

Квантовая теория

Семестр *I*
Журавлев В.М.

A golden torus (donut shape) is centered in the frame. Inside the torus, there is a smaller, translucent blue sphere. The background consists of a body of water with ripples, and a bright, hazy horizon line suggesting a sunset or sunrise. The text is overlaid on the image.

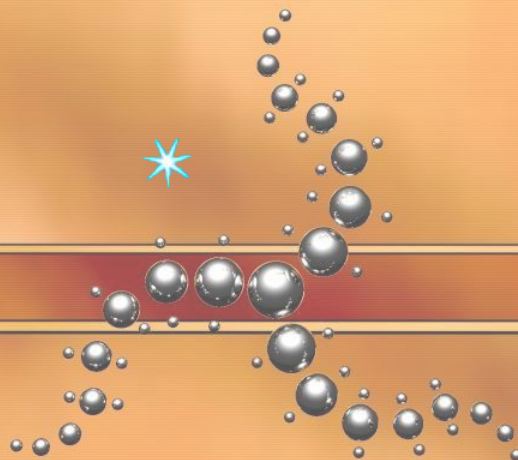
Лекция V

Стационарное уравнение Шредингера

The background of the slide features a close-up, artistic view of the planet Saturn and its rings. The rings are highly detailed, showing various gaps and structures. The planet's surface is visible at the bottom, showing some cloud patterns. The overall color palette is warm, with yellows, oranges, and browns.

Законы сохранения
классической механики
должны воспроизводиться в
аналогичных условиях в
квантовой теории!

Состояния с фиксированной энергией



Как вычислить состояния с
фиксированной энергией?

I. Состояния с фиксированной энергией для частицы в потенциальном поле

$$H(p, x) = \frac{p^2}{2m} + U(x)$$

$$\hat{H} = H(p, x) = \frac{\hat{p}^2}{2m} + U(\hat{x})$$

Состояние с фиксированной

энергией Ψ

$$H\Psi_E = E\Psi_E$$

I. Состояния с фиксированной энергией для частицы в потенциальном поле

В состоянии Ψ классическая

Уравнение для состояний с фиксированной энергией в потенциальном поле сил называется стационарным уравнением Шредингера!

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi_E + U(x) \Psi_E = E \Psi_E$$

II. Уравнение Шредингера

Пример.

Уравнение Шредингера для
частицы в пустом пространстве

$$U(x) = 0$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi_E = E \Psi_E$$

II. Уравнение Шредингера

Решение уравнения Шредингера для частицы в пустом

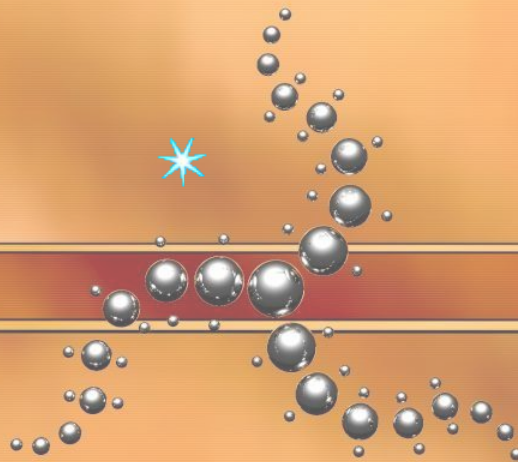
$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi_E + k^2 \Psi_E = 0$$

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

$$k = \frac{p}{\hbar}$$

$$\Psi_E = C_1 e^{i \frac{p}{\hbar} x} + C_2 e^{-i \frac{p}{\hbar} x}$$

Граничные условия и типы движений



Как частица движется на
бесконечности?

II. Классификация движений

1. Движение частицы называется финитным, если частица в любой момент находится в заданной ограниченной области пространства, которая называется потенциальной ямой

$$a \leq x(t) \leq b, \quad p_a \leq p(t) \leq p_b$$

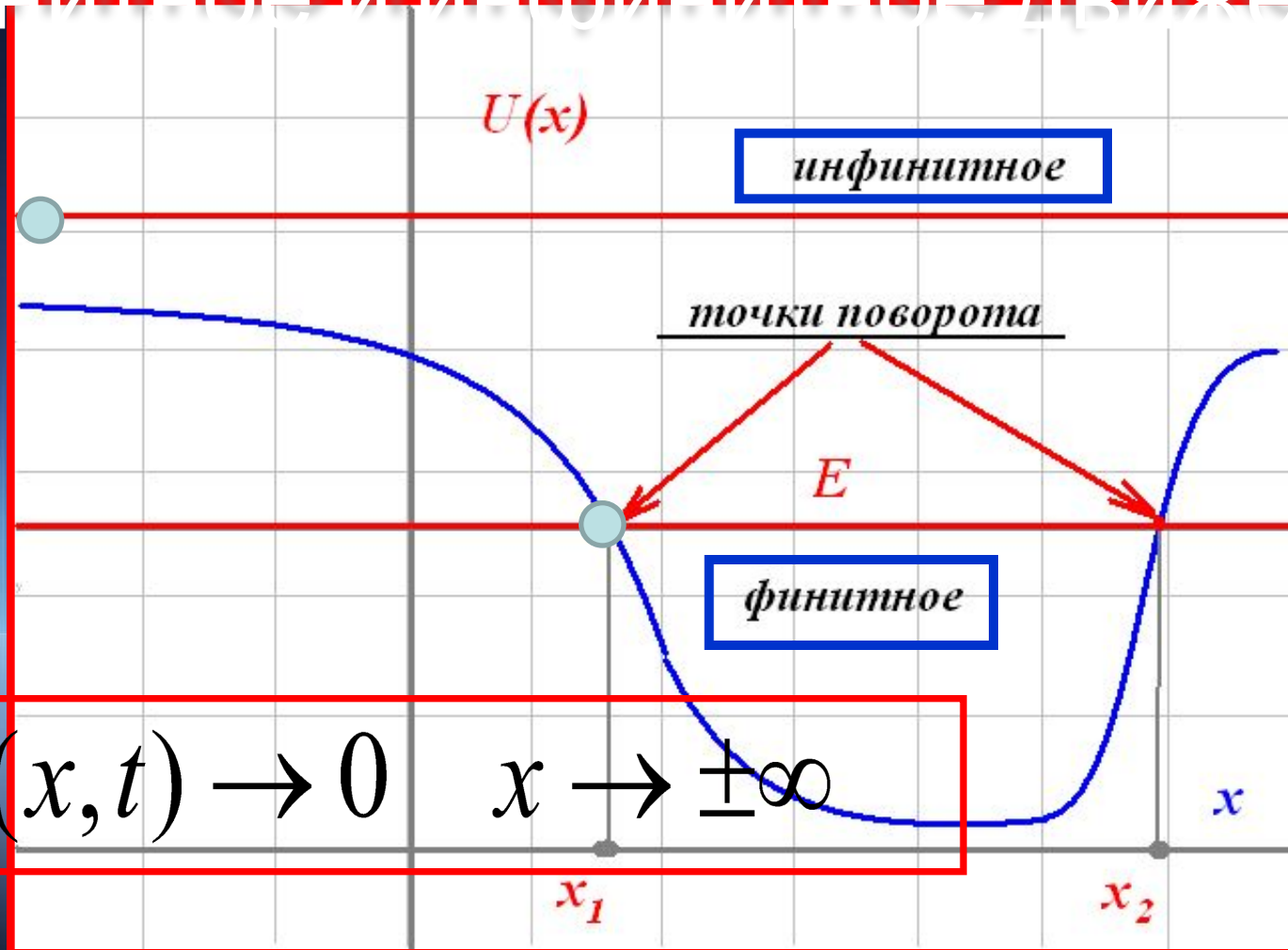
II. Классификация движений

2. Движение частицы называется ифинитным, если координата частица асимптотически стремится к бесконечности

$$-\infty \leq x \leq \infty$$

Диаграмма потенциальной энергии.

