Лекция 4 (24.09.20)

Формализм квант. механики. Ур-е Шредингера.

I Что было в прош. раз

Волн. св-ва частиц + соотн-е неопр.

⇓

волны де Бройля

↑ вероят. интерпретация

(их $I \sim p$(обнаружить частицу в области))

⇓

Ψ-функции – волн. ф-и.

Бор 1927: невозможно одновр. наблюдать волн. и корпуск. св-ва микрочастиц

+

принцип дополнительности

II Что из этого?

① $|\Psi(\bar r,t)|^2$ – амплитуда вероятности

$|\Psi(\bar r,t)|^2 dV$ – вероятность найти частицу в эл. объема dV в окрти т. $\bar r$ в момент вр. t.

$$\boxed{\int_V |\Psi(\bar r,t)|^2 dV = 1} \quad (*)$$ ← для финит. движ.

V – объем, в кот. частица обнаруж. достоверно.

Для $\Psi = \Psi_0 e^{\frac{i}{\hbar}(\bar p \bar r - Et)}$ (фотон. связи м/у E и p на всегда.)

• $|\Psi|^2 = |\Psi_0|^2 = const$, $V = \infty$ (инфинит. движ.) $\Rightarrow$ $\cancel{(*)}$

↑ исп. нормировку на δ-фию

② Волновая функция несет информацию о всех динамических характеристиках частицы.

⇓

③ Нужно иметь ур-е на Ψ.

Соотн. неопр $\Rightarrow t^1$ (иначе 2 НУ, а x и p не задать одновр)

• Надо! НУ $\Psi(\bar r,t)\big|_{t=0} = \Psi_0(\bar r)$

④ В частности, поэтому ВФ должна быть $\mathbb{C}$

• Например: $\frac{d^2x}{dt^2} + \omega^2 x = 0$.

$dx/dt = y\omega$, $dy/dt = -\omega x^2$

$z = x + iy$

$dz/dt = dx/dt + \frac{dy}{dt} i = \omega y - \omega i x = \omega(y - ix)$

$i\frac{dz}{dt} = \omega(iy + x)$

$\boxed{i\dot z = \omega z} \longrightarrow z = z_0 e^{-i\omega t}$ – осцилл. характер.

Введение компл. фи: сведение ДУ 2пор. на к ДУ 1по.

• $\Psi(\bar r,t) = \Psi_0 \cos\left[\frac{i}{\hbar}(\bar p \bar r - \omega t)\right] \Rightarrow \Psi^2 = \Psi_0^2 \cos^2[\ldots]$

$\Rightarrow$ фикс. $\bar r \Rightarrow w$ завис. от t (нет однородности времени)

фикс $t \Rightarrow$ (w завис. от $\bar r$ (нет одн-ти пр-ва))

w обнаружения

а в все пусто, своб.

Введем $\Psi_1 = \Psi_0 \cos(...)$
$\Psi_2 = \Psi_0 \sin(...)$

$dW \sim |\Psi_1^2 + \Psi_2^2| dV \sim |\Psi^2| dV$, если $\Psi = \Psi_1 + i\Psi_2$

Сложность уйдет, если исп. 2 бегущих волны.

⑤ Необходимость нормировки:
- огранич-ть
- однозначность
- непр-ть
- непр-ть производной

— будет ясно позже

} требования к ВФ.

III. Принцип суперпозиции. – аналог. класс.

Если квант. система может наход. в сост-и, опис. $\Psi_1 ... \Psi_n$, то она может наход. в сост. с

$$\Psi = \sum_{i=1}^{n} c_i \Psi_i \quad , c_i \in \mathbb{C}.$$

наблюдаем не ВФ, а нек. сред. зн-е

IV. Средние значения, операторы $\hat{x}$ и $\hat{p}$

$|\Psi(x)|^2 = \Psi^*(x)\Psi(x)$ – плотность вероятности

$\Psi(x)$ ненаблюдаема.

$$\overline{\xi} = \sum_i \xi_i p_i = \int_{-\infty}^{+\infty} \xi p(\xi) d\xi$$

$$p(\xi) = |\Psi(\xi)|^2$$

Например,

$$\overline{x} = \int_{-\infty}^{+\infty} x |\Psi(x)|^2 dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi x \Psi^* dx.$$

В общем опр. оператор $\hat{L}$ показывает, каким образом каждой ф-и $u(x)$ из опр. класса сопост. др. ф-я того же класса.

$$\hat{L} u(x) = v(x)$$

$$\boxed{\hat{x} \Psi(x) = x\Psi.}$$

Сканировано с CamScanner

В силу III. Все операторы в квант. мех. линейны.

$\forall$ физ. вел. можно сопост. оператор: $\bar{f} = \int \psi^* (\hat{f} \psi) dx$ } осн. постулат квант. мех.

• Например,

$$\bar{p}_x = \int \psi^* \hat{p}_x \psi \, dx$$

?

