

КОНСПЕКТ ЛЕКЦИЙ ПО КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ. ОСНОВНЫЕ ФОРМУЛЫ И ОПРЕДЕЛЕНИЯ

Л1 Введение. Принципы и постулаты КвМ. Принцип суперпозиции Волновая функция (ВФ) и ее физический смысл

$\Psi(\xi, t)$, где ξ - обобщенная координата, t - время, параметр

? ВФ Ψ не имеет физического смысла. Почему?

Имеет физический смысл **плотность вероятности**

$$\rho(\xi, t) = |\Psi(\xi, t)|^2 \equiv \Psi^*(\xi, t) \cdot \Psi(\xi, t)$$

Вероятность найти микросистему в точке ξ в момент времени t

$$|\Psi|^2 d\xi$$

Л2 Операторы и их свойства

? Математическое определение: оператор сам по себе смысла не имеет, имеет смысл его действие на функцию. “Прочтите” следующее выражение

$$\hat{F} \varphi = f$$

? Почему? В КвМ класс используемых операторов ограничен **линейными операторами**.

Чтобы узнать линейный оператор или нет, нужно проверить следующее свойство

$$\hat{F}(c_1 \varphi_1 + c_2 \varphi_2) = c_1 \hat{F} \varphi_1 + c_2 \hat{F} \varphi_2$$

Л3 Операция Эрмитова сопряжения. Эрмитовы операторы

Важную роль в КвМ играют *эрмитовы* (или *самосопряженные*) операторы

$$\hat{F}^\dagger = \hat{F}, \text{ где } \hat{F}^\dagger = \tilde{F}^*$$

? Почему? В чем особенность эрмитовых операторов?

В КвМ измеряемые величины имеют статистический характер и *математически* определяются средним значением от оператора *динамической* переменной

$$\overline{F} = \int \Psi^* \hat{F} \Psi d\xi$$

? Какая информация содержится в ВФ?

? Какие еще переменные кроме “динамических” Вы знаете?

Л4 Уравнение на собственные функции и собственные значения

Физическая величина имеет определенное значение, если

$$(\Delta \hat{F})^2 \geq 0, \text{ где } \Delta \hat{F} = \hat{F} - \overline{F}$$

Таким образом, можно сформулировать задачу на *собственные функции* (СФ) и *собственные значения* (СЗ) оператора $\hat{F}$.

Итак, если $(\Delta \hat{F})^2 = 0$, то

$$\hat{F} \varphi = F \varphi ,$$

где φ - СФ, F - СЗ

[?] Все задачи на СФ и СЗ можно классифицировать следующим образом:

$$F_1 \rightarrow \varphi_1$$

$$F_1 \rightarrow \varphi^{(1)}_1, \varphi^{(2)}_1, \dots, \varphi^{(\alpha)}_1 (\alpha - \text{кратность вырождения})$$

F - принимает непрерывные значения

Дайте правильное определение классификации спектров для этих трех случаев.

Свойства СФ и СЗ эрмитовых операторов

Дискретный невырожденный спектр

Ортонормированность

$$\int \varphi_m^* \varphi_n d\xi = \delta_{mn}$$

Полнота

$$\sum_n \varphi_n^*(\xi') \cdot \varphi_n(\xi) = \delta(\xi' - \xi)$$

Постулат о разложении произвольной ВФ $\Phi(\xi)$ в ряд по ортонормированному полному базису

$$\Phi(\xi) = \sum_n a_n \varphi_n(\xi) ,$$

где коэффициенты разложения определены таким образом

$$a_n = \int \Phi(\xi) \cdot \varphi^*(\xi) d\xi$$

[?] Что значит – разложить функцию в ряд ?

Оператор координаты и импульса (1)

В КвМ вид операторов координаты x и проекции импульса p_x постулируется

$$x \equiv \hat{x}, \quad p_x = -i\hbar \frac{d}{dx}$$

[?] Запишите оператор кинетической энергии $\hat{T}_x = \frac{\hat{p}_x^2}{2m}$ в явном виде

СФ и СЗ оператора импульса

$$p_x \varphi_{p_x}(x) = p_x \varphi_{p_x}(x),$$

$$\varphi_{p_x}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-ip_x x/\hbar}, \quad -\infty < p_x < \infty$$

[?] Обобщите предыдущее выражение на трехмерный случай

Л5 Полное квантово-механическое описание

Коммутаторы

Определение: **коммутатор** – это оператор, определенный следующим образом

$$[A, B] = AB - BA$$

? Докажите две следующие важные теоремы:

T.1 Если два оператора имеют общую систему собственных функций, то они коммутируют.

