

Лекция 3. Элементарный формализм квантовой механики.

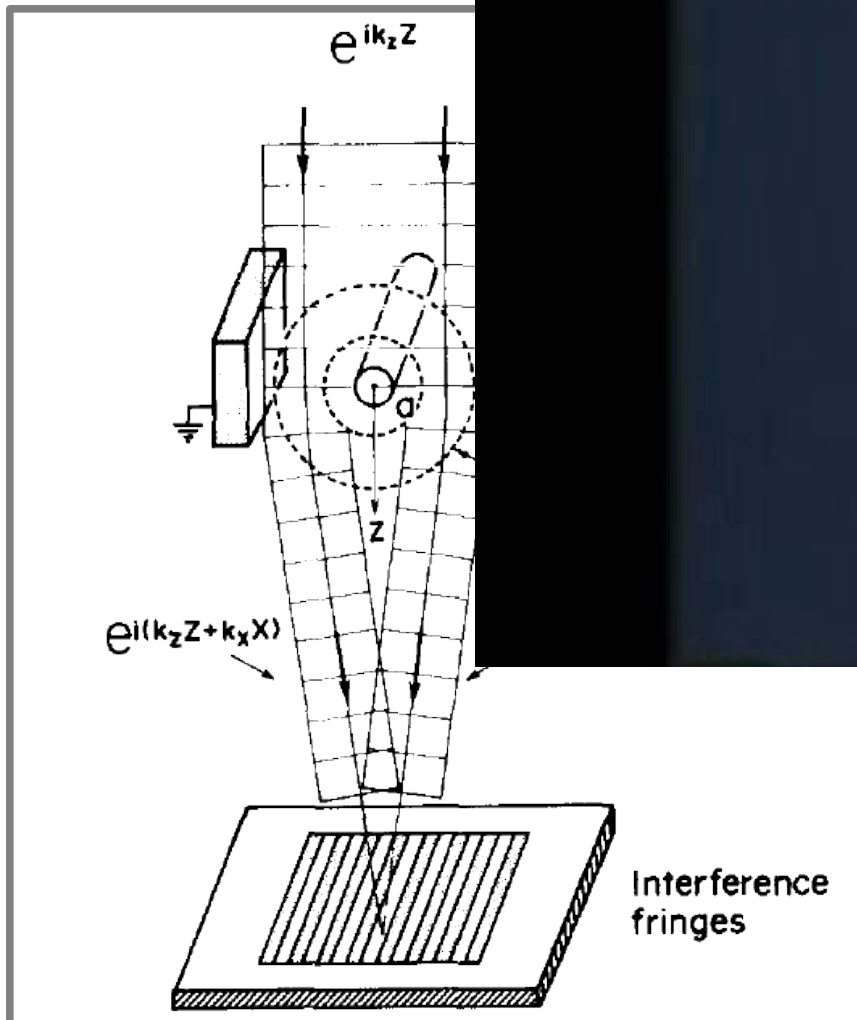
Часть 1. Волновая функция, измерение и операторы физических величин

HITACHI Experiment



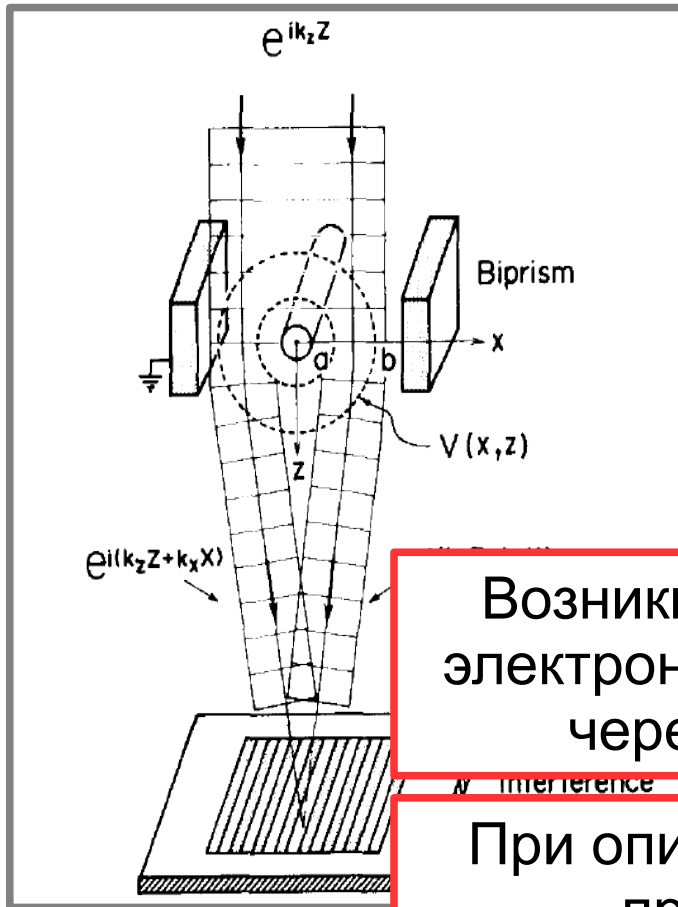
https://www.youtube.com/watch?v=PanqoHa_B6c

Подробности:
<https://www.hitachi.com/rd/research/materials/quantum/doubleslit/index.html>

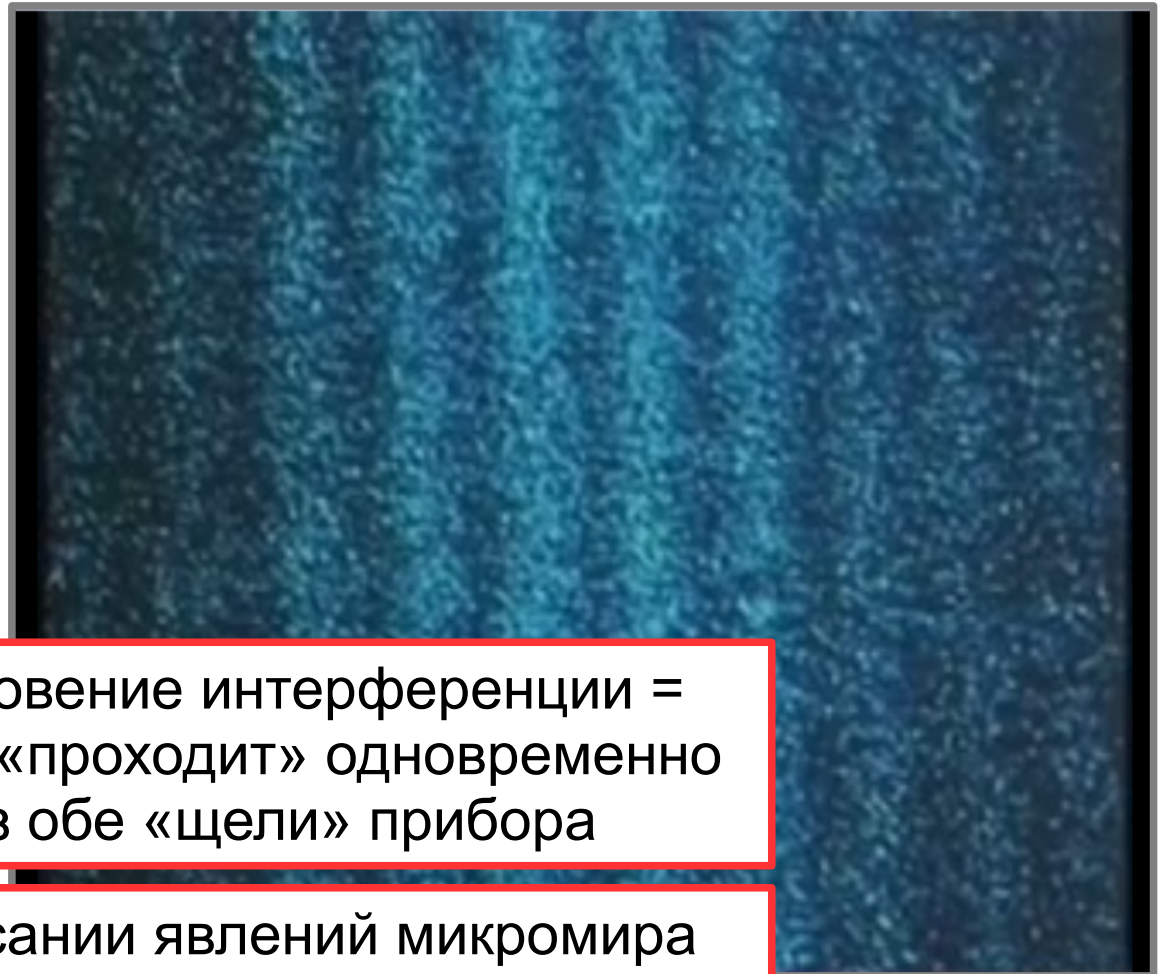


A. Tonomura, J. Endo, T. Matsuda, and T. Kawasaki, Demonstration of single-electron buildup of an interference pattern, American Journal of Physics, 57, 117 (1989)

Математика для описания волновых свойств частиц...



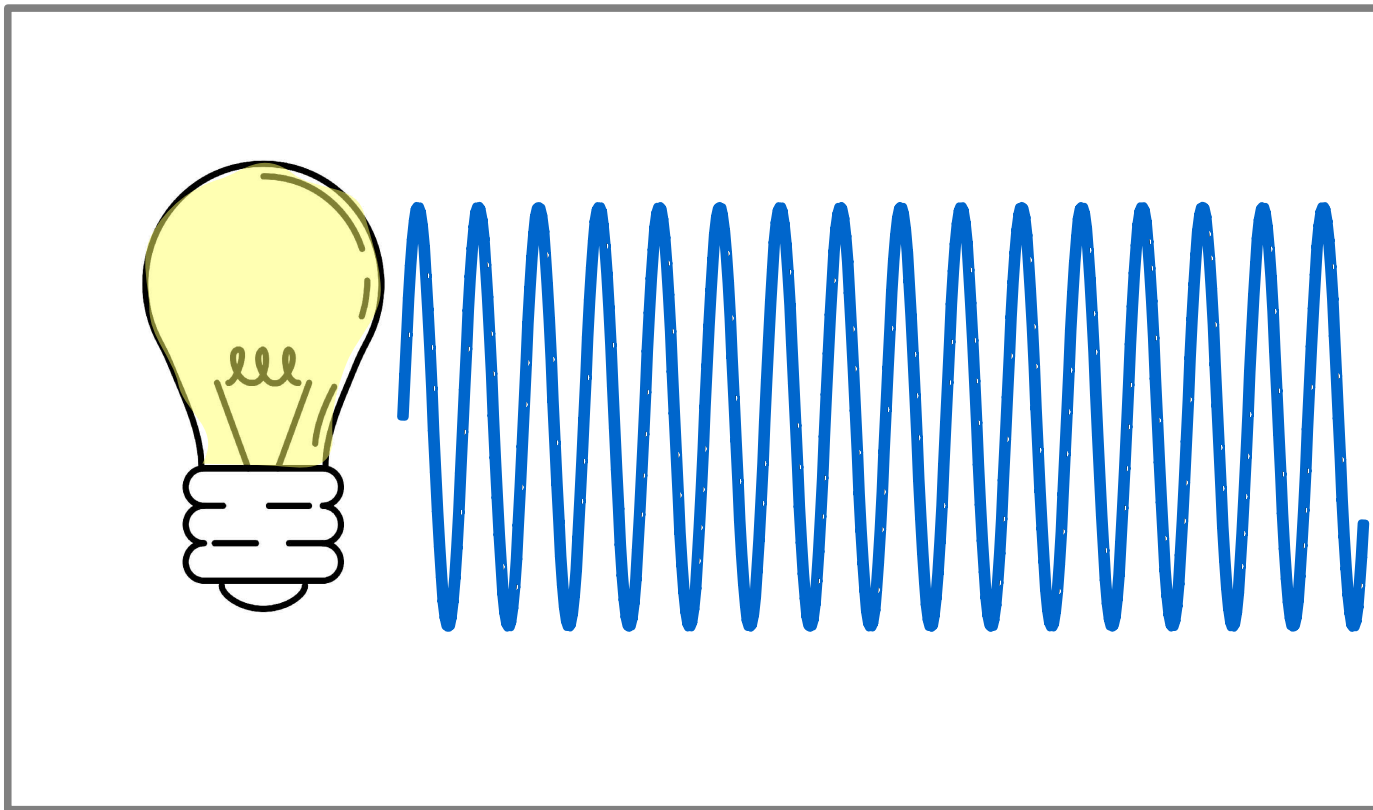
A. Tonomura, J. Endo, T. Matsu
Demonstration of single-electron
pattern, American Journal of Physics



