

Билет 2

1. Стационарные состояния, их временная зависимость. Уравнение Шредингера для стационарных состояний.

$$\psi = c \cdot e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)}$$

Уравнение Шредингера.

1. Уравнение должно быть линейным и однородным, чтобы выполнялся принцип дифракции и интерф. 2) Чтобы выполнялся принцип суперпозиции должно содержать мировые константы 3) Должно решаться для любых квантово-мех. задач.

$$\frac{\partial \psi}{\partial x} = ik_x \psi, \quad \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = -k_x^2 \psi$$

$$\Delta \psi = \nabla^2 \psi = -k^2 \psi = -(p/\hbar)^2 \psi$$

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = -i\omega \psi = -i \frac{\varepsilon}{\hbar} \psi \quad \varepsilon = p^2 / 2m$$

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

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

- для своб. микрочастицы, Мы

будем рассм. потенциальные поля, энергия в ктр.

$$\frac{p^2}{2m} = E - U$$

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

хар-ся , тогда

- Ур-е ШРЕДИНГЕРА. Если силовое поле стационарно, то ф-я U не зависит явно от времени и имеет смысл

потенц. энергии, тогда $\psi(\vec{r}, t) = \psi(\vec{r}) e^{-iEt/\hbar}$,

подставляя в Ур-е Шредингера и сокращая на $e^{-iEt/\hbar}$,
получаем Ур-е для стационарных состояний

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(\vec{r}) + U \psi(\vec{r}) = E \psi(\vec{r})$$

Статистич. СМЫСЛ пси ψ -ции.

$$dP = |\psi|^2 dV$$

, квадрат модуля пси- ψ -ии определяет вероятность dP того, что частица будет обнаружена в пределах объема dV , условия ктр. должна удовлетворять пси- ψ -я: непрерывная, конечная, однозначная, производные непрерывны. Вычтем из ур-я Ш.

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

КОМПЛЕКСНО

сопряженное ему ур-е

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \bar{\psi}}{\partial x^2} + U \bar{\psi} = -i\hbar \frac{\partial \bar{\psi}}{\partial t}, \quad \text{ПОЛУЧИМ}$$

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial}{\partial x} \left(\bar{\psi} \frac{\partial \psi}{\partial x} - \psi \frac{\partial \bar{\psi}}{\partial x} \right) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \left(\bar{\psi} \frac{\partial \psi}{\partial t} + \psi \frac{\partial \bar{\psi}}{\partial t} \right) \quad \text{ИЛИ}$$

$$\frac{\partial}{\partial t} |\psi|^2 + \frac{\partial}{\partial x} \left(-\frac{i\hbar}{2m} \left(\bar{\psi} \frac{\partial \psi}{\partial x} - \psi \frac{\partial \bar{\psi}}{\partial x} \right) \right) = 0$$

$$\frac{\partial}{\partial t} |\psi|^2 + \operatorname{div} \left(-\frac{i\hbar}{2m} (\bar{\psi} \cdot \nabla \psi - \psi \cdot \nabla \bar{\psi}) \right) = 0$$

откуда

где выражение в скобках и есть вектор

где выражение в скобках и есть вектор плотности потока вероятности, по аналогии с уравнением непрерывности

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \vec{j} = 0$$

Принцип суперпозиции. Пусть в состоянии с волновой функцией $\psi_1(\vec{r})$ некоторое измерение приводит с достоверностью к определенному результату 1, а в состоянии с

волновой функцией $\psi_2(\vec{r})$ – к результату 2. Тогда

всякая линейная комбинация ψ_1 и ψ_2 , т.е. всякая

всякая линейная комбинация ψ_1 и ψ_2 , т.е. всякая
 волновая функция вида $c_1\psi_1 + c_2\psi_2$, где c_1 и c_2 -
 постоянные, дает состояние, в котором то же
 измерение дает либо результат 1, либо результат 2.
 Вероятности
 проявления этих результатов равны

c_1^2 и c_2^2 соответственно. Если $\psi_1(\vec{r}, t)$ и $\psi_2(\vec{r}, t)$
 являются решениями уравнения Шредингера, то и любая

$$\psi = \sum_n c_n \psi_n$$

их лин. комб. также является решением
 уравнения Шредингера.