T.2 Если два оператора коммутируют, то у них общая система собственных функций.

Эти две теоремы позволяют сформулировать концепцию “*Полного квантово-механического описания микросистем*”: набор всех **взаимно** коммутирующих операторов определяет число динамических переменных, которые могут быть измерены в одном эксперименте.

Принцип неопределенности Гейзенберга

Если два эрмитовых оператора не коммутируют

$$[A, B] = iC, \quad [\Delta A, \Delta B] = iC,$$

то средние значения от операторов дисперсии этих величин связаны неравенством, которое называется “*Соотношением неопределенностей Гейзенберга*”

$$\overline{(\Delta A)^2} \cdot \overline{(\Delta B)^2} \geq \frac{(\overline{C})^2}{4}$$

Пример некоммутирующих операторов

$$[x, p_x] = i\hbar, \quad [\varphi, L_z] = i\hbar$$

Л6. Уравнение Шредингера. Основные свойства

Основное уравнение нерелятивистской квантовой механики, описывает волновые свойства микрообъектов. Автор – австрийский физик-теоретик Эрвин Шредингер, лауреат Нобелевской премии.

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\xi, t)}{\partial t} = H\Psi(\xi, t)$$

? *Какое значение имеет наличие мнимой единицы i в левой части уравнения Шредингера (УШ)?*

? *Какой смысл имеет в УШ постоянная Планка $\hbar$?*

Стационарное уравнение Шредингера

Если гамильтониан взаимодействия не зависит явно от времени, то решение УШ можно искать методом разделения переменных, т.е. ВФ факторизуется на координатную и временную части:

$$\Psi(\xi, t) = \psi(\xi) \cdot C(t)$$

Координатная ВФ находится из решения *стационарного уравнения Шредингера*

$$H\psi(\xi) = E\psi(\xi)$$

Все стационарные решения имеют одинаковую по форме временную зависимость, которая определяется энергией системы E

$$\Psi(\xi, t) = \psi(\xi) \cdot e^{-iEt/\hbar}$$

Л7. Одномерное уравнение Шредингера

Практически все одномерные задачи в КвМ имеют модельный характер, т.к. в дальнейшем используются как конструктивные элементы для более сложных, в том числе, многомерных задач.

Итак, **одномерное УШ** представляет собой однородное дифференциальное уравнение второго порядка с определенными граничными условиями, которое описывает движение частицы массы m в потенциале V :

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V)\Psi = 0$$

! МАТЕМАТИЧЕСКОЕ ОТСТУПЛЕНИЕ

Приведем ряд полезных соотношений, которые многие тестовые задачи позволяют решить на уровне проверки размерности

Характерная единица длины в атомной и ядерной физике

$$1 \text{ фм} = 10^{-13} \text{ см}$$

Единицы измерения массы элементарных частиц, атомных ядер

$$[mc^2] = \text{МэВ}$$

производные единицы

$$1 \text{ КэВ} = 10^{-3} \text{ МэВ}$$

$$1 \text{ эВ} = 10^{-6} \text{ МэВ}$$

масса электрона

$$m_e c^2 = 0,511 \text{ МэВ}$$

масса нуклона

$$m_N c^2 = 938 \text{ МэВ}$$

комбинация фундаментальных констант

$$\hbar c = 197,33 \text{ МэВ} \cdot \text{фм}$$

постоянная тонкой структуры

$$\alpha = 1/137$$

Одномерная потенциальная яма бесконечной глубины

Решаем УШ с потенциалом Рис.1

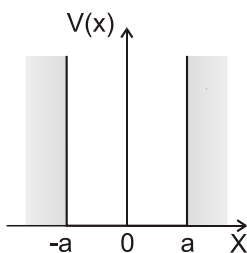


Рис.1

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} + k^2\Psi = 0, \text{ где } k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} - \text{квадрат волнового вектора}$$

Решения этого уравнения имеют вид

$$\Psi_I(x) = A \cdot \cos\left(\frac{\pi}{2a} x \cdot n\right), \text{ где } n = 1, 3, 5 \dots$$

$$\Psi_{II}(x) = B \cdot \sin\left(\frac{\pi}{2a} x \cdot n\right), \text{ где } n = 2, 4, \dots$$

Энергетические уровни квантуются по правилу

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{8ma^2} \cdot n^2$$

8 Л.Линейный гармонический осциллятор

Вы начинаете работать над самой фундаментальной задачей КвМ. Будьте внимательны и детально разберитесь во всех математических тонкостях. Мы предлагаем Вам только краткое изложение этой темы.