финитное и инфинитное движения



$$\Psi(x, t) \rightarrow 0 \quad x \rightarrow \pm\infty$$

III. Финитное движение

В случае финитного движения
вероятность обнаружения
частицы на бесконечном
удалении от потенциальной

ямы равна нулю!

$$\Psi(x, t) \rightarrow 0 \quad x \rightarrow \pm\infty$$

III. Инфинитное движение

В случае инфинитного движения на бесконечном удалении от области взаимодействия частица ведет себя как свободная и описывается состоянием с

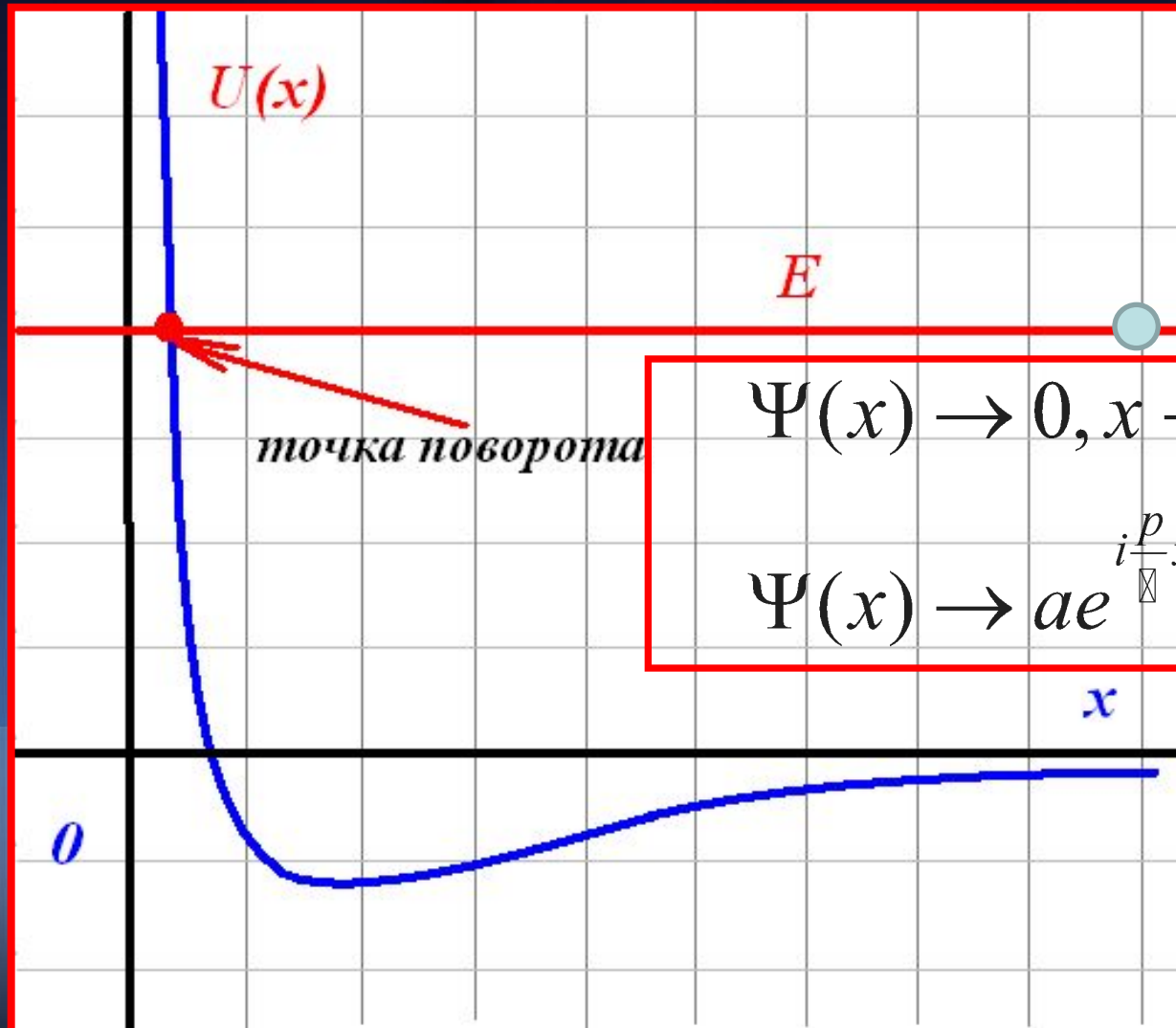
фиксированной энергией в

$\Psi(x, t) \rightarrow e^{i\frac{E}{\hbar}t - i\frac{p}{\hbar}x}$ в пустом пространстве $\pm\infty$

III. Полуинфинитное движение

В случае полуинфинитного движения используются оба типа граничных условий. В подбарьерной области волновая функция убывает на бесконечности, а в надбарьерной – стремится к волне Де Бройля

Диаграмма потенциальной энергии. Полуинфинитное движение



$$\Psi(x) \rightarrow 0, x \rightarrow -\infty$$

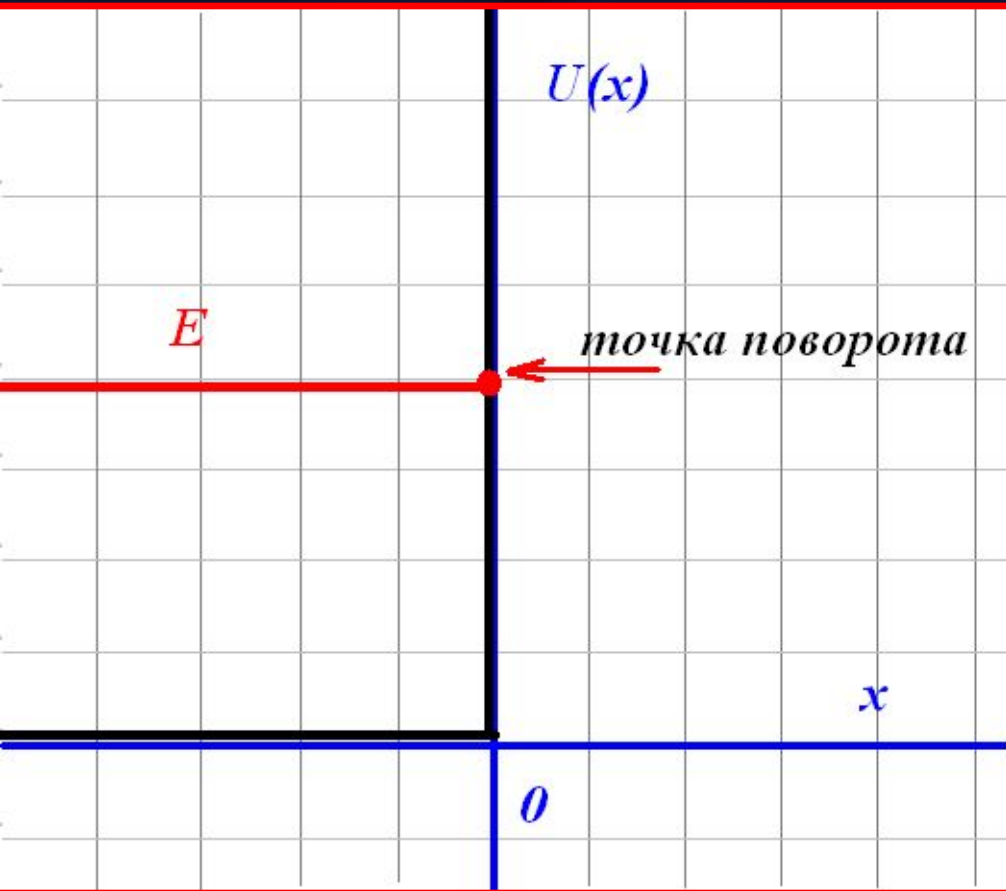
$$\Psi(x) \rightarrow ae^{i\frac{p}{\hbar}x} + be^{-i\frac{p}{\hbar}x}, x \rightarrow \infty$$