2. Основные постулаты квантовой механики.

Представление физических величин операторами.

Собственные функции и собственные значения операторов, их связь с результатами измерений.

Состояние частицы в квантовой механике описывается заданием волновой функции

$\psi(x, y, z, t)$, являющейся функцией пространственных координат и времени. **Второй постулат квантовой**

механики: каждой физической величине соответствует определенный оператор этой физической величины. **1.**

Оператор координаты – умножение на координату. **2.**

Оператор импульса – $\hat{p} = -i\hbar\nabla$.

Оператор момента импульса – **3. Оператор**

$L_x = y p_z - z p_y, L_y = z p_x - x p_z, L_z = x p_y - y p_x.$

Для

$$\mathbf{L}_x = y p_z - z p_y, \quad \mathbf{L}_y = z p_x - x p_z, \quad \mathbf{L}_z = x p_y - y p_x. \quad \text{Для}$$

сферических координат:

$$\mathbf{L}_x = -i\hbar(\sin\varphi(\partial/\partial\theta) + \operatorname{ctg}\theta\cos\varphi(\partial/\partial\varphi)).$$

$$\mathbf{L}_y = -i\hbar(\cos\varphi(\partial/\partial\theta) - \operatorname{ctg}\theta\sin\varphi(\partial/\partial\varphi)).$$

$$\mathbf{L}_z = -i\hbar(\partial/\partial\varphi).$$

4. Операторы энергий.

$$E_k = p^2/2m_0 = -\hbar^2/2m_0 \Delta. \quad U\psi = U\psi. \quad \text{Гамильтониан}$$

$$\mathbf{H} = E_k + U = -\hbar^2/2m_0 \Delta + U.$$

Если при действии оператора на некоторую функцию получается та же

самая функция, умноженная на число, то есть, если

самая функция, умноженная на число, то есть, если $\Phi\psi=f\psi$, то такую функцию называют **собственной функцией** оператора Φ , а число f его **собственным значением**.

1. Спектр непрерывный. 2.

$-i\hbar\nabla\psi=p_x\psi\Rightarrow\psi=C\exp(ip_x x/\hbar)\Rightarrow$ спектр непрерывный. 3.

$i\hbar(\partial\psi/\partial\varphi)=L_z\psi\Rightarrow\psi=C\exp(iL_z\varphi/\hbar)$.

Учитывая, $\psi(\varphi+2\pi)=\psi(\varphi)\Rightarrow\exp(iL_z(\varphi+2\pi)/\hbar)=$

$\exp(iL_z\varphi/\hbar)\Rightarrow\exp(iL_z2\pi/\hbar)=1$

$\Rightarrow L_z 2\pi/\hbar = 2\pi m$, где $m=0, \pm 1, \pm 2 \dots \Rightarrow L_z = m\hbar$,

соответствует собственным функциям

$$\Psi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi}$$

$$L^2 = \hbar^2 l(l+1), \quad l=0, \pm 1, \pm 2 \dots$$

Задачи о нахождении спектра собственных значений оператора полной энергии \mathbf{H} связаны с заданием конкретного вида потенциального силового поля, в котором движется частица.

Формула для расчета среднего значения физической величины f в квантовом состоянии системы,

Формула для расчета среднего значения физической величины f в квантовом состоянии системы, описываемом волновой функцией ψ :

$$\langle f \rangle = \int \psi^* f \psi dV$$

Часто эту формулу называют **4-м постулатом** квантовой механики.

Задание 2 (17)

Минимальные размеры атома водорода составляют величину 10^{-10} м. Используя соотношение неопределенности минимальную кинетическую энергию E_k

Дано:

$$L = 10^{-10} \text{ м}$$

$$E_{k \min} = ?$$

Решение:

$$E_{k \min} = \frac{p_{\min}^2}{2m}$$

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}$$

$$\Delta x \approx \frac{L}{2}$$

$$\Delta p_x = p_{\min} = \frac{\hbar}{L}$$

$$\Rightarrow E_{k \min} = \frac{\hbar^2}{L^2 2m} = \frac{(1,054 \cdot 10^{-34})^2}{10^{-20} \cdot 2 \cdot 1,6 \cdot 10^{-19}}$$