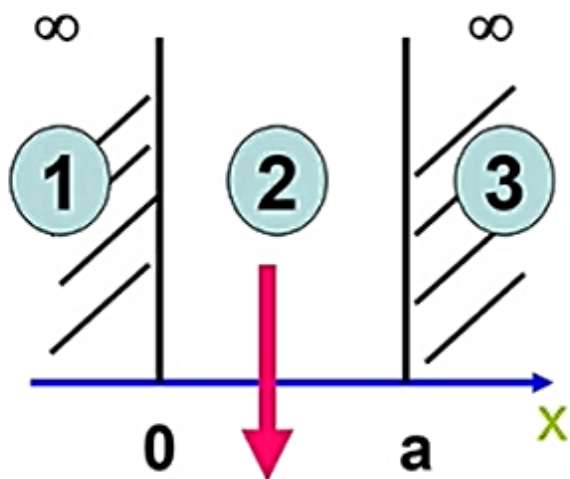
$$\hat{H}\varphi_2 = E\varphi_2;$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \varphi_2 = E\varphi_2$$

$$\varphi_2'' + k^2 \varphi_2 = 0;$$

$$k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E$$

$$\varphi_2 = A \sin(kx) + B \cos(kx);$$



Частица в яме с двумя бесконечно высокими стенками

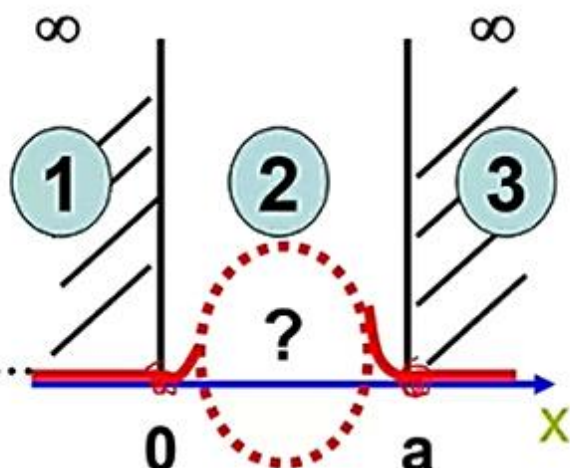
Частица в яме с двумя бесконечно высокими стенками

$$\varphi_2(0) = 0; \quad \boxed{B=0}$$

$$\varphi_2(a) = 0 = A \sin(ka);$$

$$A \neq 0; \quad \boxed{\sin(ka) = 0};$$

$$ka = n\pi; \quad n = 1, 2, 3, \dots$$



$$\varphi_1(0) = 0 = \varphi_2(0);$$

$$\varphi_2 = A \sin(kx) + B \cos(kx);$$

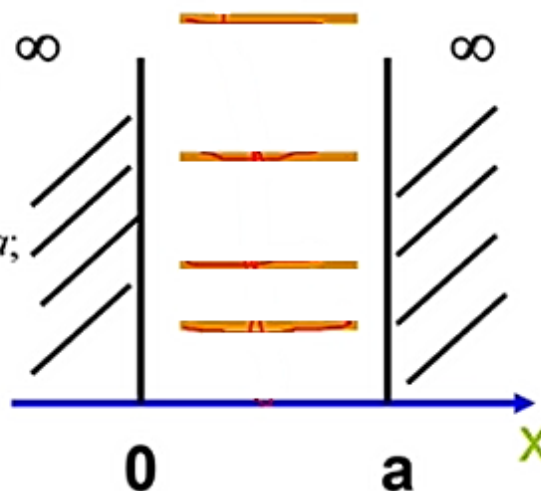
$$\varphi_2(a) = \varphi_3(a) = 0;$$

Частица в яме с двумя бесконечно высокими стенками

Частица в яме с двумя бесконечно высокими стенками

$$\hat{H}\varphi_n(x) = E_n\varphi_n(x); \quad \infty$$

$$\varphi_n(x) = \begin{cases} 0; & x < 0; \\ A \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) & 0 \leq x \leq a; \\ 0; & x > a; \end{cases}$$

$$E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2}; \quad n = 1, 2, 3 \dots$$


$E_1; E_2; E_3; E_4; \dots$

Частица в яме с двумя бесконечно высокими стенками

Частица в яме с двумя бесконечно высокими стенками

$$\int_{-\infty}^0 0 dx + \int_0^a A^2 \sin^2\left(\frac{n\pi}{a}x\right) dx + \int_a^{+\infty} 0 dx = 1;$$

$$A^2 \frac{a}{2} = 1; \quad A = \sqrt{\frac{2}{a}};$$

Состояние?

$$\varphi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)$$

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

$$\langle x | E_n \rangle = \varphi_n(x)$$

Частица в яме с двумя бесконечно высокими стенками

Состояние?