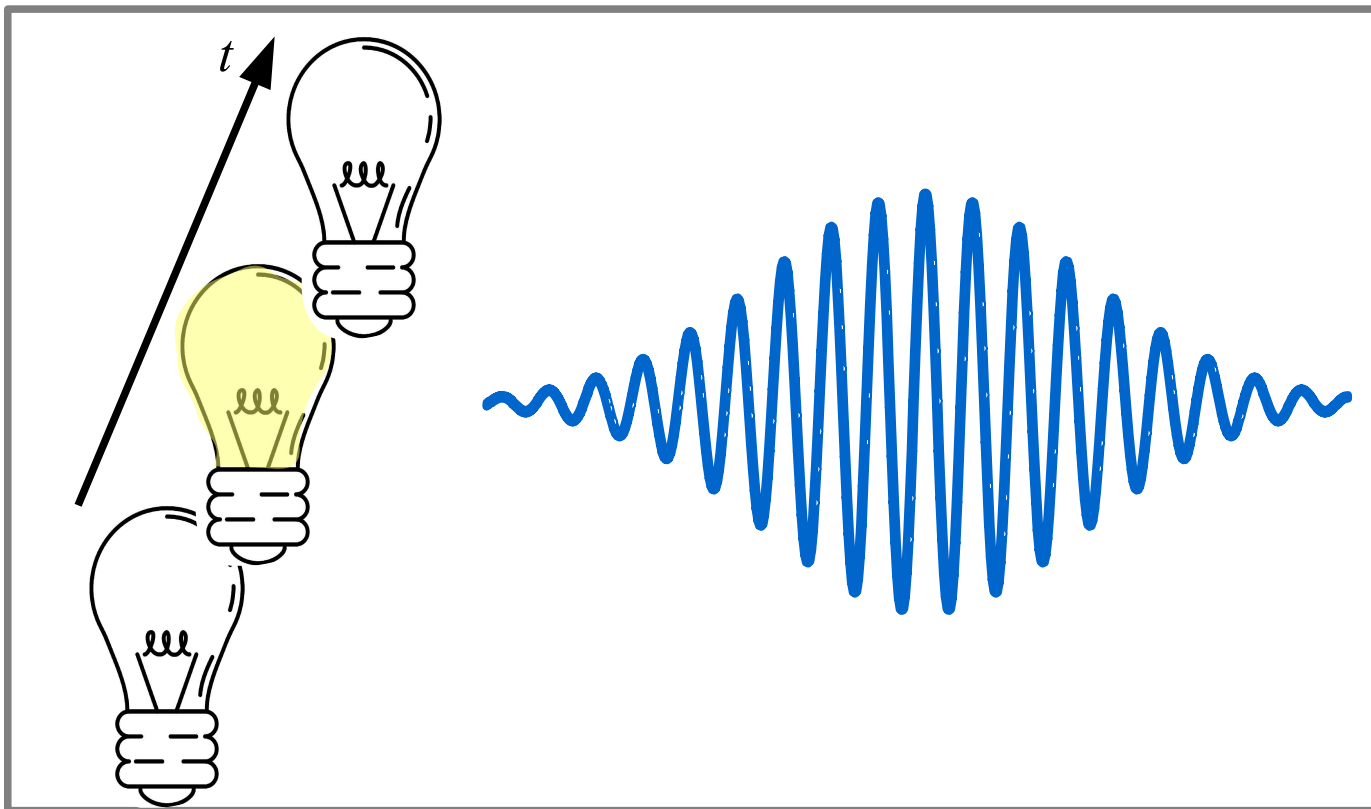
Возникновение интерференции = электрон «проходит» одновременно через обе «щели» прибора

При описании явлений микромира придется отказаться от «классической» траектории частицы...

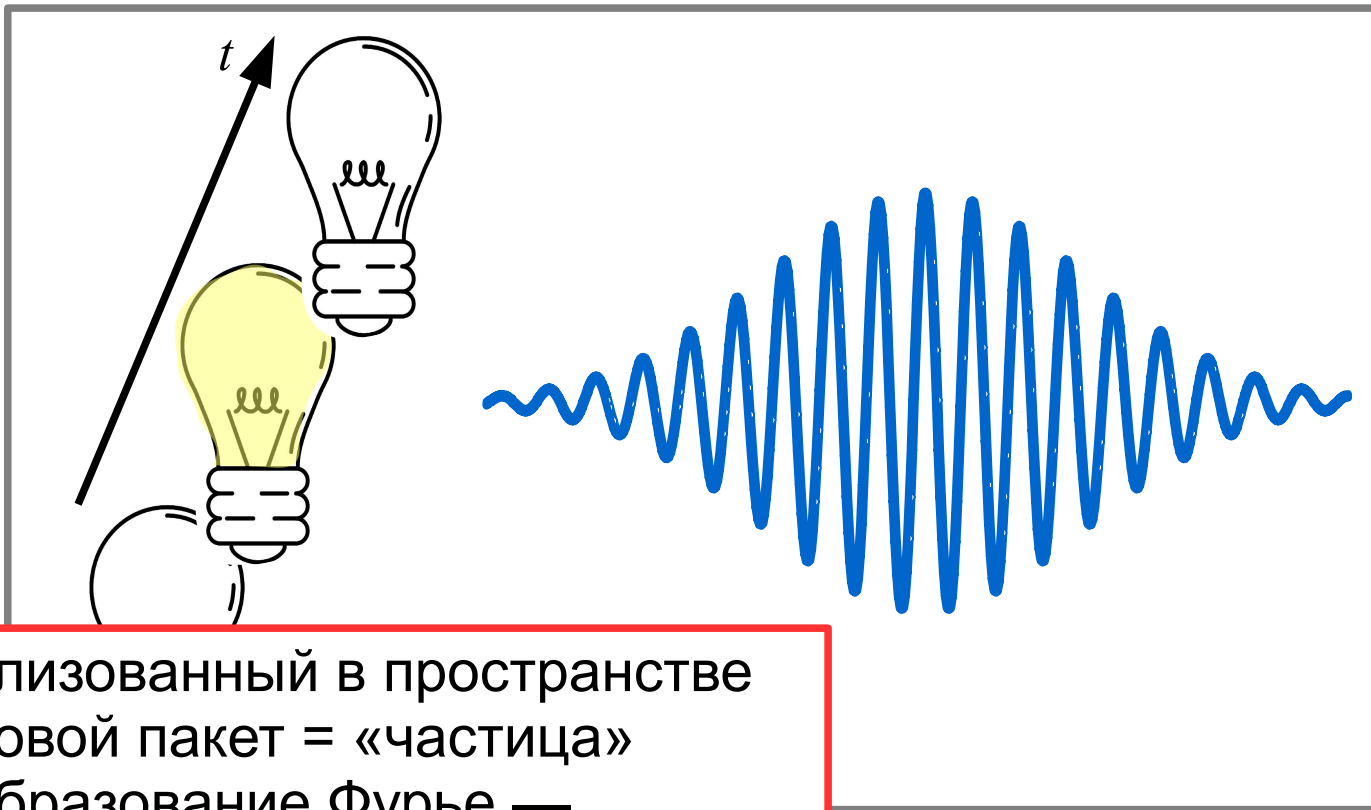
Аналогия с электромагнитными волнами



Аналогия с электромагнитными волнами



Аналогия с электромагнитными волнами



- локализованный в пространстве волновой пакет = «частица»
- преобразование Фурье — разложение по плоским волнам
- полная энергия волны

$$\propto \int |\vec{E}|^2 dV$$

$$\Psi(x)$$

$$w(a < x < b) = \int_a^b \Psi^* \Psi dx$$

Волновая функция

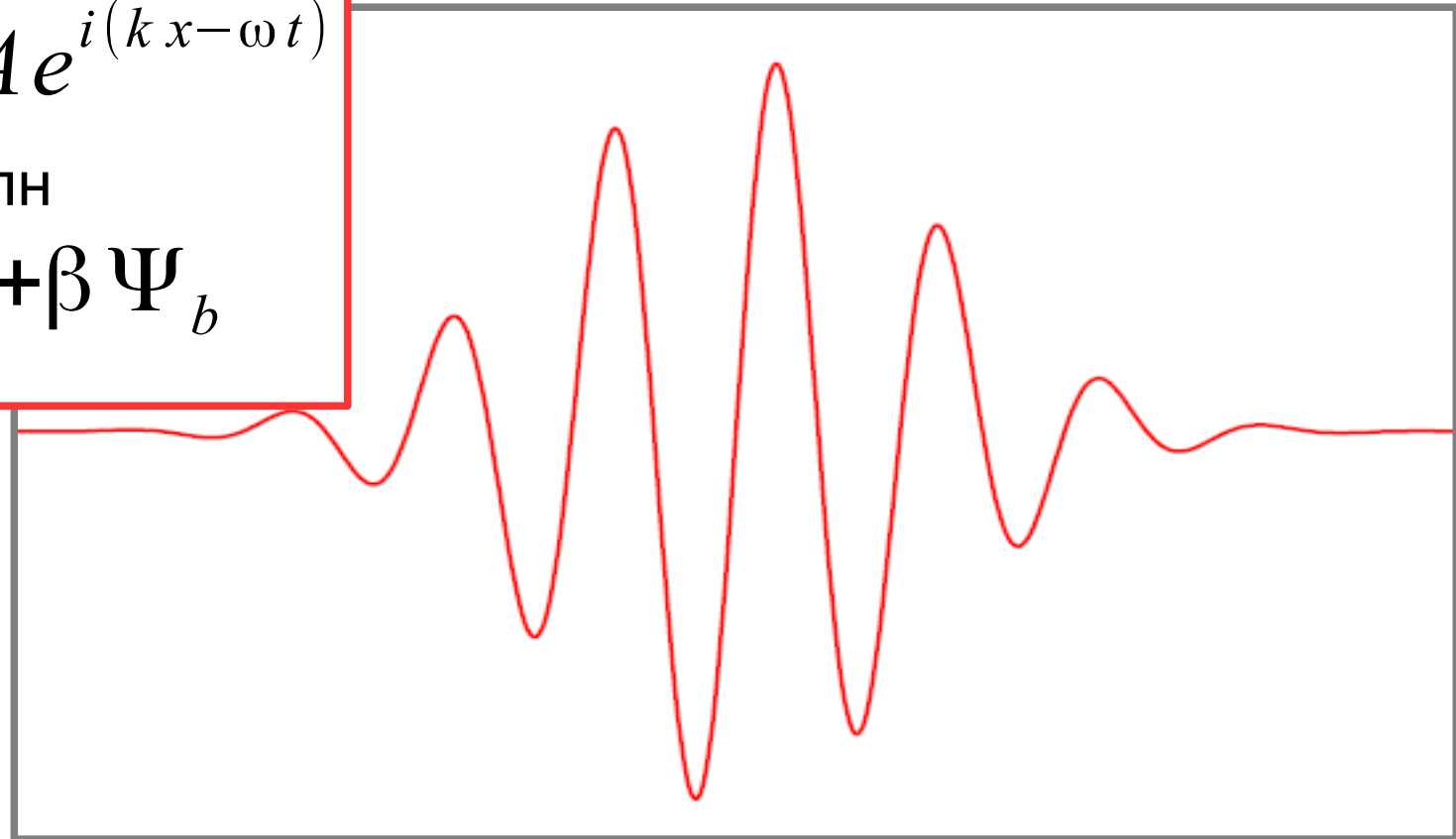
Из дифракции
(интерференции) частиц:

