НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ
ВЫСШАЯ ШКОЛА ЭКОНОМИКИ
Факультет физики

Экзамен. Квантовая механика

Билет 5. Уравнение Шрёдингера и стационарное уравнение Шрёдингера.

Подготовку выполнил студент 2 курса
Захаров Сергей Дмитриевич

НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ

Москва
2020

---

1. Кто такой гамильтониан и откуда он взялся

В классической механике для полного описания движения частицы достаточно задать координату и скорость в некоторый момент времени, чтобы описать дальнейшее движение с помощью уравнений. В квантовой механике у нас вместо координаты и скорости волновая функция, значит мы хоти знать, как меняется со временем она. То есть мы хотим, чтобы задание волновой функции в некоторый момент времени определяло (через уравнения) поведение частицы во все последующие моменты времени (естественно в том вероятностном смысле, который допускает квантовая механика). Математически это означает связь волновой функции и ее производной:

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \hat{H}\Psi \tag{1}$$

Про $\hat{H}$ мы можем пока сказать, что это какой-то линейный оператор.

Как мы уже знаем, интеграл квадрата модуля волновой функции от времени не зависит, значит:

$$\frac{\partial}{\partial t}\int|\Psi|^2dx = \int\frac{\partial\Psi^*}{\partial t}\Psi dx + \int\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial t}dx = 0$$

Заменяя здесь производные с помощью уравнения 1, получим:

$$\frac{i}{\hbar}\int(\hat{H}^*\Psi^*)\Psi dx - \frac{i}{\hbar}\int\Psi^*(\hat{H}\Psi)dx \quad\Rightarrow\quad \int\Psi^*\hat{H}^{*T}\Psi dx = \Psi^*\hat{H}\Psi dx \tag{2}$$

Ψ в общем случае произвольные, а значит $\hat{H}$ — эрмитов.

Эрмитов оператор — такой оператор, что $\hat{A}^\dagger = A$. † обозначает комбинацию комплексного сопряжения и транспонирования.

Чему он соответствует? Ну, вспоминаем представление:

$$\Psi = |\Psi|e^{i\varphi}, \quad \varphi = \frac{S}{\hbar}$$

Учтем, что при переходе к классике (а мы хотим это сделать, чтобы понять, чему соответствует $\hat{H}$ в классике), при вычислении производной по времени основной вклад будет от дифференцирования быстрой фазы. Собственно, вычислим производную:

$$\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \frac{i}{\hbar}\frac{\partial S}{\partial t}\Psi$$

Сравниваем теперь с 1 и видим, что:

$$\hat{H} = -\frac{\partial S}{\partial t}$$

А это значит, что H соответствует функции Гамильтона (полная энергия).

Уравнение 1 — **уравнение Шредингера**.

2. Стационарное уравнение Шредингера и волновые функции во времени

Уравнение на собственные значение гамильтониана (спойлер: из классической механики мы знаем, что это будет энергия) называется **стационарным уравнение Шредингера**:

$$\hat{H}\left|n\right\rangle = E_n\left|n\right\rangle \tag{3}$$

Пусть гамильтониан от времени не зависит, а $|n\rangle$ — некоторая его собственная функция. Тогда из линейности ясно, что мы ее можем домножить на любой фазовый множитель. Во-вторых, из уравнения 1 ясно, что зависимость от времени в таком случае должна иметь вид:

$$\exp\left(-i\frac{E_n}{\hbar}t\right)\left|n\right\rangle$$

То есть мы всю зависимость выкинули в фазовую часть. Поэтому собственные состояния гамильтониана называют стационарными — хотя волновые функции от времени зависят (только через фазовый множитель), физические величины — не зависят (фазовый множитель технически можно выбрать любой).

Имея это знание, мы можем сказать, как зависит от времени произвольная функция, которую мы задали при $t = 0$, например. Разложим ее по собственных функциям гамильтониана:

$$\Psi(0) = \sum_n c_n\left|n\right\rangle$$

Как зависят члены суммы от времени мы уже знаем, поэтому получаем просто:

$$\Psi(t) = \sum_n c_n \exp\left(-i\frac{E_n}{\hbar}t\right)\left|n\right\rangle$$

Для нахождения коэффициентов c_n нужно просто спроецировать:

$$c_n = \int \psi_n^*(x)\psi(x)dx$$

3. Вариационный принцип

Чисто технически, стационарное уравнение Шредингера 3 можно представлять себе как результат действия вариационного принципа. Посмотрим как это получается:

$$\delta \int \psi^*(\hat{H} - E)\psi dx = 0$$

Функция ψ комплексная. По этой причине нам нужно варьировать по двум независимым вещественным функциям. Долго не думаем, берем в качестве этих функций ψ и ψ^*. Если мы проварьируем по ψ^*, то мы получим стационарное уравнение Шредингера и все. Если проварьируем по ψ, то получим то же самое, но комплексно сопряженное:

$$\int \psi^*(\hat{H} - E)\delta\psi dx = \int \delta\psi(\hat{H}^* - E)\psi^* dx = 0$$

Здесь мы пользуемся тем, что гамильтониан — эрмитов оператор.

То есть то же самое. Удивительно.

3.1. Запись через задачу об условном экстремуме

Можно еще сказать, что наша задача сводится к нахождению следующего экстремума:

$$\delta \int \psi^* \hat{H} \psi dx = 0, \quad \text{при условии} \int \psi^* \psi dx = 1$$

В таком случае E — множитель Лагранжа. Минимальное значение, которое будет достигаться (при обозначенном условии) — энергия основного состояние (E_0), функции — волновые функции основного состояния.

1