IV. Постулат непрерывности

Все состояния квантовой системы описываются всюду непрерывными функциями координат и времени!

$$\Psi(x+0) = \Psi(x-0), \quad \forall x \in [-\infty, \infty]$$

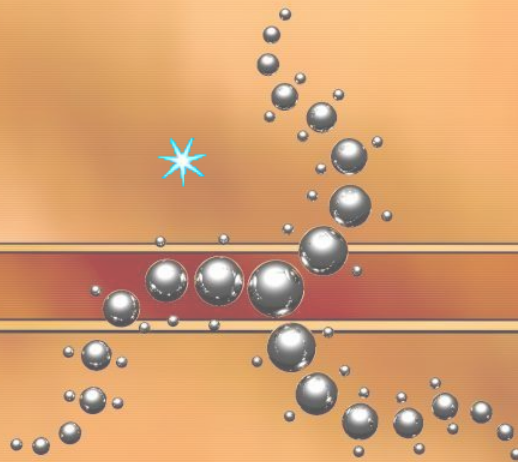
IV. Бесконечный энергетический барьер



$$\Psi(0) = 0$$

Вероятность
частицы
пересечь
бесконечны
й
энергетичес
кий барьер

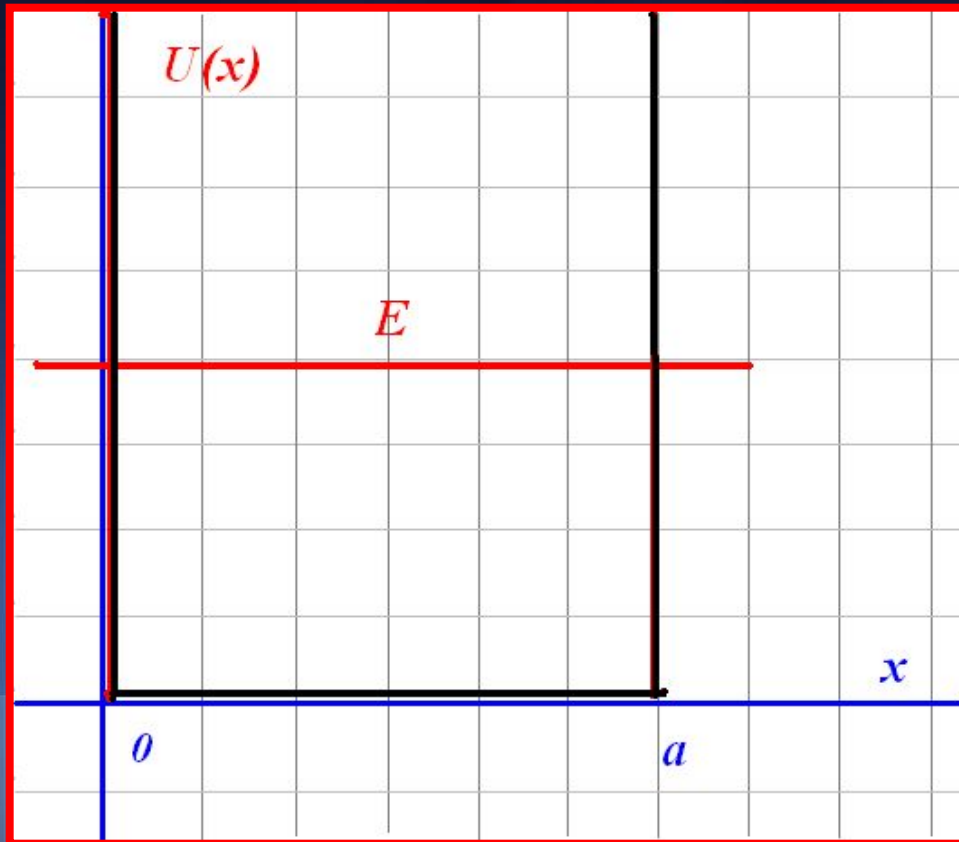
Бесконечно глубокая потенциальная яма



Частица в непроницаемом ящике!

Бесконечно глубокая яма.

Постановка задачи.



$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}$$

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi_E + k^2 \Psi_E = 0$$

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} > 0$$

$$k = \frac{p}{\hbar} > 0$$

$$\Psi(0) = 0, \quad \Psi(a) = 0$$

$$\Psi_E(x) = A \sin(kx) + B \cos kx, \quad 0 < x < a$$

Бесконечно глубокая яма. Собственные энергии.

$$\Psi_E(x) = A \sin(kx) + B \cos kx, \quad 0 < x < a$$

$$\Psi_E(0) = B = 0, \quad \Psi(a) = A \sin(ka) = 0$$

$$ak_n = \pi n - \text{дискретный спектр}$$

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2m} k_n^2 = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi n}{a} \right)^2$$

Бесконечно глубокая яма. Собственные функции.

$$\Psi_n(x) = A \sin\left(\frac{\pi n}{a} x\right), \quad 0 < x < a$$

$$\int_0^a |\Psi_n(x)|^2 dx = 1.$$

$$|A|^2 \int_0^a \sin^2\left(\frac{\pi n}{a} x\right) dx = \frac{|A|^2}{2} \int_0^a \left(1 - \cos\left(\frac{2\pi n}{a} x\right)\right) dx = \frac{|A|^2}{2} a = 1$$

Бесконечно глубокая яма.

Сводка результатов.