[?] Какие явления в молекулярной физике, оптике, атомной и ядерной физике, физике твердого тела, социологии, экономике и ... можно моделировать с помощью линейных взаимодействий $F = -kx$?

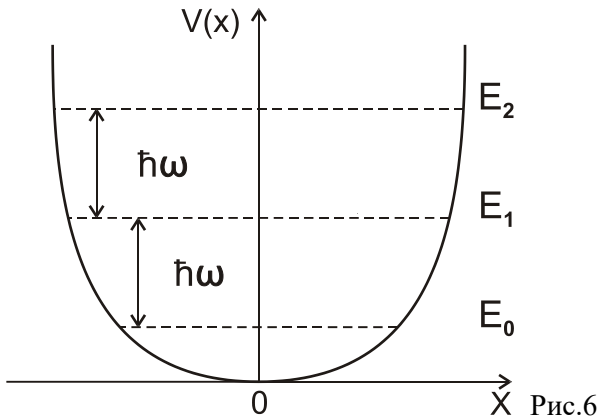
Потенциал гармонического осциллятора представляет собой параболу

$$V(x) = \frac{m\omega^2}{2} x^2$$

Потенциал взаимодействия представляет собой яму бесконечной глубины, т.о. решения уравнения Шредингера представляют собой дискретный спектр

$$E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})$$

Очевидно, что расстояние между соседними энергетическими уровнями является постоянной величиной и равно **кванту** энергии $\hbar\omega$. Такие спектры называются **эквидистантными**, Рис. 6.



Характерным, другими словами — максимально информативным, параметром в задаче о гармоническом осцилляторе является комбинация констант, которая называется **“осцилляторным параметром”**

$$x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$$

[?] Убедитесь, что размерность осцилляторного параметра является линейной, $[L]$. Для этого нужно использовать единицы измерения $\hbar c$, $m c^2$ и $\hbar \omega$.

Л9 Решение УШ для Линейного гармонического осциллятора

Собственная функция оператора H имеет аналитический вид

$$\Psi_n(x) = N_n H_n \left(\frac{x}{x_0} \right) e^{-x^2/2x_0^2}$$

где $N_n = 1/\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi} x_0}$ - нормировка ВФ, $H_n(x/x_0)$ - полиномы Эрмита.

Обратите внимание: минимальная энергия в спектре ($n=0$) отлична от нуля, т.е. на одну степень свободы приходится $E_0 = \hbar \omega / 2$ квантов. Это связано с принципом неопределенности Гейзенберга.

[?] Объясните, каким образом? В чем физический смысл полученного результата? Каким образом это можно проверить экспериментально?

Л10. Законы сохранения в Квантовой механике

Изменение квантово-механических величин со временем

[?] Почему в КвМ производную по времени нельзя ввести обычным образом, а именно

$$\frac{df}{dt} = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{f(t + \Delta t) - f(t)}{\Delta t}$$

Чтобы получить правило дифференцирования операторов по времени используем полное, т.е. временное УШ и постулат о том, что среднее значение производной от оператора по времени равно производной по времени от среднего значения оператора

[?] Запишите последнее утверждение в математической форме

Таким образом, производная по времени

$$\frac{dF}{dt} = \frac{\partial F}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar} [F, H], \text{ где } H = T + V$$

Если оператор не зависит **явно** от времени, т.е. $\frac{\partial F}{\partial t} = 0$ и коммутирует с гамильтонианом системы $[F, H] = 0$, то такие величины сохраняются со временем и называются **интегралами движения**.