- св. частица

$$\Psi(x, t) = A e^{i(kx - \omega t)}$$

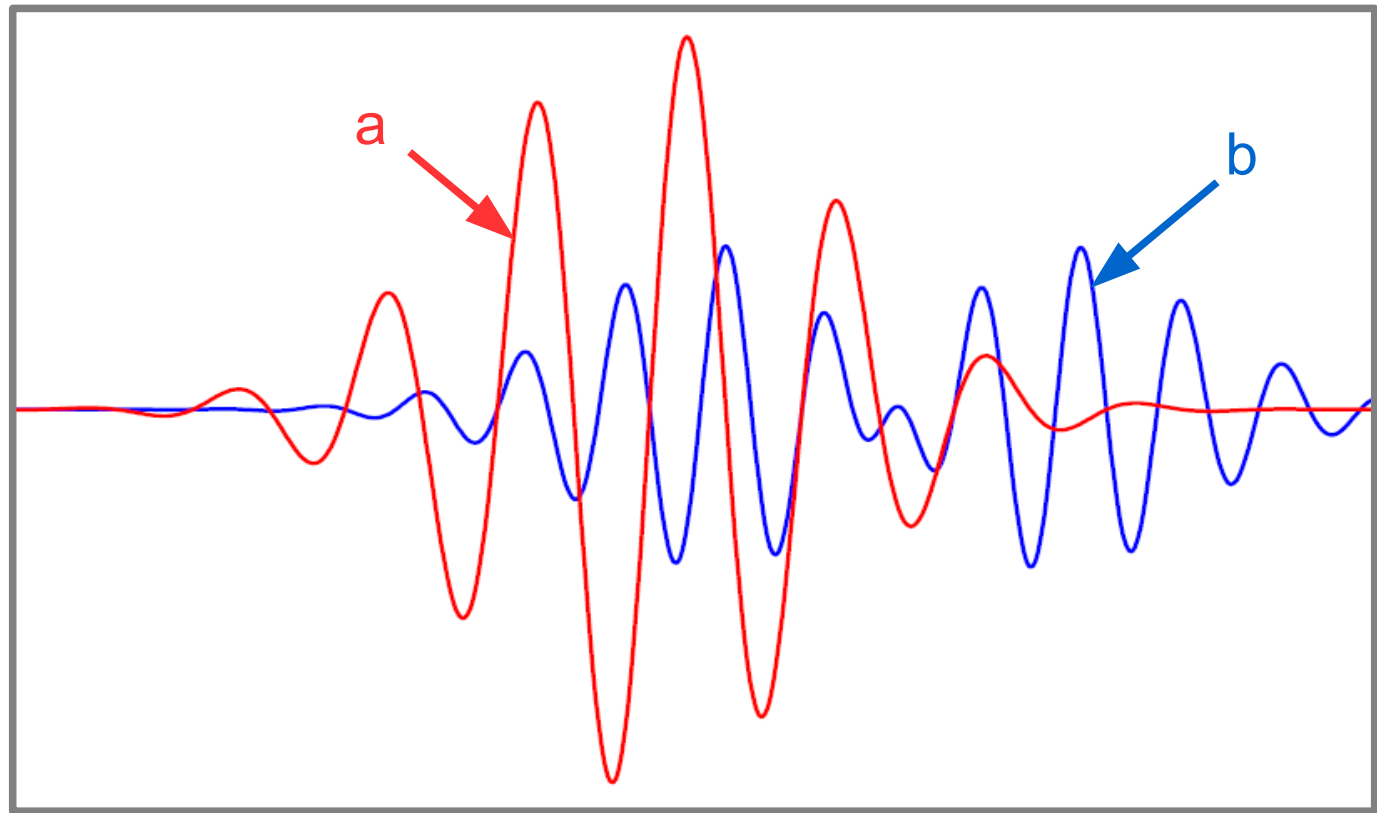
- сложение волн

$$\Psi = \alpha \Psi_a + \beta \Psi_b$$



Суперпозиция состояний и вероятности

$$\Psi = \alpha \Psi_a + \beta \Psi_b$$



Суперпозиция состояний и вероятности

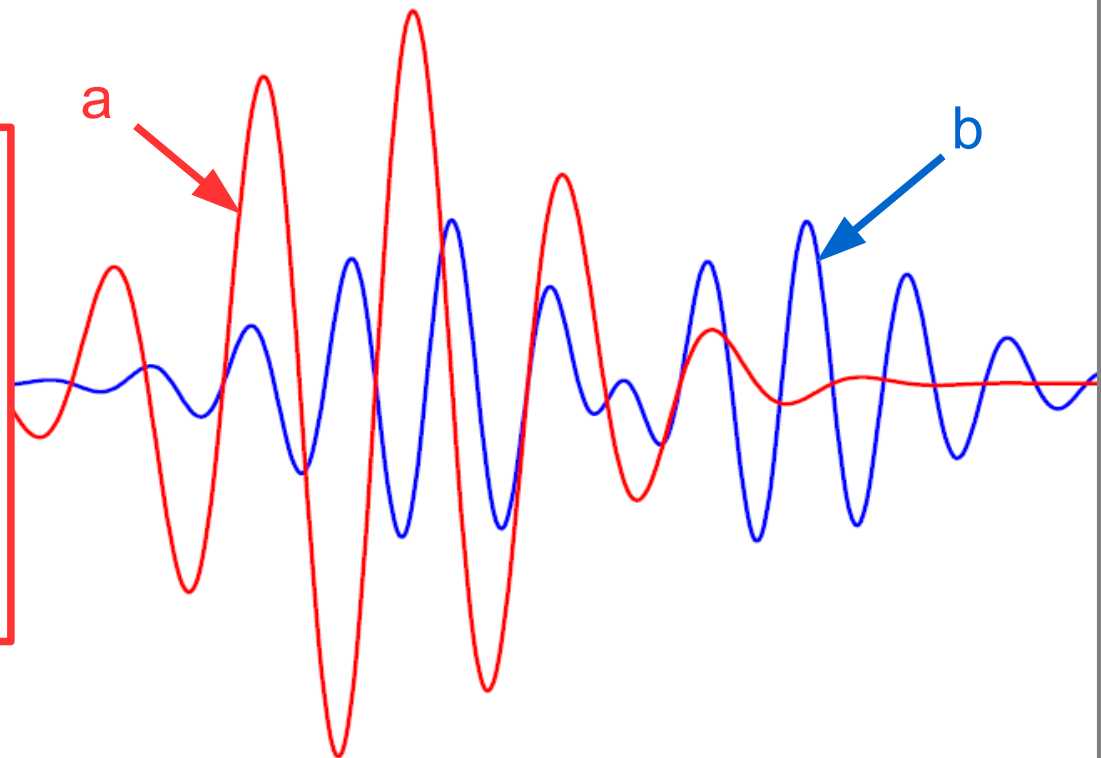
$$\Psi = \alpha \Psi_a + \beta \Psi_b$$

Если $\int_{-\infty}^{\infty} \Psi_a^* \Psi_b dx = 0$

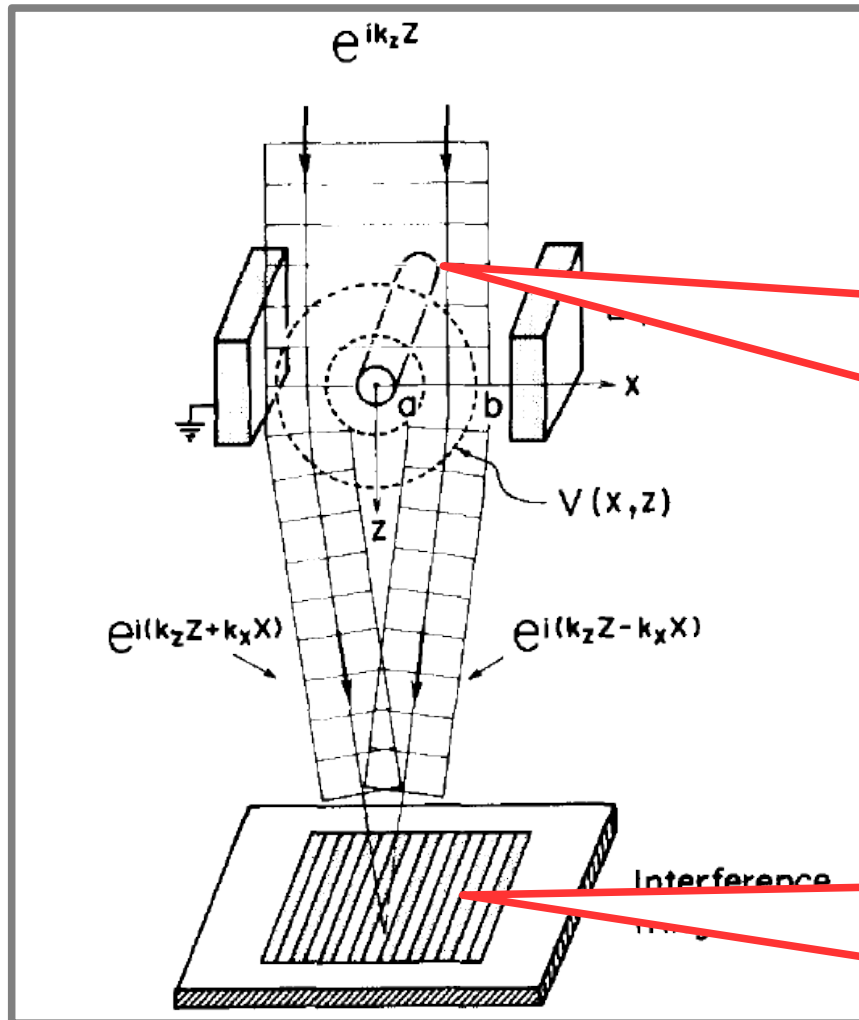
Вероятности состояний

$$w_a = \alpha^* \alpha$$

$$w_b = \beta^* \beta$$



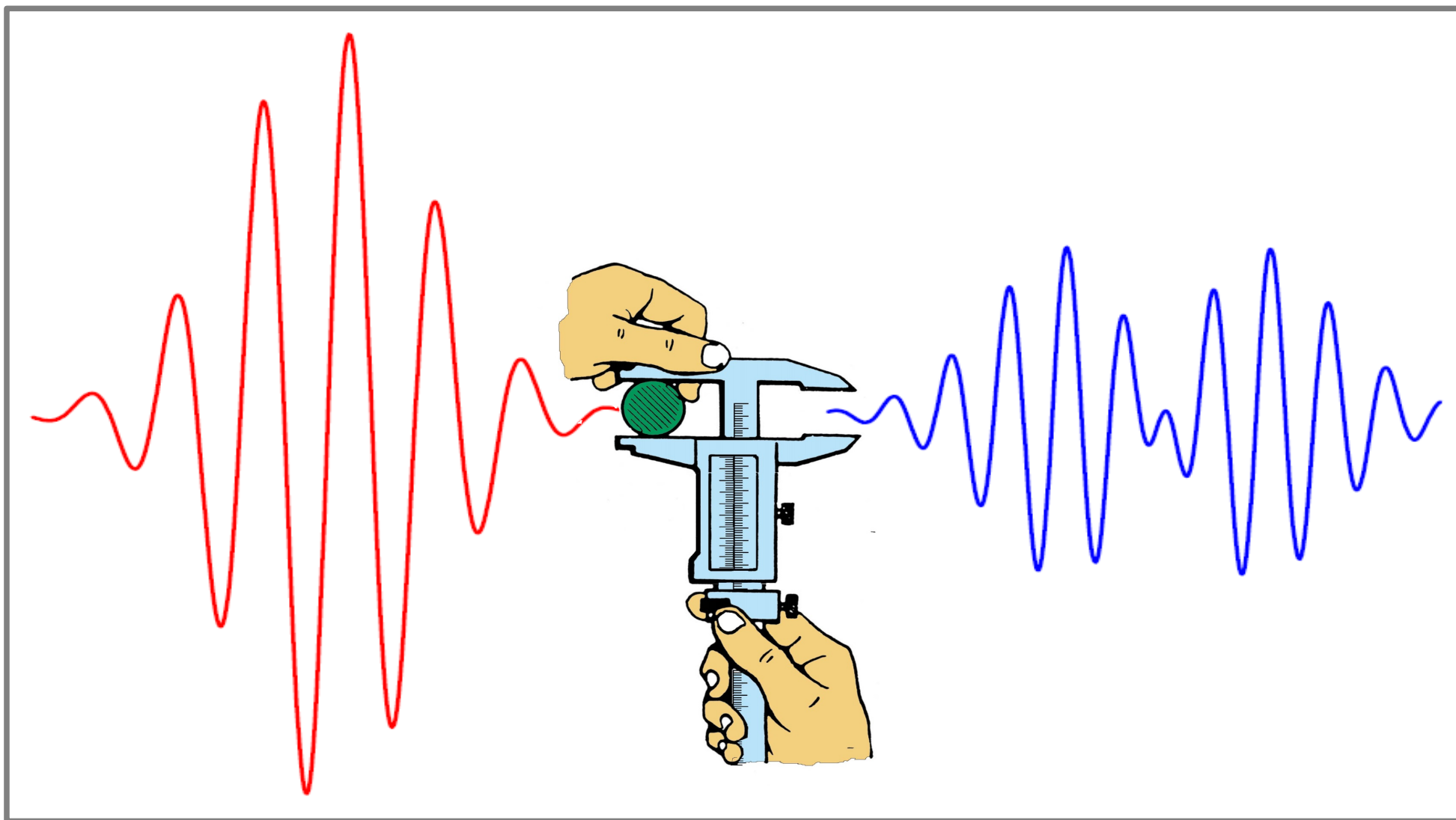
Редукция волновой функции при измерении



При распространении
электрона он
описывается волновой
функцией
«размазанной» по
пространству

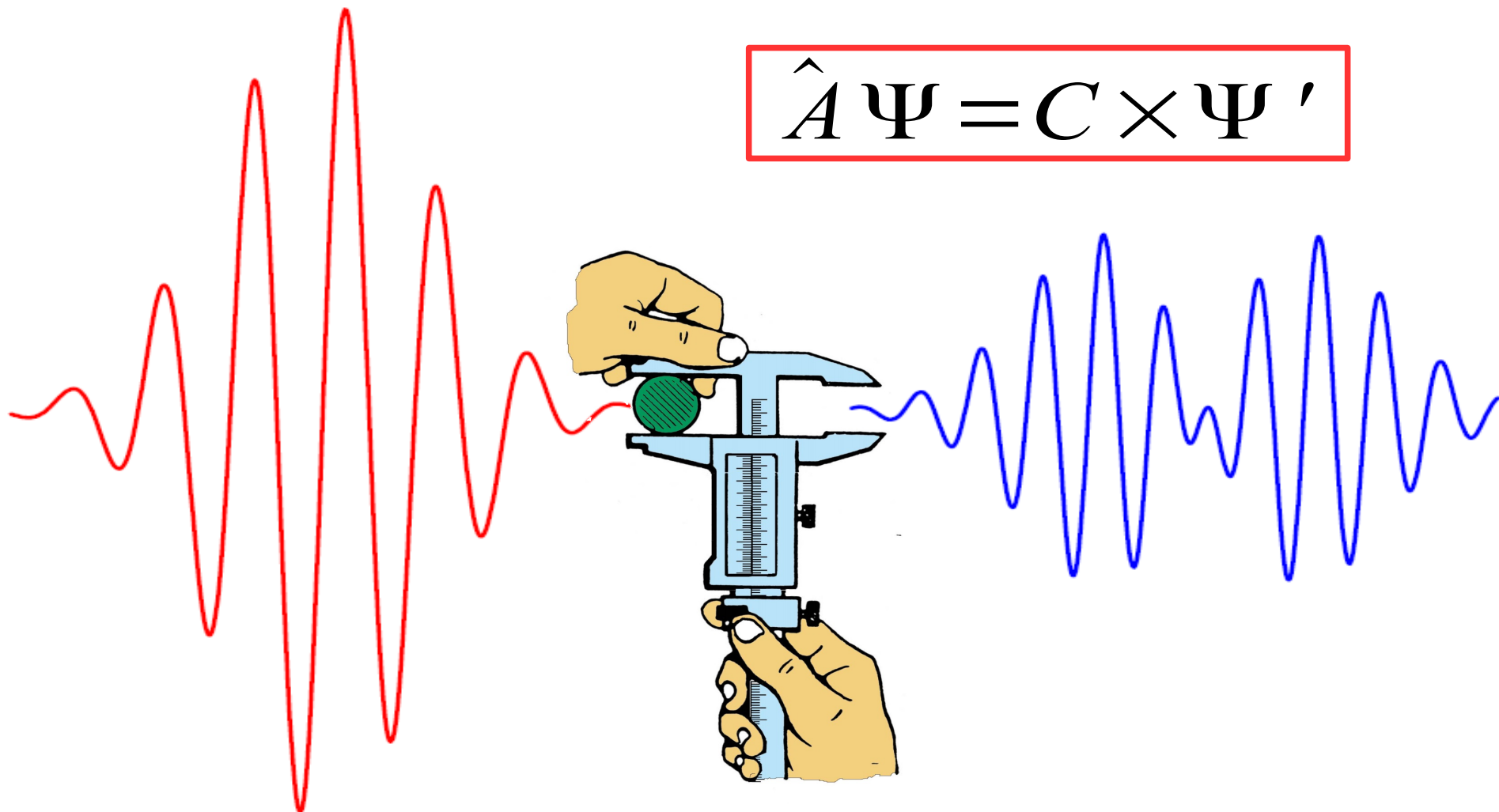
При измерении
возникает
один конкретный
из множества
ВОЗМОЖНЫХ ОТВЕТОВ