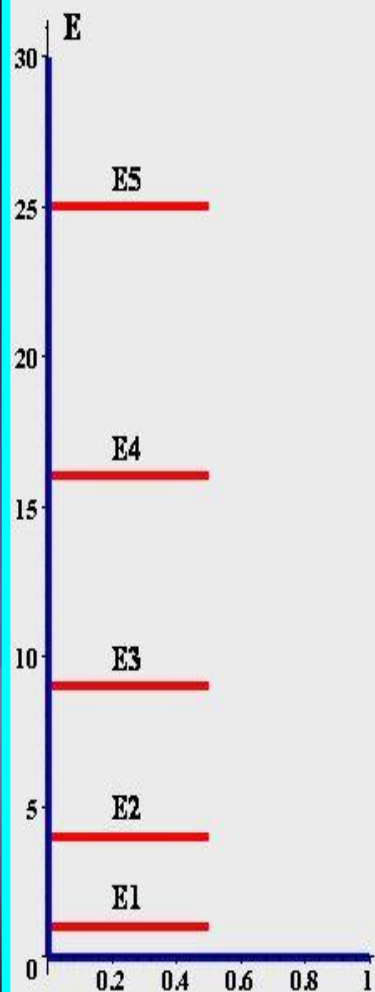
$$\Psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{\pi n}{a} x\right), \quad 0 < x < a$$

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2m} k_n^2 = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi n}{a}\right)^2$$

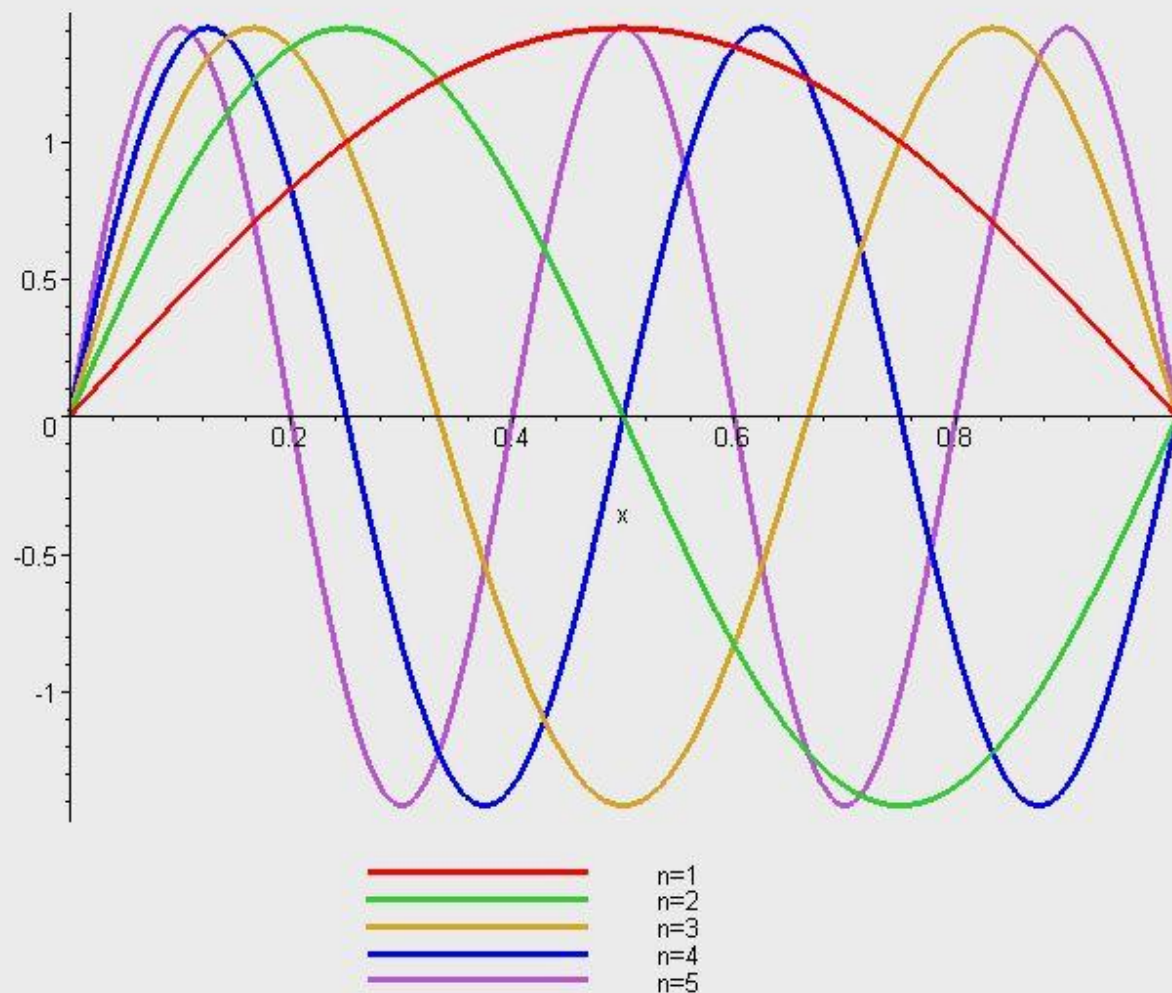
Бесконечно глубокая яма.

Сводка результатов.