[?] В каких случаях энергия для микрочастиц не сохраняется

Уравнение непрерывности

Уравнение непрерывности в КвМ выражает закон сохранения числа частиц

$$\operatorname{div} \vec{j} + \frac{\partial \rho}{\partial t} = 0, \text{ где } \rho = \psi^* \cdot \psi - \text{плотность вероятности}$$

$$\vec{j} = \frac{\hbar}{2mi} [\psi^* \vec{\nabla} \psi - \psi \vec{\nabla} \psi^*] - \text{плотность тока вероятности}$$

Л11 Прямоугольный потенциальный барьер бесконечной ширины
КвМ особенности рассеяния частиц на потенциальном барьере ∞ ширины (Рис.2) состоит в двух таких эффектах

$E \succ V_0$ - надбарьерное отражение

$E \prec V_0$ - туннелирование и, как следствие, подбарьерное отражение

Процессы рассеяния характеризуются коэффициентами отражения (R) и прохождения (D).

Определение:

$$R = \left| \frac{j_{\text{отп}}}{j_{\text{над}}} \right|; \quad D = \left| \frac{j_{\text{отп}}}{j_{\text{над}}} \right|; \quad R + D = 1$$

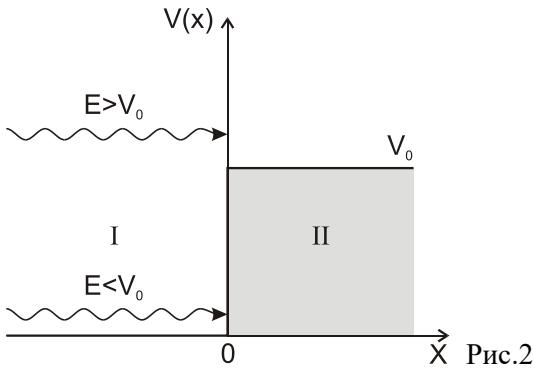


Рис.2

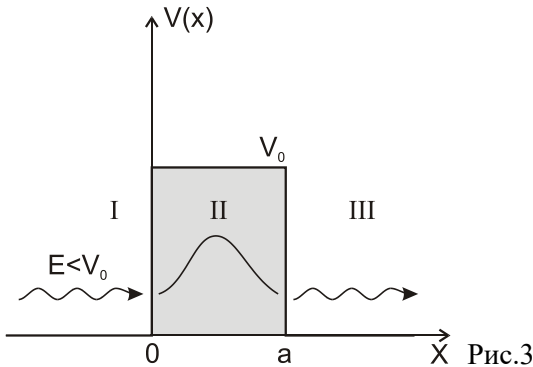
Л12. Прямоугольный потенциальный барьер конечной ширины

Потенциальный барьер конечной ширины и соответствующие квадраты волновых векторов при энергиях, падающих на барьер частиц $E \prec V_0$ (Рис. 3)

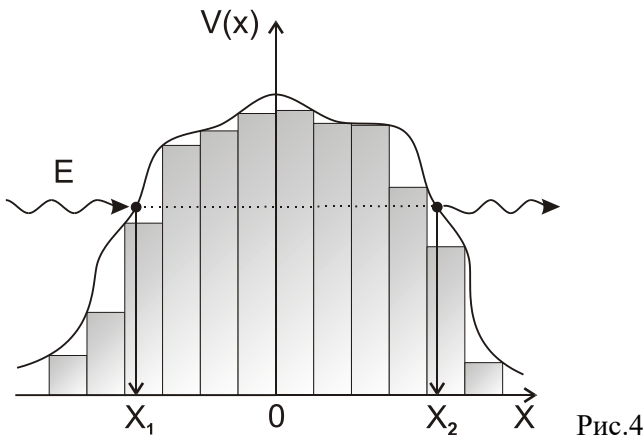
$$V(x) = \begin{cases} 0, & x < 0, & k^2 = 2mE / \hbar^2 \\ V_0, & 0 \leq x \leq a, & \kappa^2 = 2m(V_0 - E) / \hbar^2 \\ 0, & x > a, & k^2 = 2mE / \hbar^2 \end{cases}$$

При $\hbar a \gg 1$ коэффициент прохождения барьера
(*туннельный эффект*)

$$D = D_0 \cdot \exp(-2\hbar a), \text{ или } D = D_0 \cdot \exp(-2a / \hbar \sqrt{2m(V_0 - E)})$$



Используя результаты предыдущей задачи, применим полученные результаты к задаче рассеяния частиц на барьере произвольной формы (аппроксимируем форму потенциала одномерными прямоугольными барьерами сколь угодно малой ширины $\Delta a \rightarrow dx$, Рис. 4)



Проницаемость D определяется следующим образом

$$D = D_0 \cdot \exp\left(-2/\hbar \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m(V(x) - E)} dx\right)$$

Л13. Основные свойства 3-мерного УШ. Понятие вырождения

Взаимодействие называется центрально-симметричным ($\equiv$ азимутально-симметричным), если потенциал $V(r)$ зависит только от расстояния между частицами $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$ и не зависит от полярных θ и азимутальных углов φ .