Операторы физических величин



Операторы физических величин

$$\hat{A} \Psi = C \times \Psi'$$

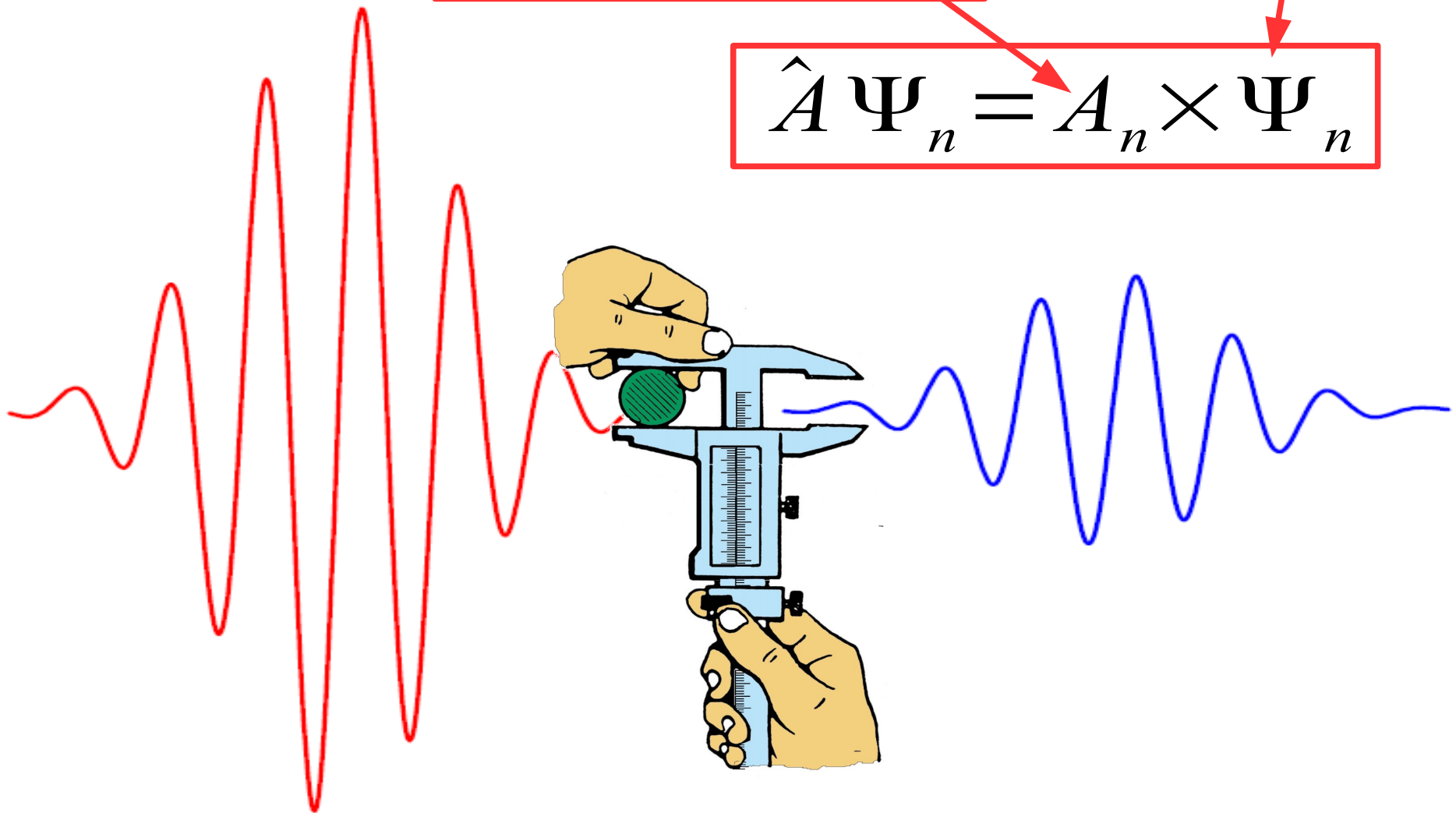


Операторы физически:

Собственное
значение

Собственная
функция оператора

$$\hat{A} \Psi_n = A_n \times \Psi_n$$

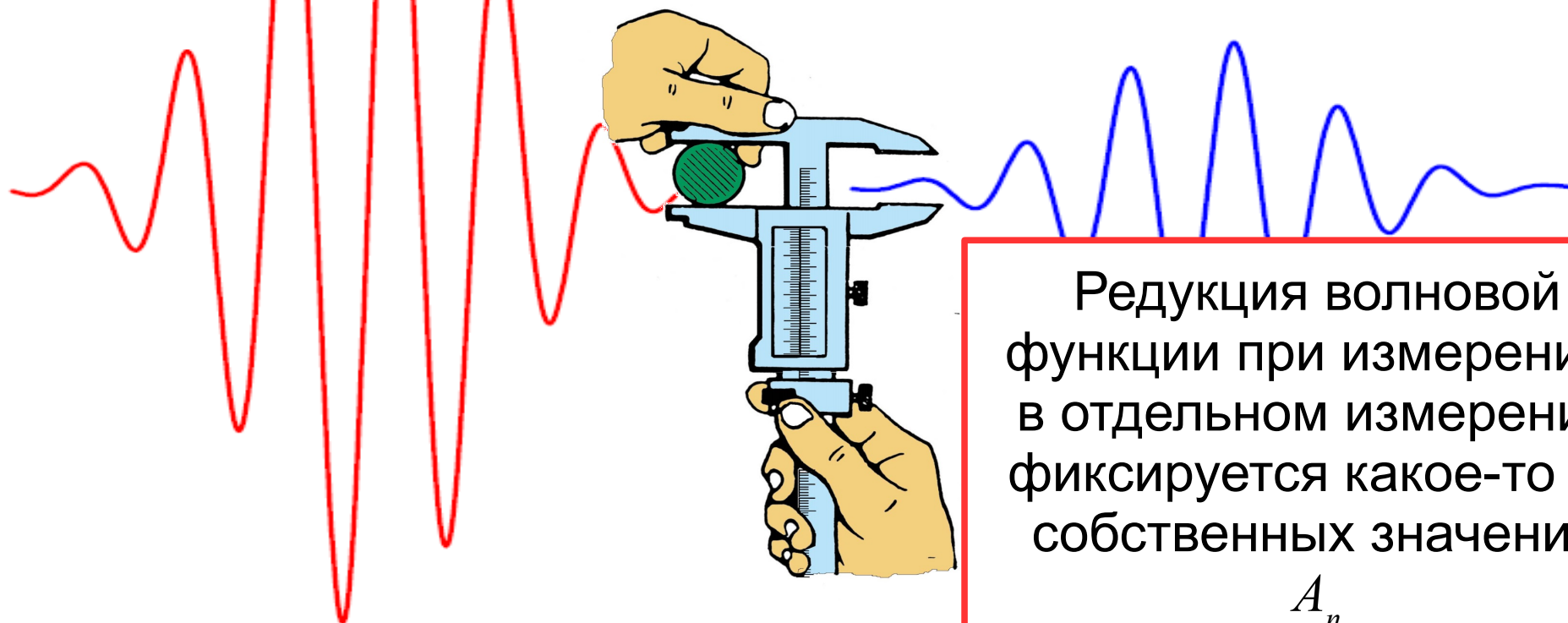


Операторы физически:

Собственное
значение

Собственная
функция оператора

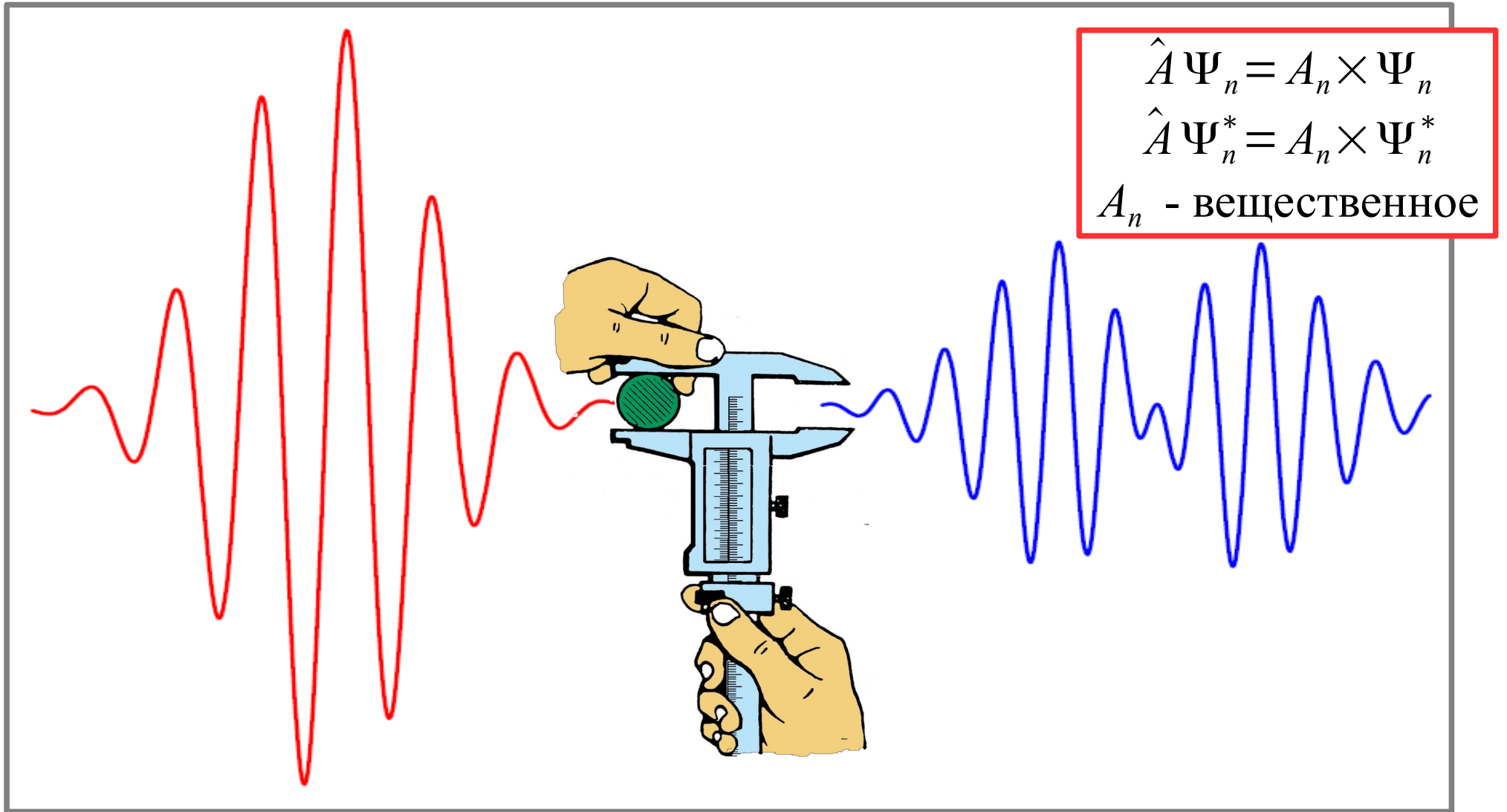
$$\hat{A} \Psi_n = A_n \times \Psi_n$$



Редукция волновой
функции при измерении:
в отдельном измерении
фиксируется какое-то из
собственных значений

A_n

Эрмитовость операторов физических величин



Эрмитовость операторов физических величин

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Phi^* (\hat{A} \xi) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} (\hat{A} \Phi^*) \xi dx$$

$$\hat{A} \Psi_n = A_n \times \Psi_n$$

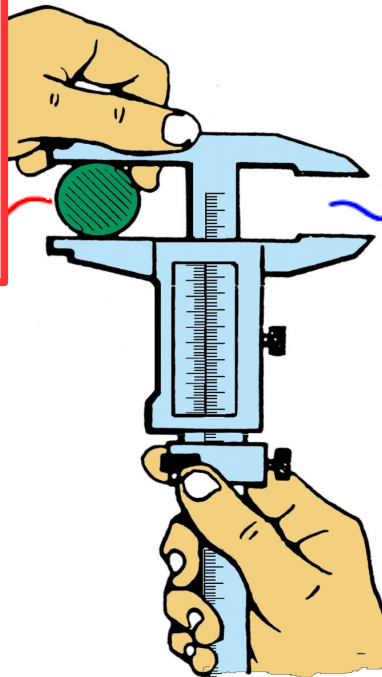
$$\hat{A} \Psi_m = A_m \times \Psi_m$$

$$A_n \neq A_m$$

$$\hat{A} \Psi_n = A_n \times \Psi_n$$

$$\hat{A} \Psi_n^* = A_n \times \Psi_n^*$$

A_n - вещественное



Эрмитовость операторов физических величин

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Phi^* (\hat{A} \xi) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} (\hat{A} \Phi^*) \xi dx$$