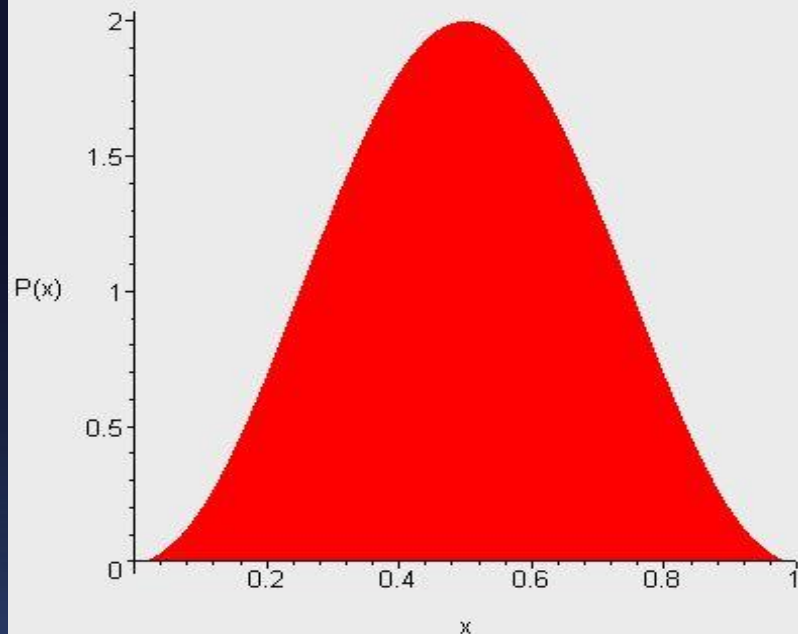
Уровни энергии



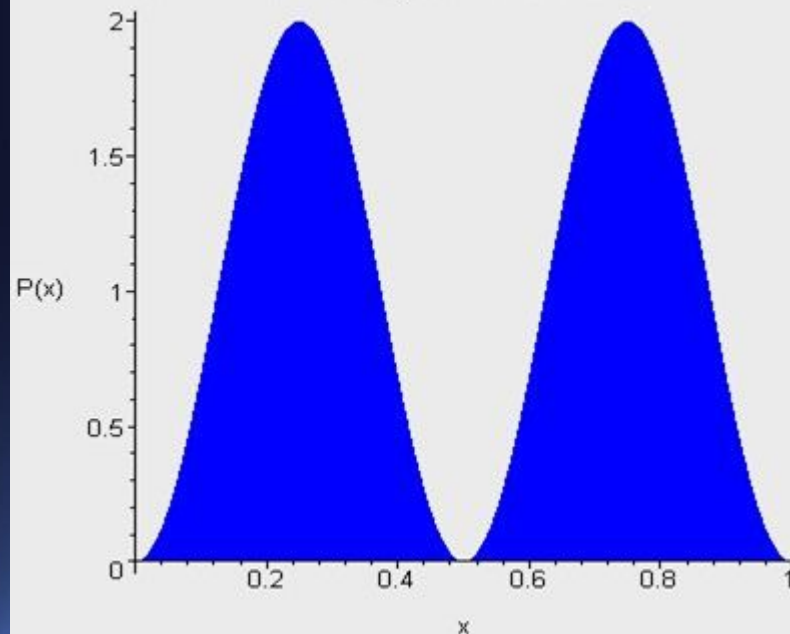
Собственные функции



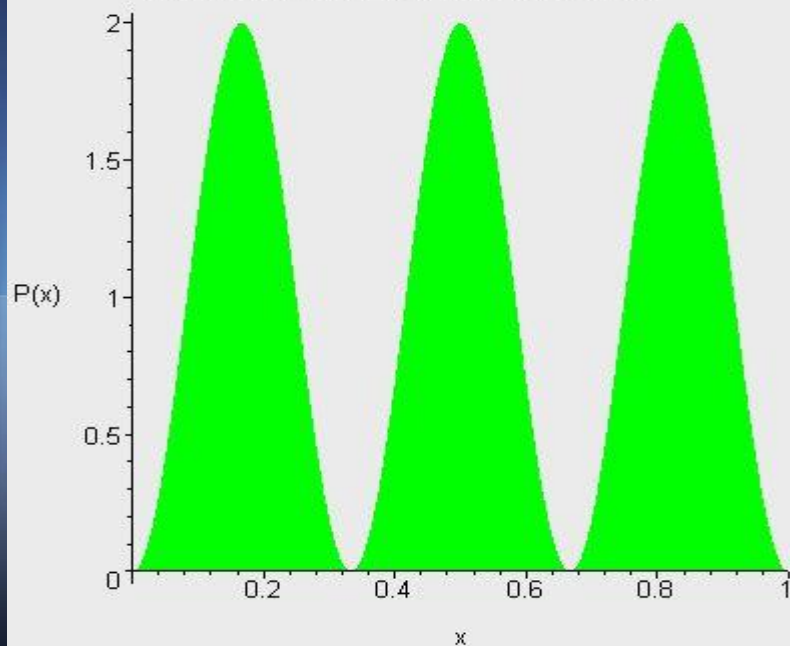
Плотность вероятности $n=1$



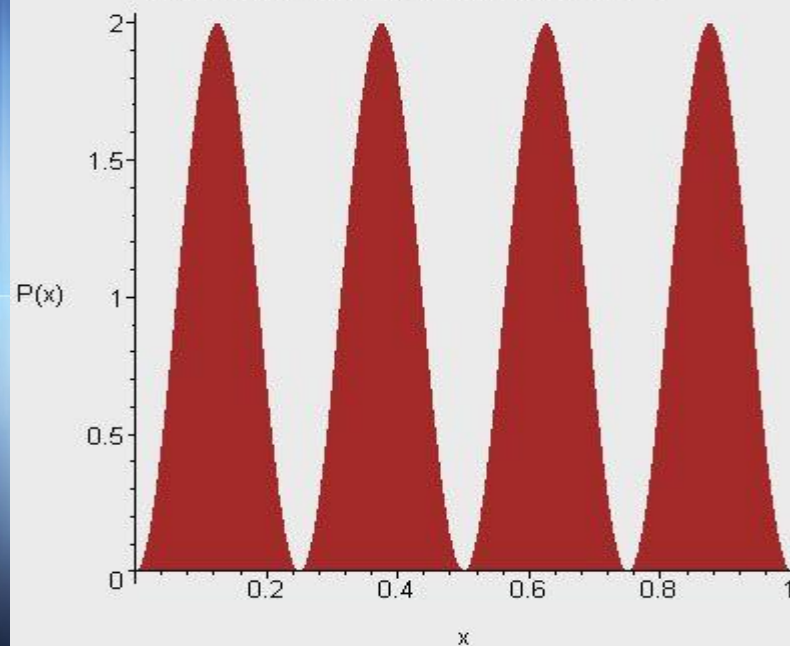
Плотность вероятности $n=2$



Плотность вероятности $n=3$

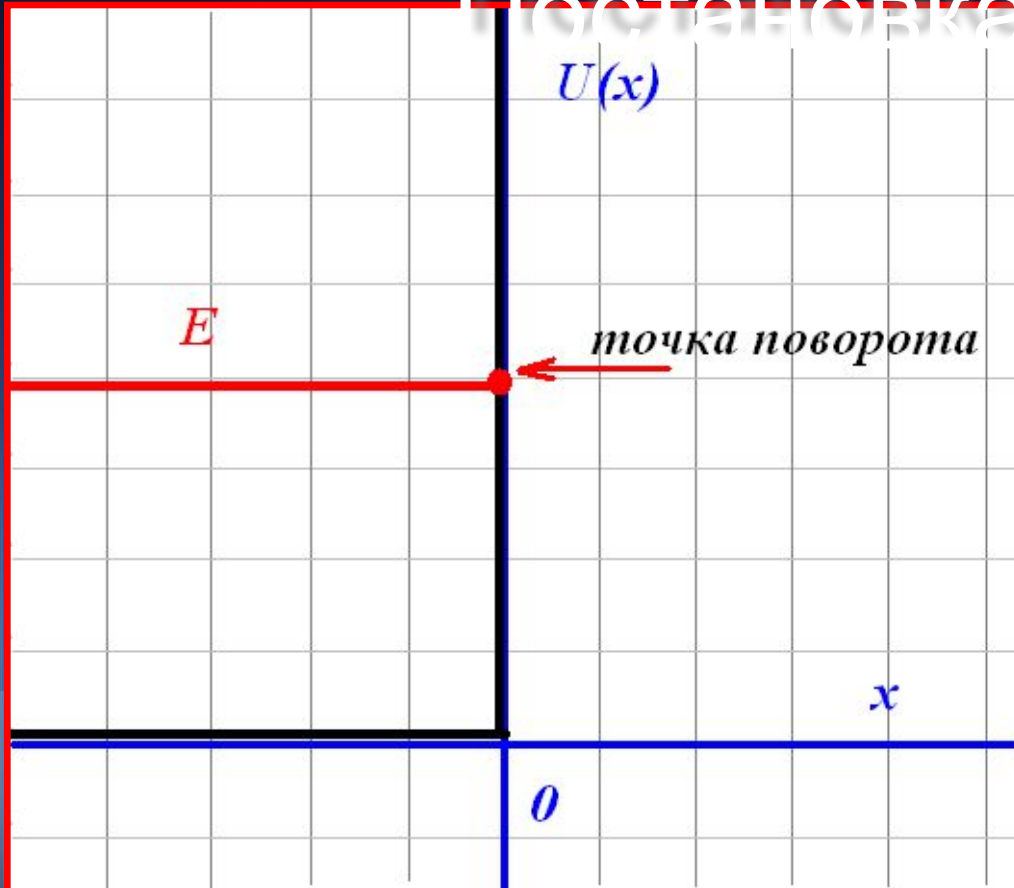


Плотность вероятности $n=4$



Бесконечный энергетический барьер.