$\forall$ свобод. частицу, движ. по x с имп. p_x

$$\psi = \mathrm{Re}\, e^{-i/\hbar (p_x x - Et)}$$

$$\bar{p}_x = p_x = \int A e^{i/\hbar (p_x x - Et)} \, \hat{p}_x e^{-\frac{i}{\hbar}(p_x x - Et)} dx \quad (*)$$

Нормировка: $A^2 \int e^{\frac{i}{\hbar}(p_x x - Et)} e^{-\frac{i}{\hbar}(p_x x - Et)} dx = 1$

Чтобы (*) вып, $\boxed{\hat{p}_x = -i\hbar \frac{d}{dx}}$

Т.к. $-i\hbar \frac{d}{dx} e^{-\frac{i}{\hbar}(p_x x - Et)} = p_x e^{-\frac{i}{\hbar}(p_x x - Et)}$

V Уравнение Шредингера ← вывести нельзя

$\psi = A e^{i/\hbar (px - Et)}$. Получ. для свобод. час. и распростр. на общий вид

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{iE}{\hbar}\psi, \quad \frac{\partial \psi}{\partial x} = \frac{ip}{\hbar}\psi, \quad \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = -\frac{p^2}{\hbar^2}\psi$$

исключим ВФ

$$-\frac{\hbar^2}{p^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} E = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}$$

$E = p^2/2m$

Дж·с 1/с

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi}$$

Дж.

постулируется и провер. эксп.

Ур-е Шредингера в отсутствие силовых полей

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi + \Delta U}$$ – в присут. сил. полей ← опыт.

Стац. сост. – набл. величины не зависят от времени.

• Стац. сост-е – набл. величины не завис. от вр.

Пробуем угадать ур-е (слова) и постулировать его.

$\rho=\psi^*\psi$ – от t не завис!

$\boxed{\Psi(\bar r,t)=\psi(\bar r)e^{-i\omega t}}$ → в ур. Шред.

$$i\hbar(-i\omega)\psi(\bar r)e^{-i\omega t} = -\frac{\hbar^2}{2m}e^{-i\omega t}\Delta\psi(\bar r)+U(\bar r)\psi(\bar r)e^{-i\omega t}$$

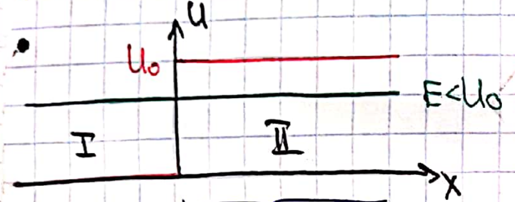
$$\hbar\omega\psi=\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta+U(\bar r)\right]\psi$$

|| ← гипотеза

E – полная, в стац. сост.

$$\boxed{\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta+U(\bar r)\right]\psi=E\psi}$$ – ур-е Шредингера для стац. сост.

VII Частица в поле прямоуг. ступеньки.

• 

$$U(x)=\begin{cases}U_0, & x>0\\ 0, & x<0\end{cases}$$

возм. в квант. мех. (фикс. x ⇒ неопр. p ⇒ ⇒ E „дрожит" и м.б. попад. в „запр. зону")

I $\quad \frac{d^2\psi}{dx^2}+\underbrace{\frac{2mE}{\hbar^2}}_{k_1^2}\psi=0$

$$\psi_I=\underbrace{1\cdot e^{ik_1x}}_{\text{пад. волна}}+\overbrace{Ae^{-ik_1x}}^{\text{отраж. волна}}$$

„ампл. коэф. отражения"

II $\quad \frac{d^2\psi}{dx^2}-\underbrace{\frac{2m}{\hbar^2}(U_0-E)}_{k_2^2}\psi=0$ ⇒ 2 реш. e^{-k_2x} и $\cancel{e^{k_2x}}$ → 0 (не огр. на ∞)

$$\psi_{II}=Be^{-k_2x}$$

<u>Сшивка</u> ψ_I и ψ_{II}:

$$\begin{cases}\text{Непр-ть: } \psi_I(0)=\psi_{II}(0)\\ \psi_I'(0)=\psi_{II}'(0) \leftarrow \text{из непр-ти производной}\end{cases} \Rightarrow \begin{cases}1+A=B\\ ik_1(1-A)=-k_2B\end{cases} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \boxed{A=\frac{(1-ik_2/k_1)}{(1+ik_2/k_1)}},\quad \boxed{B=\frac{2}{1+ik_2/k_1},\quad |B|=\frac{2}{\sqrt{1+(k_2/k_1)^2}}}$$

$|A|=1$ – вся E пад. волны отр.

экспон. зат. под ступ. (аналог. оптике)

Аналог. полному отр-в оптике

• Надбарьерное прохождение

$$\boxed{E > U_0 \Rightarrow B = \frac{2k_1}{k_1 + k_2},\ A = B - 1}$$

• $D = \frac{j^2 \text{ (прош.)}}{j^1 \text{ (пад)}}$ – коэф. прохождения ч/з барьер.

поток = скорость поток. $\underbrace{\text{его плотность}}_{\psi\psi^*}$

(I). $T_1 = E = \frac{mV_1^2}{2} = \frac{k_1^2 \hbar^2}{2m}$

(II) $T_2 = \frac{mV_2^2}{2} = E - U_0 = \frac{k_2^2 \hbar^2}{2m}$

$\frac{V_2}{V_1} = \frac{k_2}{k_1}$, $\frac{\rho_2}{\rho_1} = B^2$

$\Downarrow$

$$\boxed{D = \frac{k_2}{k_1} B^2 = \frac{4k_1 k_2}{(k_1 + k_2)^2}}$$

$R + D = 1$

$\boxed{R = \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}\right)^2}$ – коэф. отражения от барьера.

Аналог. ф-ли Френеля для пад. волны на гр. сред.