$$\hat{A} \Psi_n = A_n \times \Psi_n$$

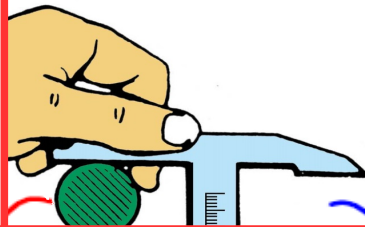
$$\hat{A} \Psi_m = A_m \times \Psi_m$$

$$A_n \neq A_m$$

$$\hat{A} \Psi_n = A_n \times \Psi_n$$

$$\hat{A} \Psi_n^* = A_n \times \Psi_n^*$$

A_n - вещественное



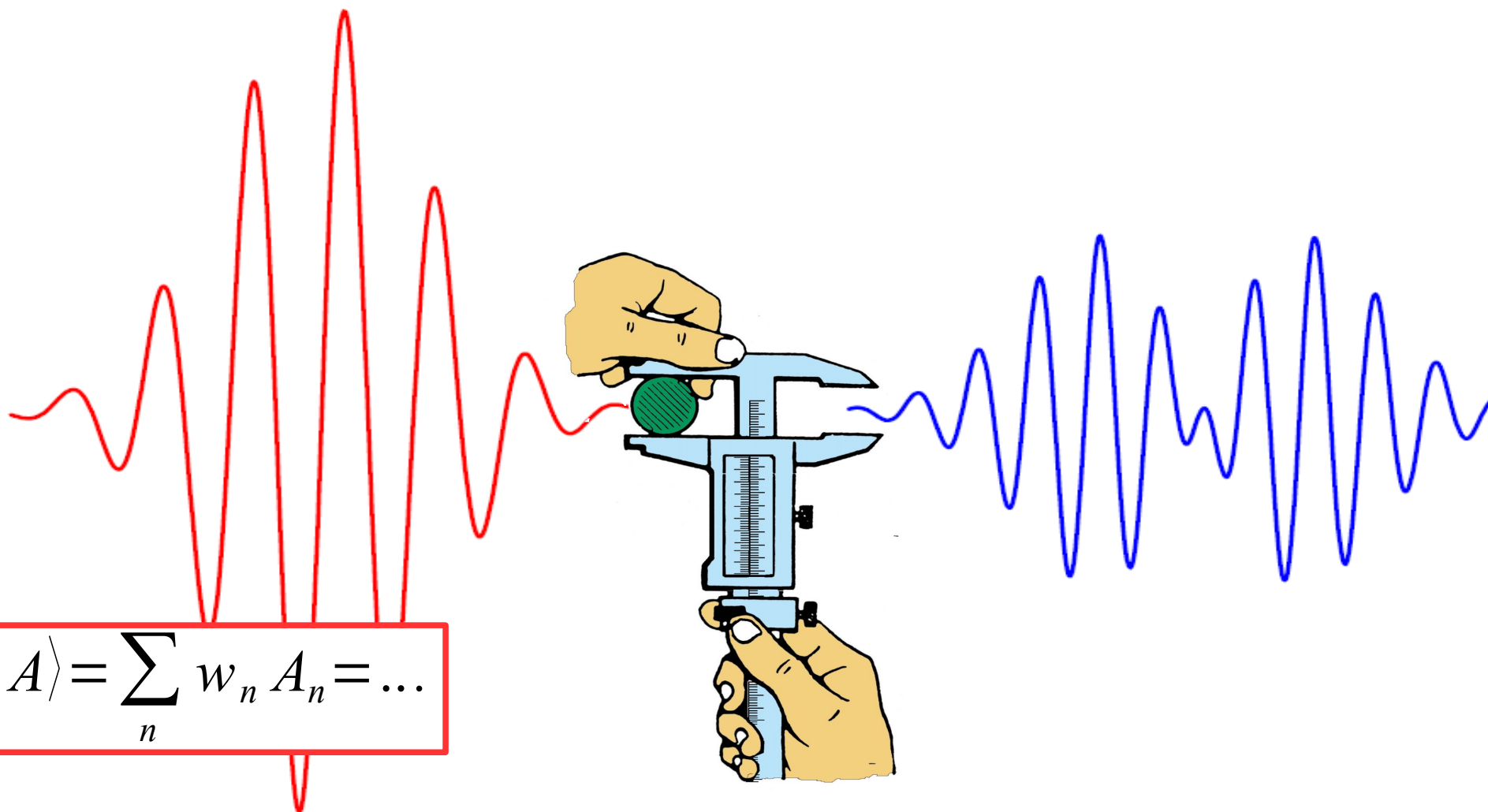
Эрмитовость:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_m^* \hat{A} \Psi_n dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \hat{A} \Psi_m^* \Psi_n dx$$

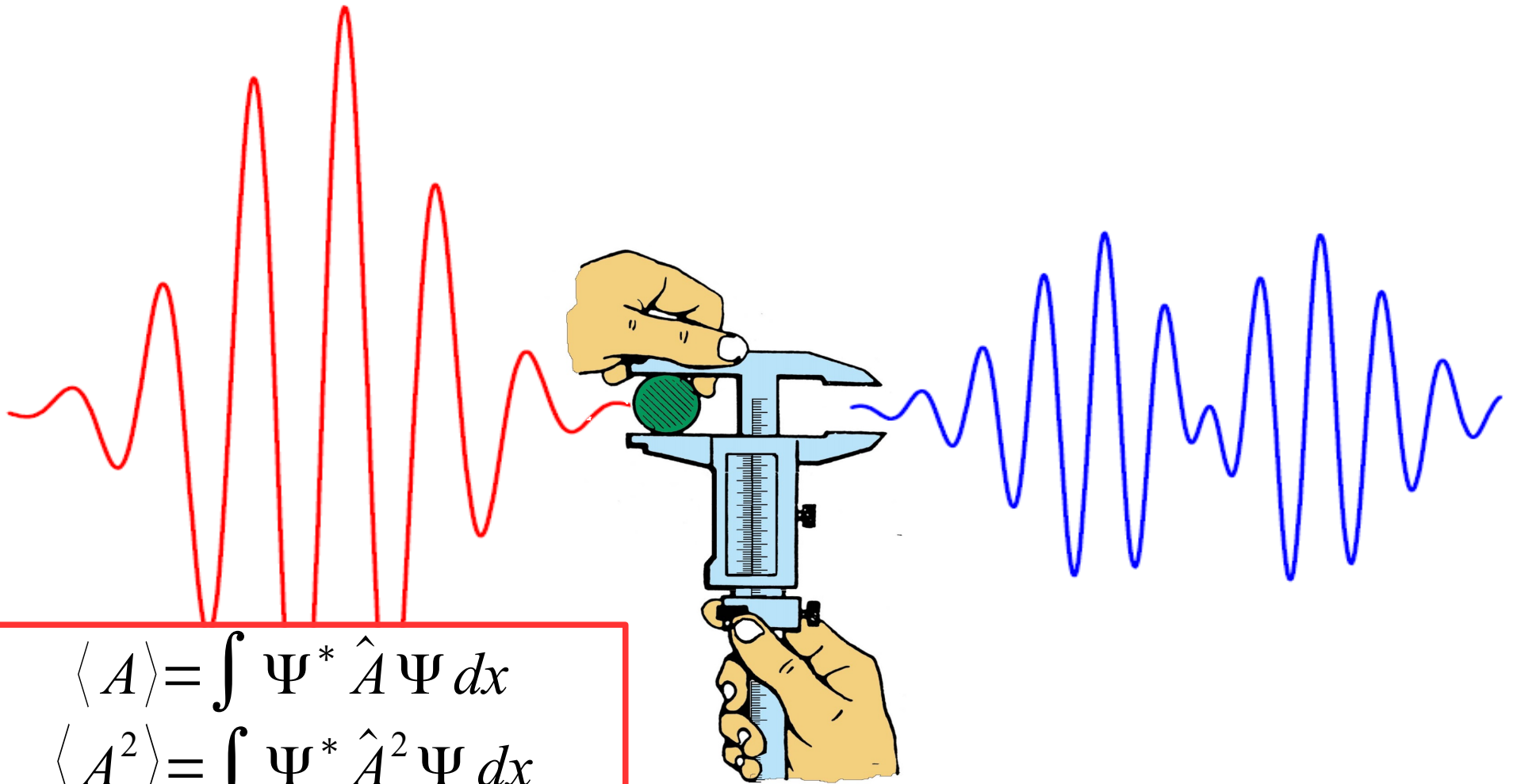
$$A_n \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_m^* \Psi_n dx = A_m \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_m^* \Psi_n dx$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_m^* \Psi_n dx = 0$$

Среднее значение физической величины

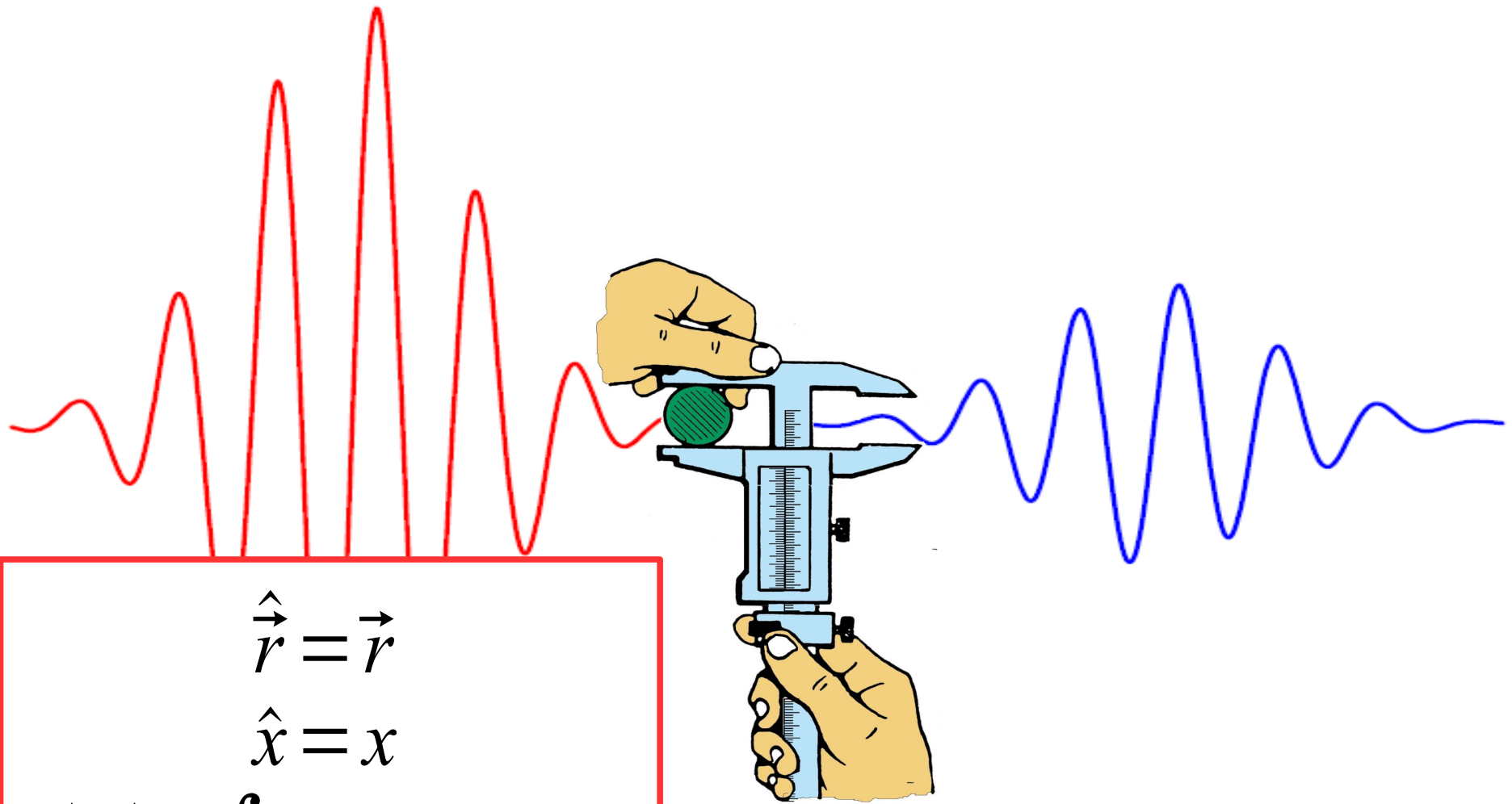


Среднее значение физической величины



$$\begin{aligned}\langle A \rangle &= \int \Psi^* \hat{A} \Psi dx \\ \langle A^2 \rangle &= \int \Psi^* \hat{A}^2 \Psi dx \\ \langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle &= (\langle A \rangle)^2 - \langle A^2 \rangle\end{aligned}$$