Постановка задачи.



$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}$$

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi_E + k^2 \Psi_E = 0$$

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} > 0$$

$$k = \frac{p}{\hbar} > 0$$

$$\Psi(0) = 0,$$

$$\Psi(x) \rightarrow ae^{ikx} + be^{-ikx},$$

$$x \rightarrow -\infty$$

Бесконечный энергетический барьер.

Собственные энергии.

$$\Psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, \quad x < 0$$

$$a = A, b = B, \quad \Psi(0) = A + B = 0$$

k – любое – непрерывный спектр

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

Бесконечный энергетический барьер.

Собственные функции.

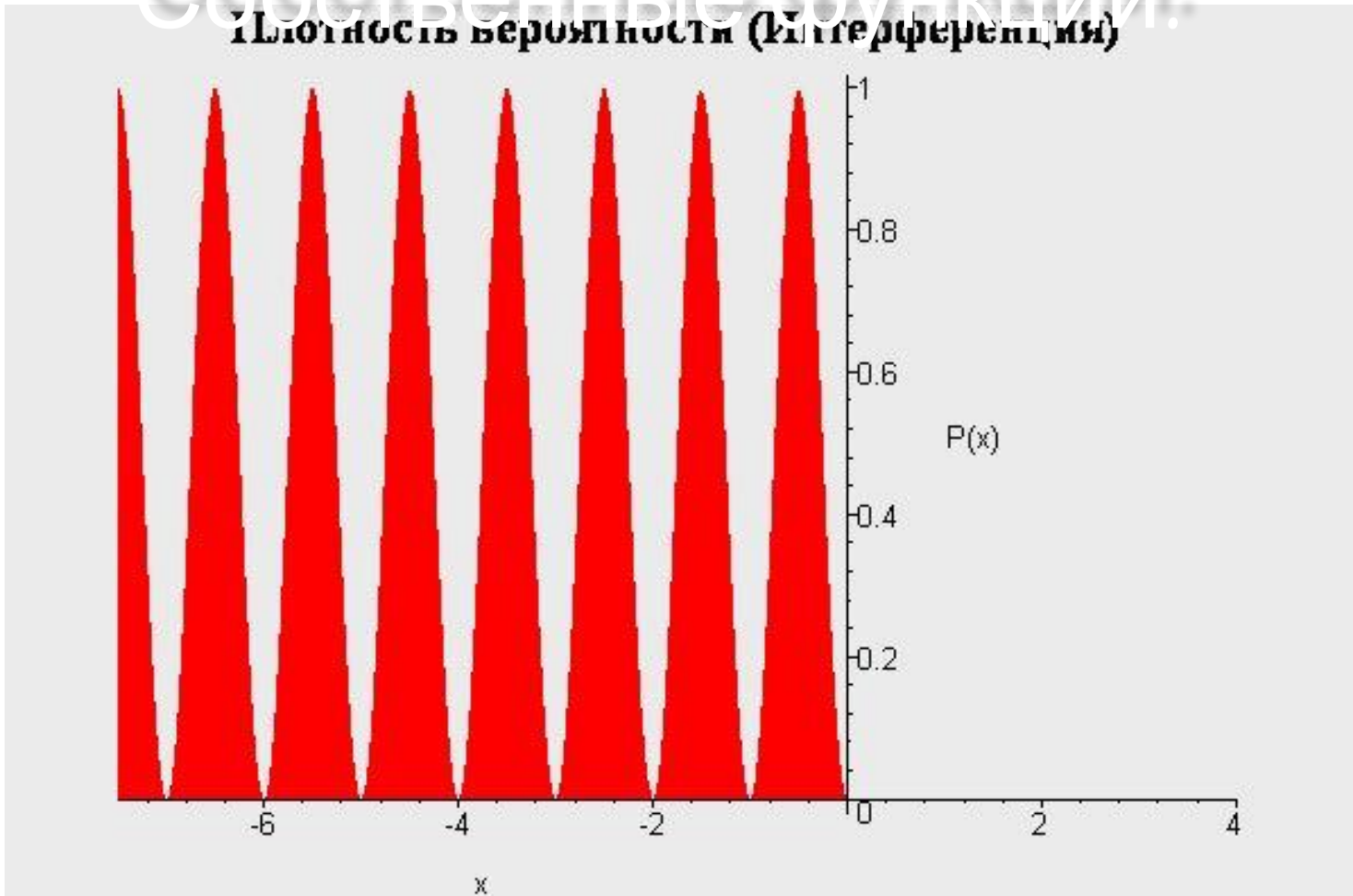
$$\Psi(k, x) = 2iA \sin(kx), \quad x < a$$

$$4 |A|^2 \int_{-\infty}^0 \sin(kx) \sin(k'x) dx = \delta(k - k').$$

Другая
нормировка
 $A = 1$

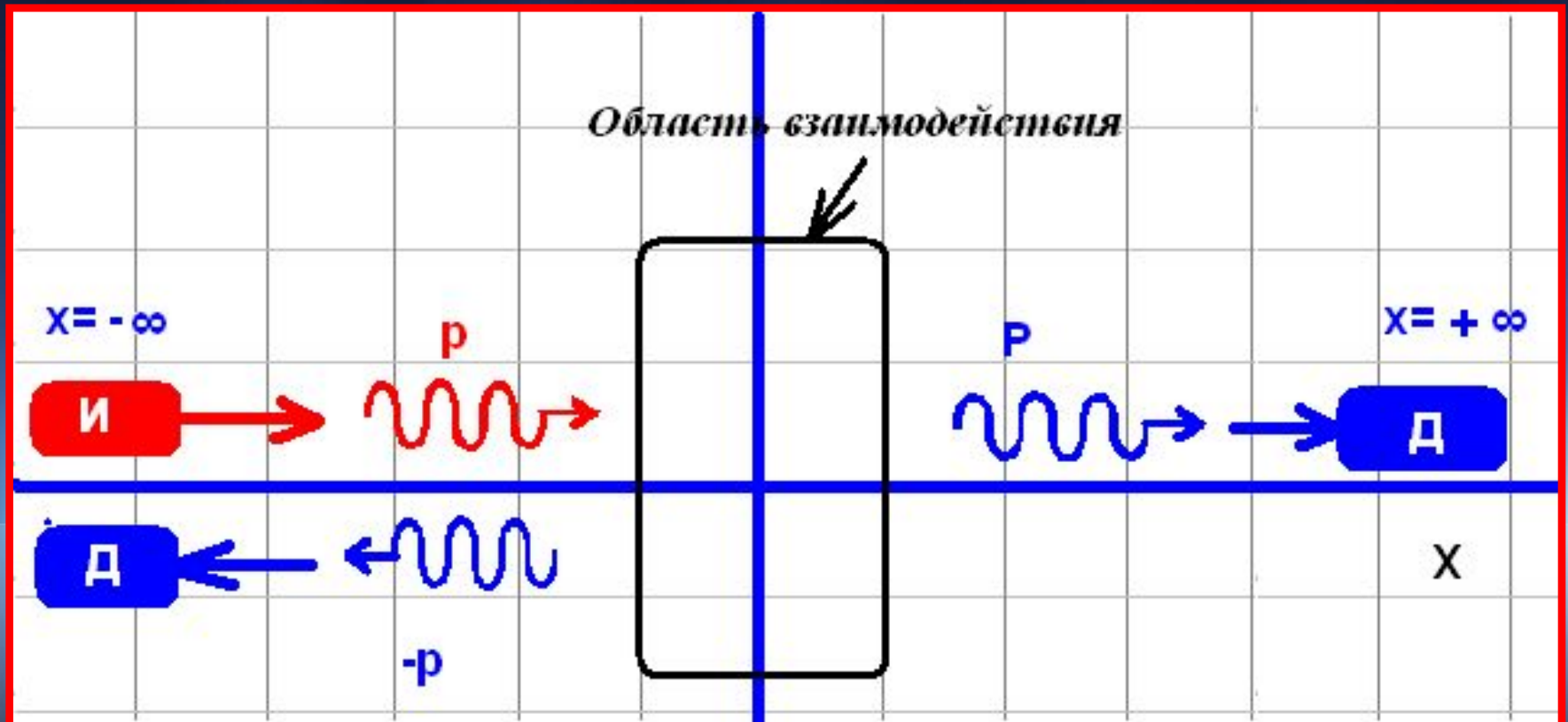
Бесконечный энергетический барьер.