Уравнение Шредингера в трехмерном случае записывается следующим образом:

$$\hat{H}\Psi(r, \theta, \varphi) = E\Psi(r, \theta, \varphi),$$

где оператор Гамильтона имеет вид

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \vec{\nabla}^2 + V(r)$$

Оператор Лапласа в сферической системе координат определен таким образом:

$$\Delta \equiv \vec{\nabla}^2 = \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d}{dr} \right) + \frac{1}{r^2} \Delta_{\Omega},$$

где угловая часть

$$\Delta_{\Omega} = \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} (\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta}) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}$$

Заметим, что оператор квадрата углового момента $\hat{L}^2$ можно выразить через оператор Δ_{Ω}

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2 \Delta_{\Omega}$$

Таким образом, СФ в уравнении Шредингера факторизуются на радиальную и угловую части

$$\Psi(r, \theta, \varphi) = R(r) \cdot Y_{lm}(\Omega),$$

где угловые сферические функции Y_{lm} хорошо известны, их явный вид можно найти, например, в [3, 4].

[?] Покажите, что $[\hat{L}^2, \hat{L}_z] = 0$

[?] Покажите, что оператор проекции углового момента $\hat{L}_z$ в сферических переменных имеет вид $\hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}$

! Сравните с оператором $\hat{p}_x$!

[?] Найдите СФ и СЗ оператора $\hat{L}_z$.

Правила квантования операторов $\hat{L}^2$ и $\hat{L}_z$

$$\hat{L}^2 Y_{lm}(\theta, \varphi) = \hbar^2 \cdot l(l+1) \cdot Y_{lm}(\theta, \varphi)$$

$$\hat{L}_z Y_{lm}(\theta, \varphi) = \hbar \cdot m \cdot Y_{lm}(\theta, \varphi)$$

где СЗ этих операторов принимают значения

орбитальное квантовое число: $l = 0, 1, 2, \dots$ - целые числа;

магнитное квантовое число: $m = l, l-1, \dots, -l$, всего $2l+1$ значений при заданном l

Итак, в случае центрально-симметричных взаимодействий

* во **всех** задачах угловая часть известна и для данного l определяется угловой сферической функцией Y_{lm}

* **минимальная кратность вырождения** имеет место по магнитному квантовому числу m и равно $2l+1$

Энергетический спектр и радиальную часть ВФ находим из уравнения для $R(r)$:

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d}{dr} R(r) \right) + \frac{2\mu}{\hbar^2} (E - V(r) - \frac{\hbar^2}{2\mu} \cdot \frac{l(l+1)}{r^2}) R(r) = 0$$

* Заметим, что **все** радиальные уравнения зависят от орбитального квантового числа l , которое входит в определение

центробежного потенциала $V_{цб}(r) = \frac{\hbar^2}{2\mu} \cdot \frac{l(l+1)}{r^2}$. Этот

потенциал является потенциалом отталкивания! Если $l \neq 0$, он стремится к бесконечности при $r \rightarrow 0$.

Для того, чтобы решения $R(r)$ отвечали свойствам ВФ необходимо исследовать их поведение на малых расстояниях. Для этого удобно работать с, так называемой, **укороченной функцией** $u(r) = R(r) \cdot r$, которая точно равна нулю при $r = 0$.

[?] *Каким требованиям должны отвечать волновые функции*

[?] Получите уравнение для функции $u(r)$

$$\frac{d^2 u}{dr^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2} (E - V(r) - \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{l(l+1)}{r^2}) u = 0$$

Легко показать, что

$$u(r)|_{r \rightarrow 0} \sim r^{l+1}$$

[?] Как ведет себя ВФ $R(r)$ при $r \rightarrow 0$

Рассмотрим основные задачи для центрально-симметричных взаимодействий, которые имеют аналитическое решение.