Оператор координаты

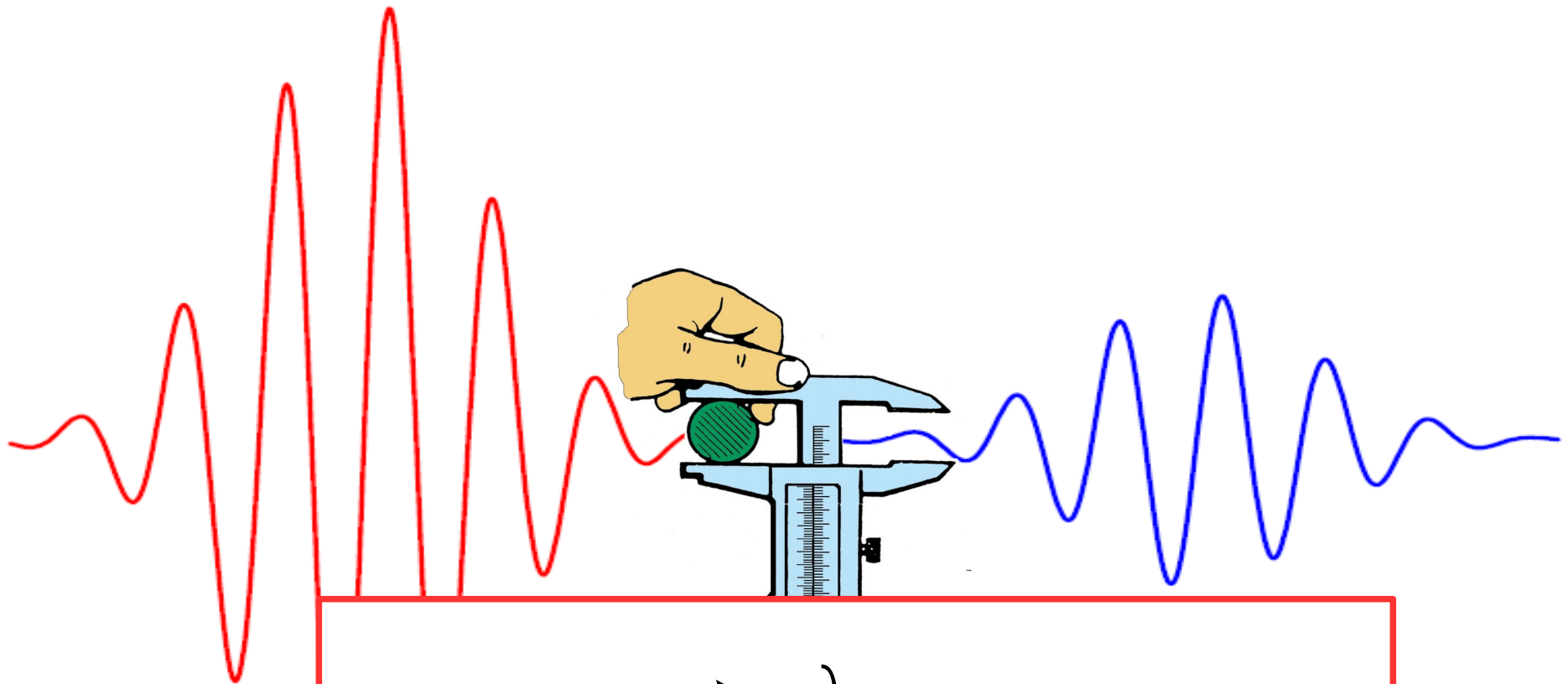


$$\hat{\vec{r}} = \vec{r}$$

$$\hat{x} = x$$

$$\langle x \rangle = \int \Psi^* x \Psi dx$$

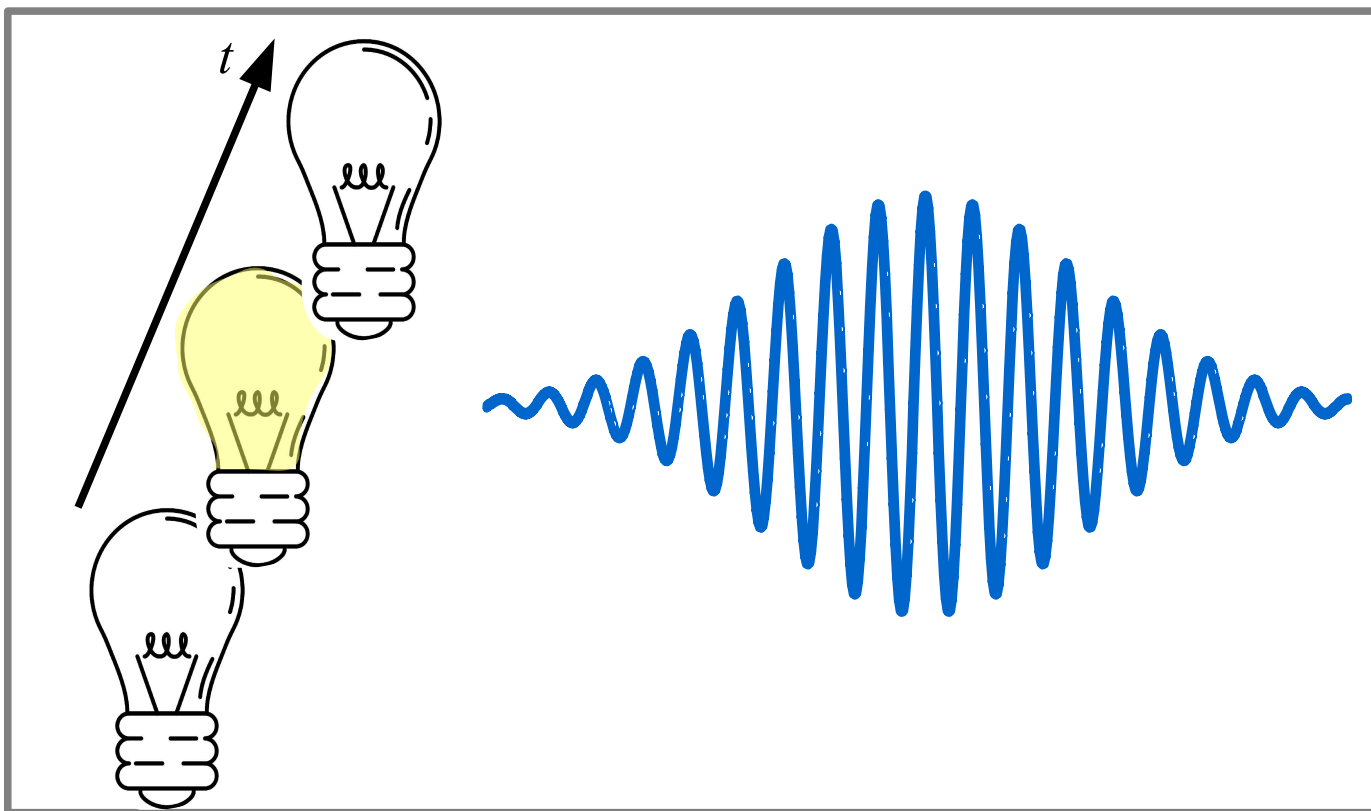
Оператор импульса



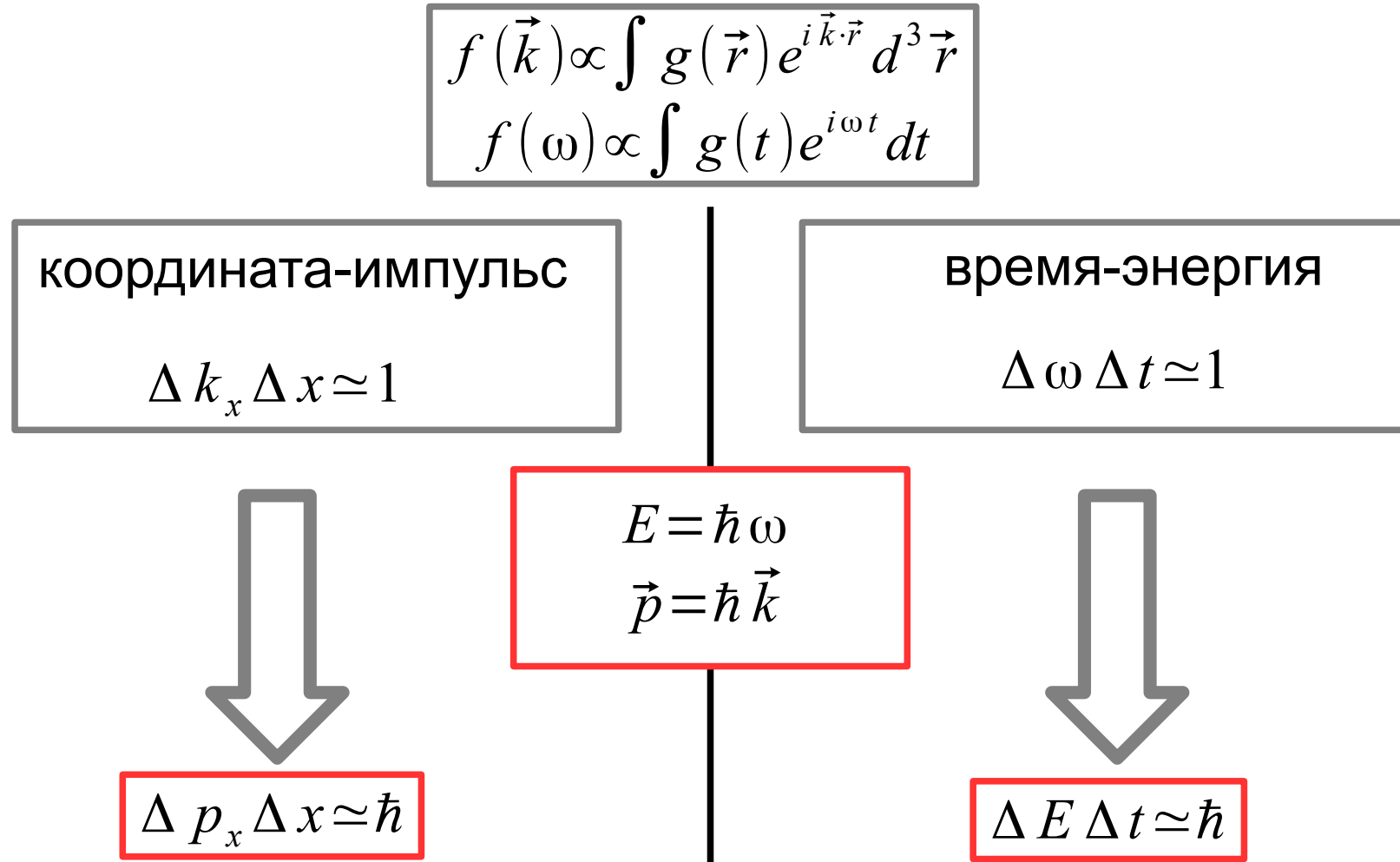
$$\left. \begin{array}{l} \vec{p} = \hbar \vec{k} \\ \Psi = e^{i(\vec{k} \vec{r} - \omega t)} \end{array} \right\} \rightarrow \hat{p} = -i \hbar \vec{\nabla}$$

Часть 2. Соотношения
неопределенности Гейзенберга.
Проблема измерения в квантовой
физике.

Свойства волнового пакета



Соотношения неопределённостей Гейзенберга: Аналогия с волнами



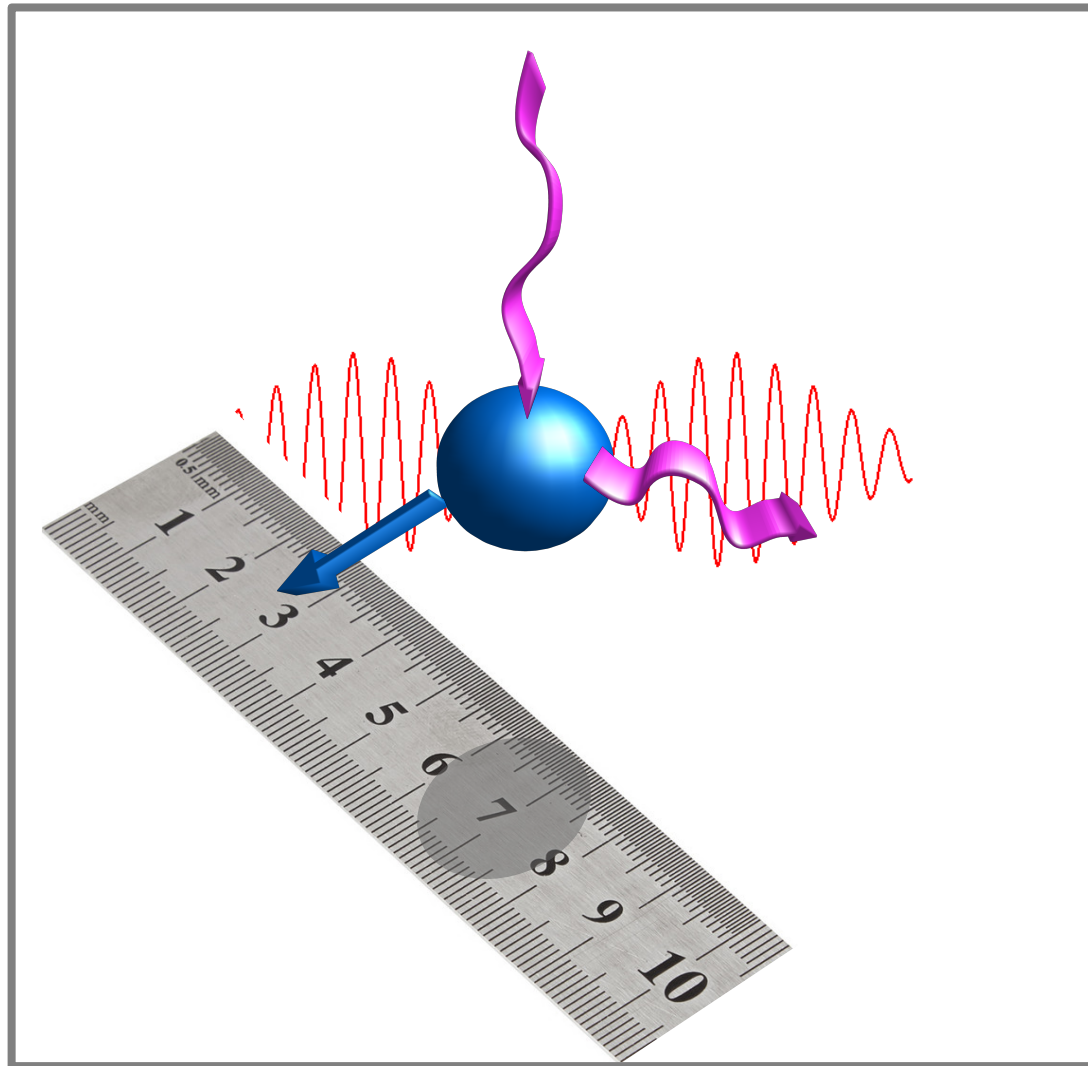
*Запись условная, подразумеваются 'по определению'
дисперсии соответствующих переменных*

Соотношения неопределённостей Гейзенберга: «Строгая» формулировка.

$$\Delta E \Delta t \geq \hbar$$

$$\sqrt{(\Delta x)^2} \cdot \sqrt{(\Delta p_x)^2} \geq \hbar/2$$

Соотношения неопределённостей Гейзенберга: Проблема измерения.



$$\Delta p_x \Delta x \simeq \hbar$$

$$\Delta E \Delta t \simeq \hbar$$

Соотношения неопределённостей Гейзенберга: Проблема измерения.