Собственные функции.

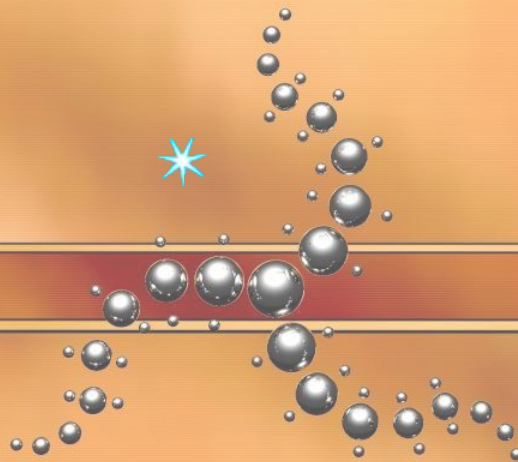


Задача о рассеянии.

Общая постановка задачи.



Повторяем граничные условия



**Условия на границах в зависимости
от типа движения!**

Диаграмма потенциальной энергии.

финитное и инфинитное движения

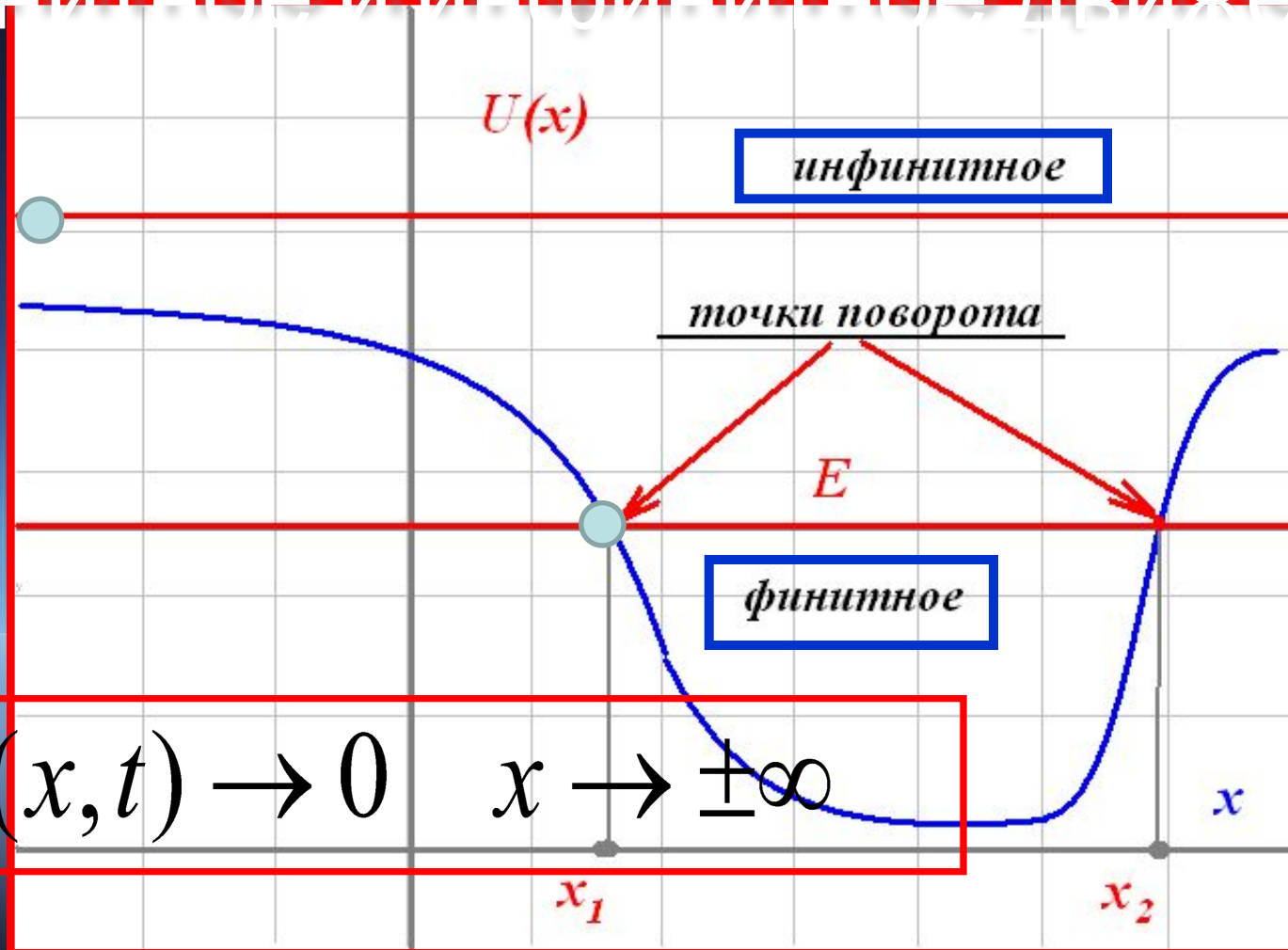
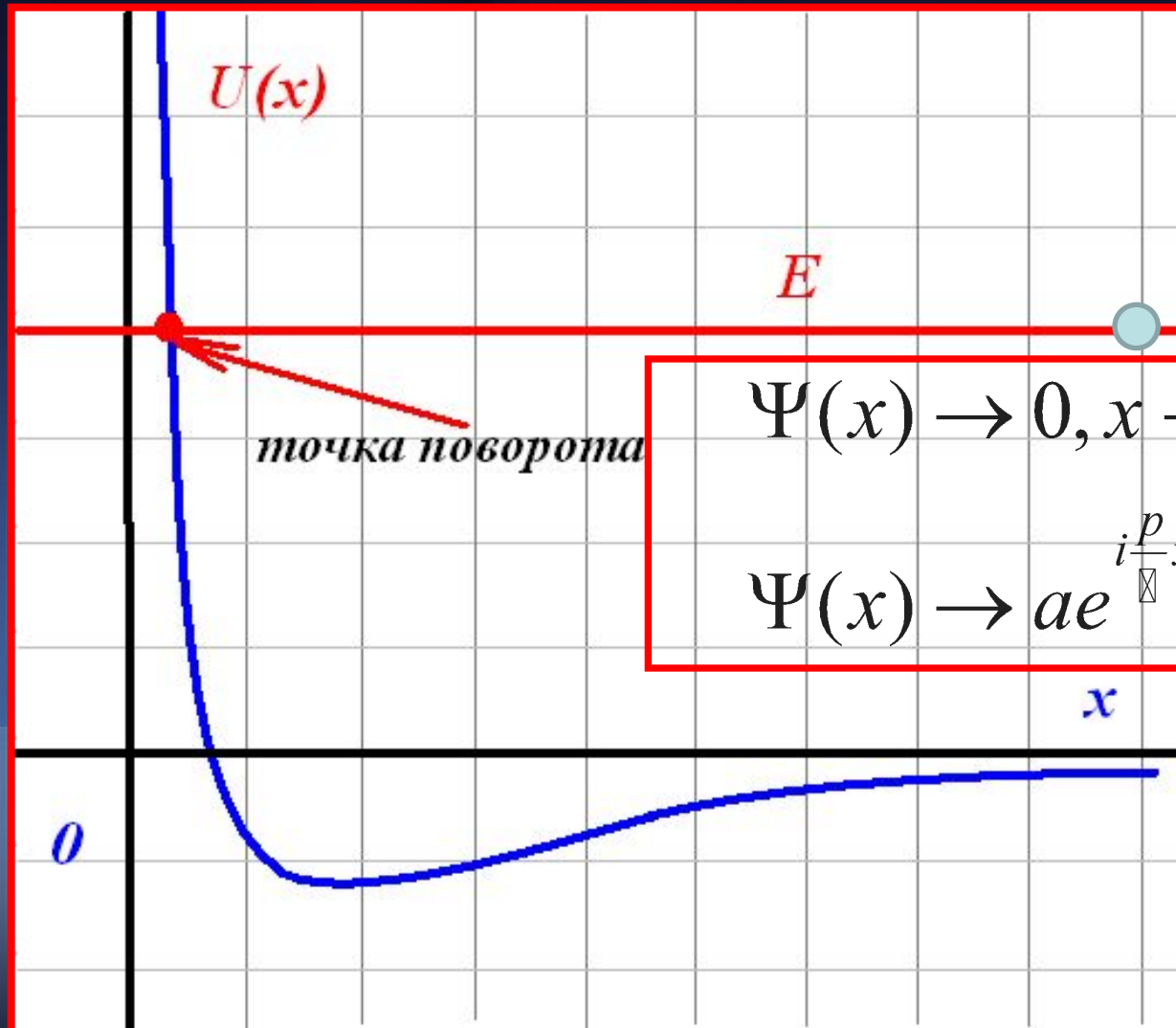