Л14. 3-мерный гармонический осциллятор

Потенциал гармонического осциллятора обладает высокой степенью симметрии, поэтому решения для одномерного осциллятора легко обобщить на дву- и трехмерные системы, т.к. сам потенциал распадается на независимые одномерные по степеням свободы x, y, z :

$$V(r) = \frac{\mu\omega^2}{2} \cdot r^2 = \frac{\mu\omega^2}{2} \cdot x^2 + \frac{\mu\omega^2}{2} \cdot y^2 + \frac{\mu\omega^2}{2} \cdot z^2$$

Трехмерная ВФ факторизуется по координатам x, y, z :

$$\Psi_{\Lambda}(x, y, z) = \psi_{n_x}(x) \cdot \psi_{n_y}(y) \cdot \psi_{n_z}(z),$$

где главное квантовое число Λ нумерует энергетические уровни

$$E_{\Lambda} = \hbar\omega(n_x + n_y + n_z + \frac{3}{2}), \quad \Lambda = 0, 1, 2, \dots$$

? *Посчитайте кратность вырождения энергетических уровней для $\Lambda = 0, 1, 2, 3, 4$. Убедитесь, что кратность вырождения больше минимальной. С чем это связано?*

Задача о 3-мерном осцилляторе имеет также аналитическое решение в сферических переменных.

Энергетические уровни нумеруют **главным квантовым числом**

$$\Lambda = 2n + l + 3/2, \quad \Lambda = 0, 1, 2 \text{ и т.д.},$$

которое зависит от следующих квантовых чисел

$n = 0, 1, 2, \dots$ - *радиальное квантовое число*

$l = 0, 1, 2, \dots$ - *орбитальное квантовое число*

? *Посчитайте кратность вырождения энергетических уровней для $\Lambda = 0, 1, 2, 3, 4$. Сравните с предыдущими результатами.*

Л15. Атом водорода

Атом водорода простейшая квантово-механическая система, которая играет фундаментальную роль, как в теории, так и в эксперименте.

Потенциал взаимодействия между протоном и электроном в атоме водорода – это **кулоновский потенциал** притяжения между точечными частицами

$$V_c(r) = -\frac{e^2}{r}$$

Водородоподобные системы являются аналогом атома водорода, для которых характерной особенностью является кулоновский потенциал взаимодействия.

Уравнение Шредингера для водородоподобных систем

$$\frac{d^2u}{dr^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left(E + \frac{ze^2}{r} - \frac{\hbar^2}{2\mu} \cdot \frac{l(l+1)}{r^2} \right) u = 0$$

Характерные единицы измерения для атомных систем

$$a = \frac{\hbar^2}{\mu e^2} - \text{атомная единица длины};$$

$$\text{для электрона } a_e = 0,529 \cdot 10^{-8} \text{ см}$$

$$E_a = \frac{e^2}{a} = \frac{\mu e^4}{\hbar^2} \text{ атомная единица энергии};$$

$$\text{для электрона } E_a = 27,2 \text{ эВ}$$

Учет движения атомного ядра в водородоподобных атомах. Мезоатомы

Правило квантования энергетических уровней водородоподобных систем

$$E_n = -\frac{e^2 z^2}{2a} \cdot \frac{1}{n^2} \text{ или } E_n = -\frac{\mu_e z^2 e^4}{2\hbar^2} \cdot \frac{1}{n^2}, \text{ где}$$

$$n = n_r + l + 1 - \text{главное квантовое число}$$

Если учесть движение ядра в водородоподобных атомах, то во всех выражениях следует заменить массу электрона μ_e на

$$\text{приведенную массу } \mu = \frac{\mu_e \cdot M_{\text{я}}}{\mu_e + M_{\text{я}}}.$$

Такое обобщение позволяет рассчитать, как меняются параметры водородоподобных систем.

? *Каким образом из полученных выше соотношений можно извлечь информацию о массах **изотопов** атома водорода – дейтерии, тритии, тетраводороде?*

? *Оцените параметры мезоатомов. **Мезоатомы** – это аналоги атома водорода, в которых электрон замещается π^- ($m_\pi c^2 = 139,6 \text{ МэВ}$) или μ^- мезоном ($m_\mu c^2 = 106,6 \text{ МэВ}$).*

? *Опишите свойства позитрония. **Позитроний** - это синтезированная система, в которой место протона занимает позитрон.*