Невозможно **измерить**
импульс (энергию) частицы
точнее, чем определяется
этими соотношениями, для
заданной точности
измерения координаты
частицы (времени
измерения)

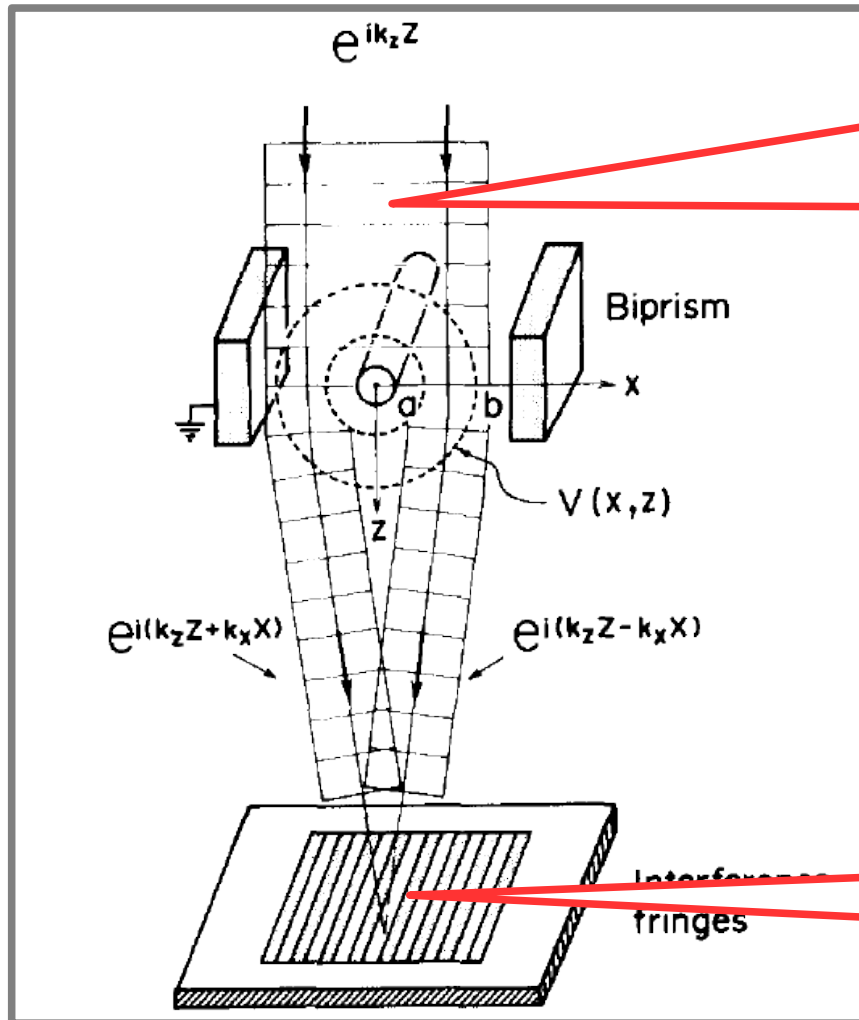


Невозможно **задать**
импульс (энергию) частицы
точнее, чем определяется
этими соотношениями, для
заданной точности
установки координаты
частицы (времени
взаимодействия)

$$\Delta p_x \Delta x \simeq \hbar$$

$$\Delta E \Delta t \simeq \hbar$$

Одновременная измеримость физических величин



Плоская волна де Бройля, состояние с определенным импульсом

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

Экран «производит» измерение координаты

Одновременная измеримость физических величин

$$e^{ik_z z}$$



Плоская волна де Бройля — состояние с определенным импульсом
 $\vec{p} = \hbar \vec{k}$

- Соотношение неопределенностей Гейзенберга
- Две физические величины могут быть измерены одновременно точно только если у них есть общие собственные функции

$$\Delta p \times \Delta x \simeq \hbar$$

$$\hat{A} \Psi = A \Psi$$

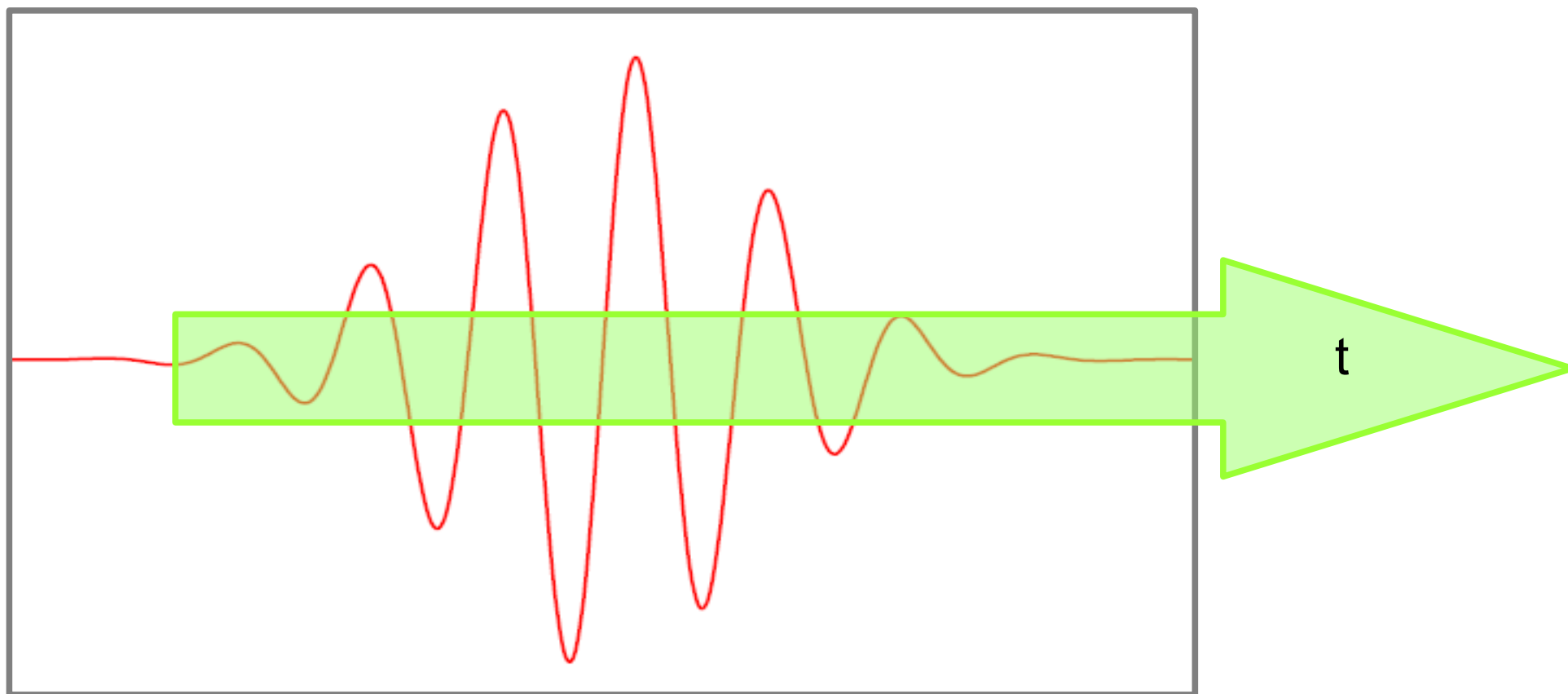
$$\hat{B} \Psi = B \Psi$$



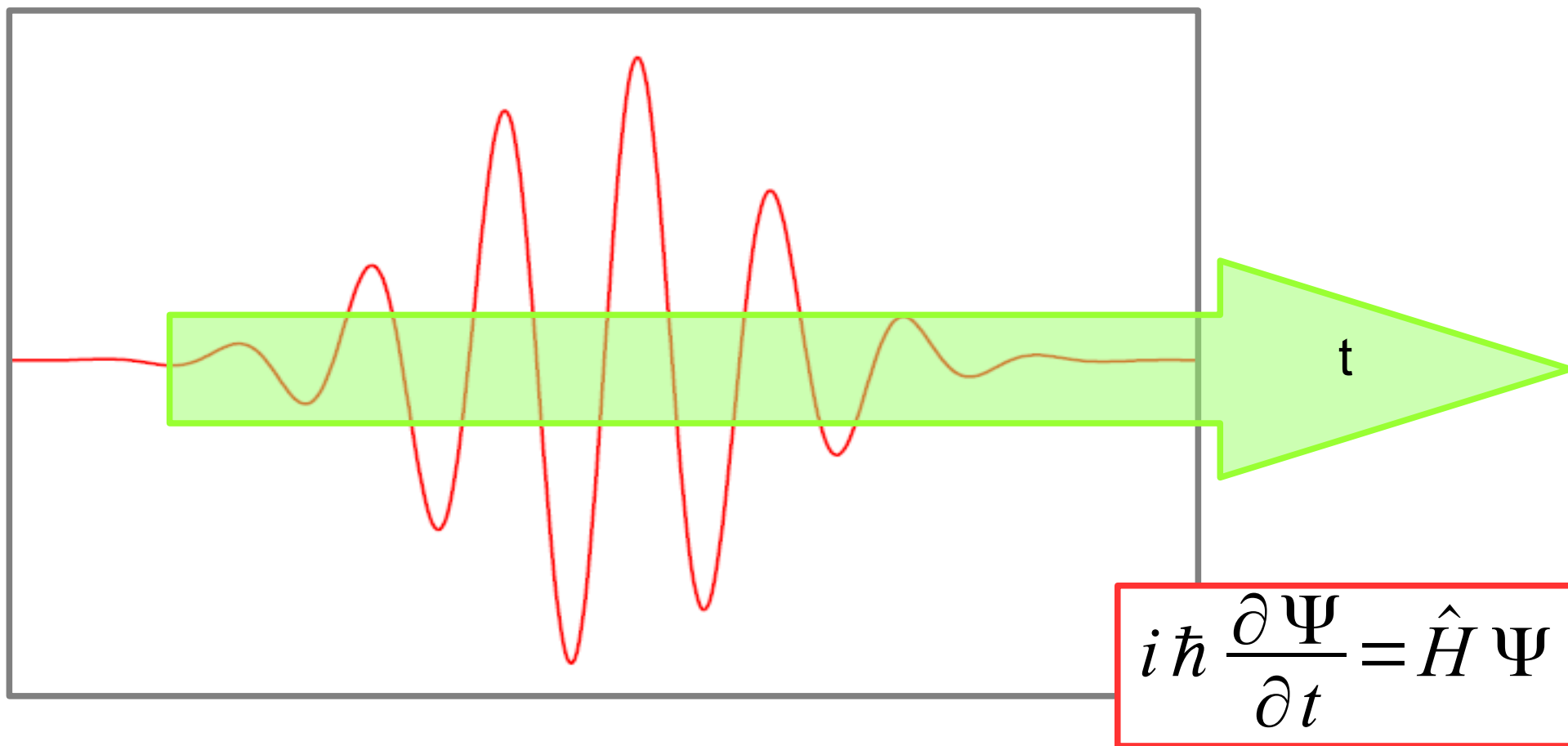
«производит»
 измерение координаты

Часть 3. «Динамика» в квантовой механике: Уравнение Шредингера.