Диаграмма потенциальной энергии. Полуинфинитное движение



$$\Psi(x) \rightarrow 0, x \rightarrow -\infty$$

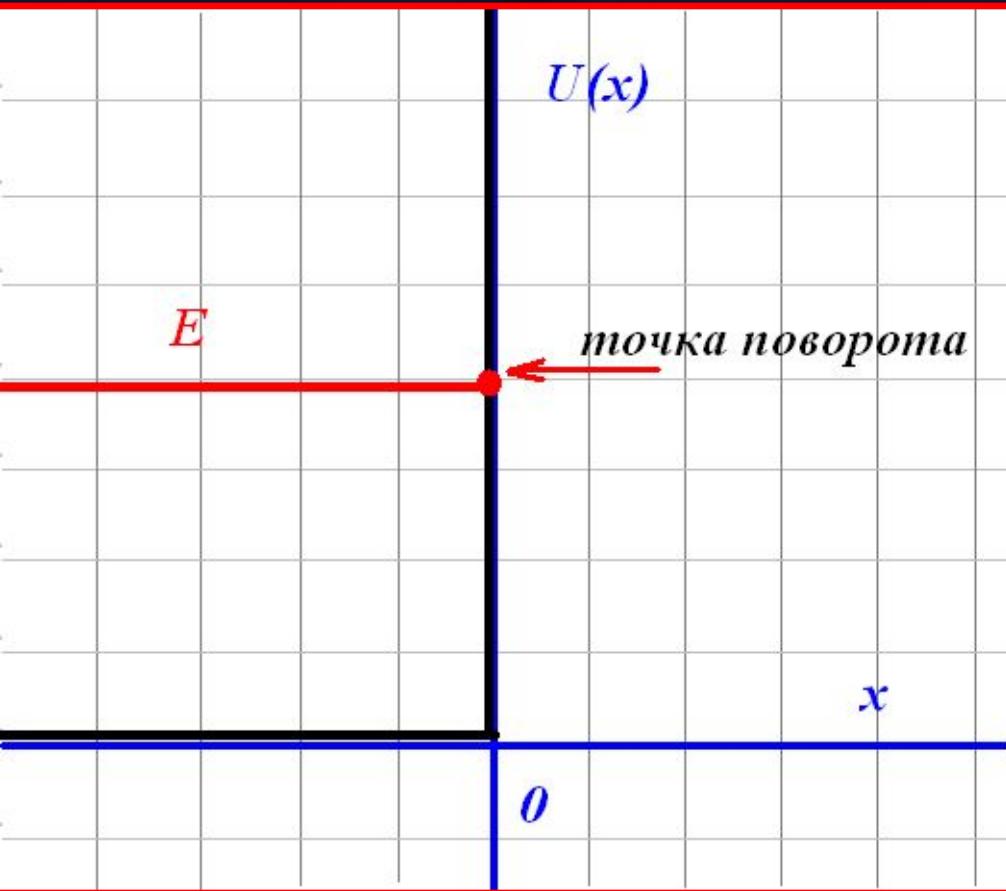
$$\Psi(x) \rightarrow ae^{i\frac{p}{\hbar}x} + be^{-i\frac{p}{\hbar}x}, x \rightarrow \infty$$

IV. Постулат непрерывности

Все состояния квантовой системы описываются всюду непрерывными функциями координат и времени!

$$\Psi(x+0) = \Psi(x-0), \quad \forall x \in [-\infty, \infty]$$

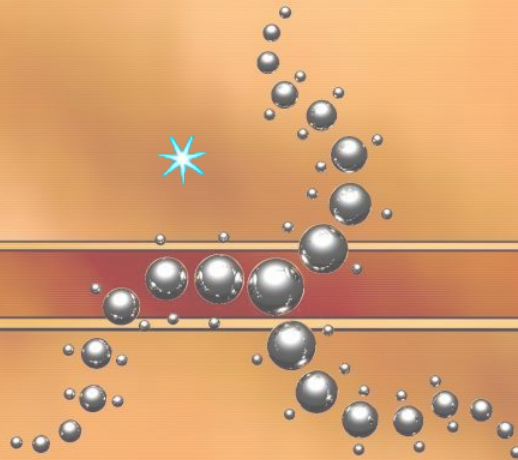
IV. Бесконечный энергетический барьер



$$\Psi(0) = 0$$

Вероятность
частицы
пересечь
бесконечны
й
энергетичес
кий барьер

Гармонический осциллятор



**Как описываются квантовые
колебания?**