Уравнение Шредингера

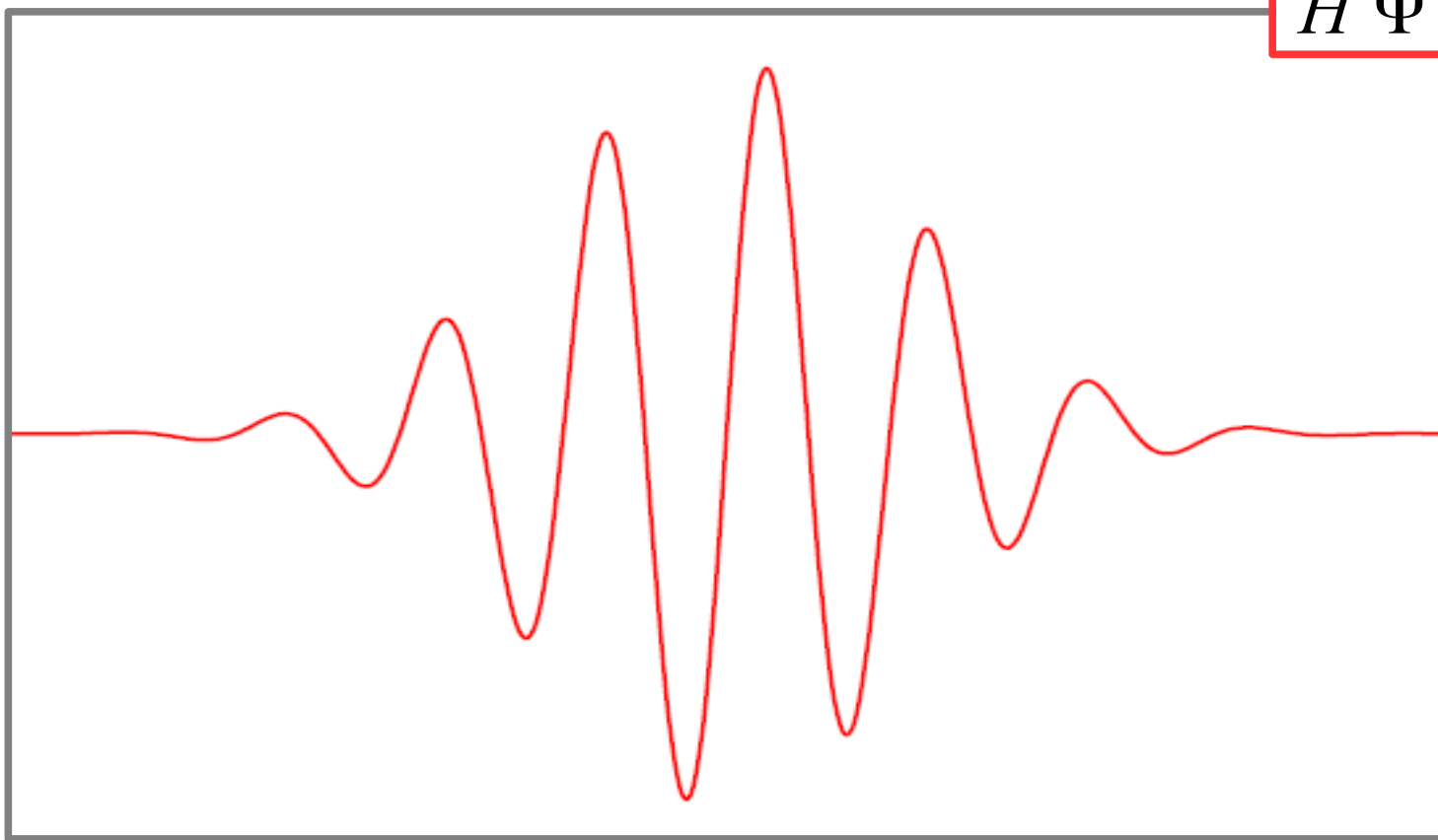


Уравнение Шредингера

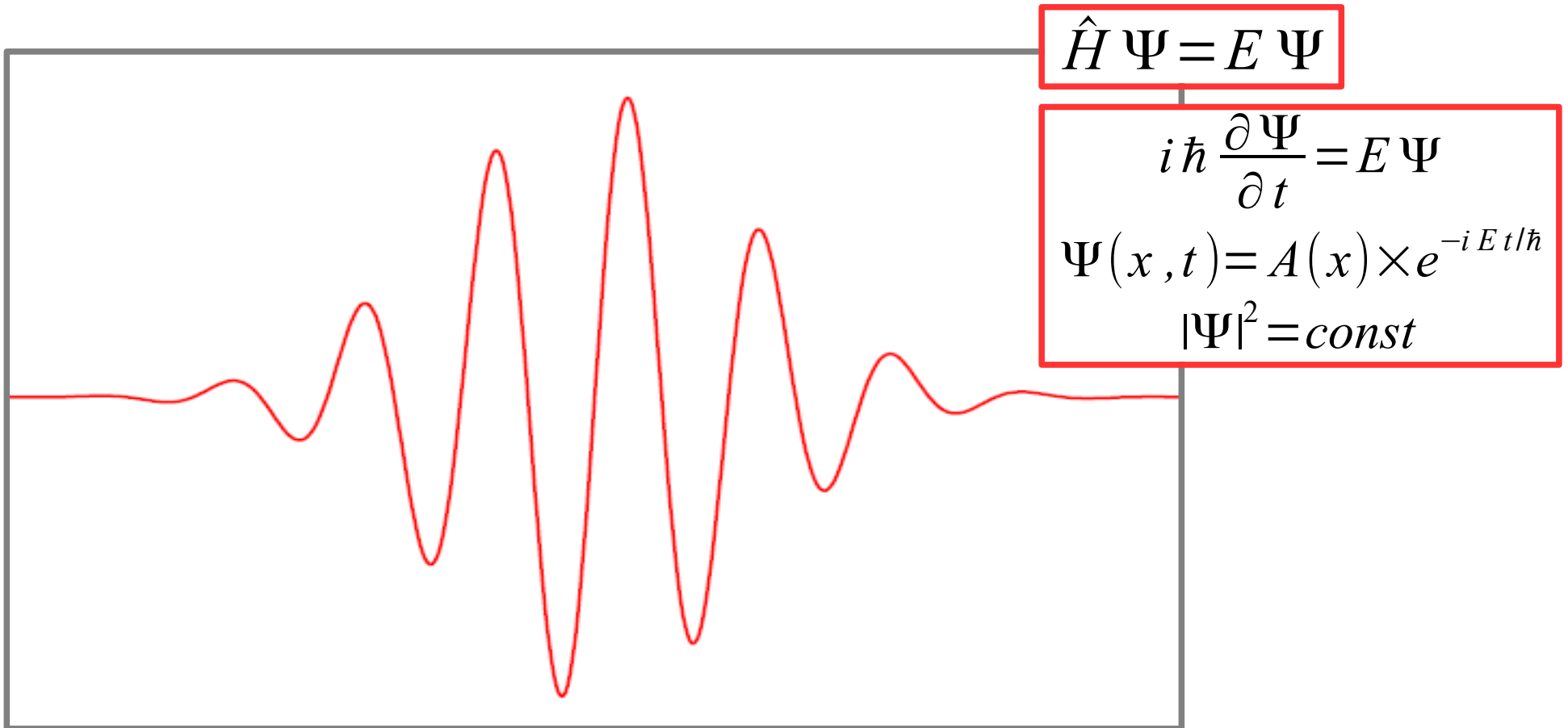


Стационарное уравнение Шредингера

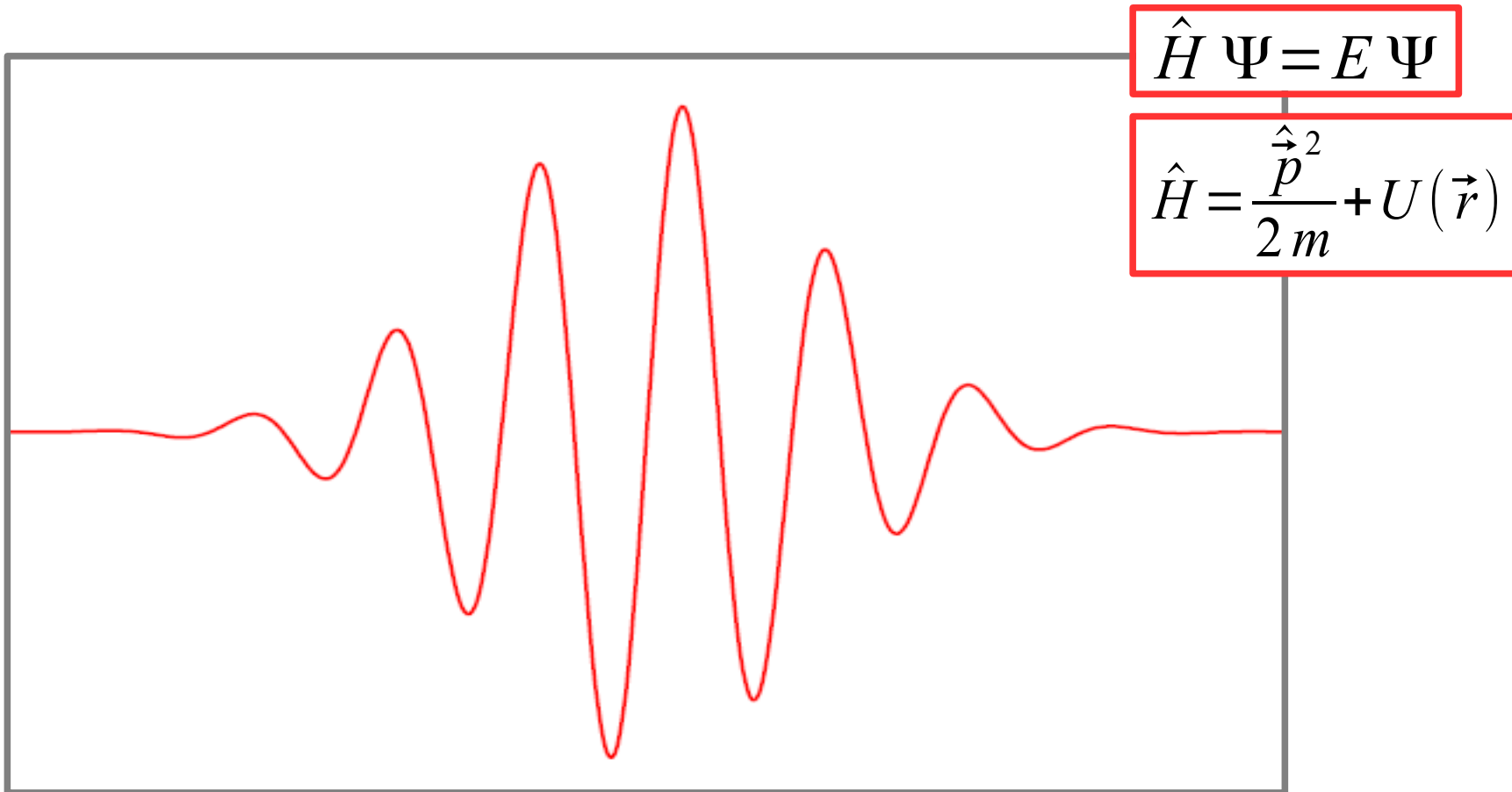
$$\hat{H} \Psi = E \Psi$$



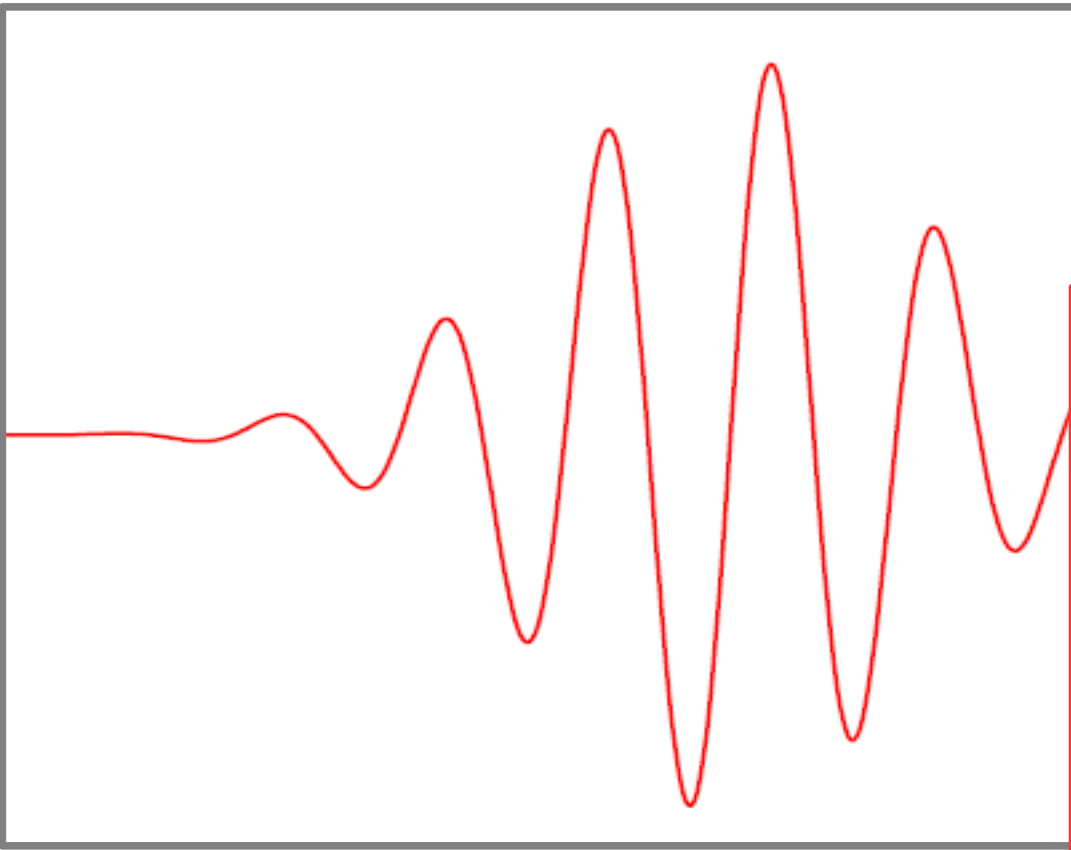
Стационарное уравнение Шредингера



Оператор Гамильтона



Оператор Гамильтона


$$\hat{H} \Psi = E \Psi$$

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

для свободной частицы:

$$\frac{(-i\hbar \vec{\nabla})^2}{2m} \Psi = E \Psi$$

$$\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi + E \Psi = 0$$

$$\Psi = C \times \exp(\pm i k x), \quad k = \sqrt{\frac{2m E}{\hbar^2}}$$

Смысл решений e^{ikx} и e^{-ikx}

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = E \Psi, \quad E > 0$$

$$\Psi(x, t) = \Psi(x) \times e^{-iEt/\hbar}$$

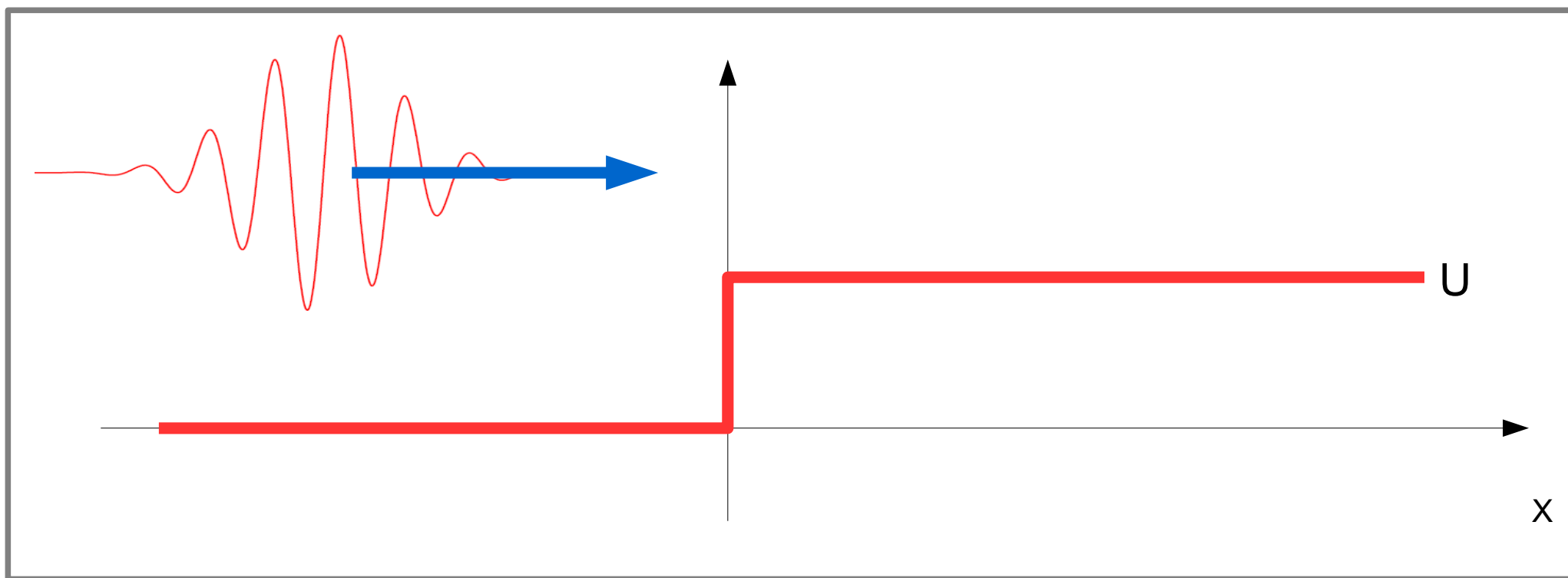
$$\Psi(x) = e^{\pm ikx}$$

$$\Psi(x, t) = \begin{cases} e^{i(kx - Et/\hbar)} & \text{направо} \\ e^{i(-kx - Et/\hbar)} & \text{налево} \end{cases}$$

Часть 4. Рассеяние на «ступеньке» (на одномерном потенциальном барьере бесконечной протяженности)

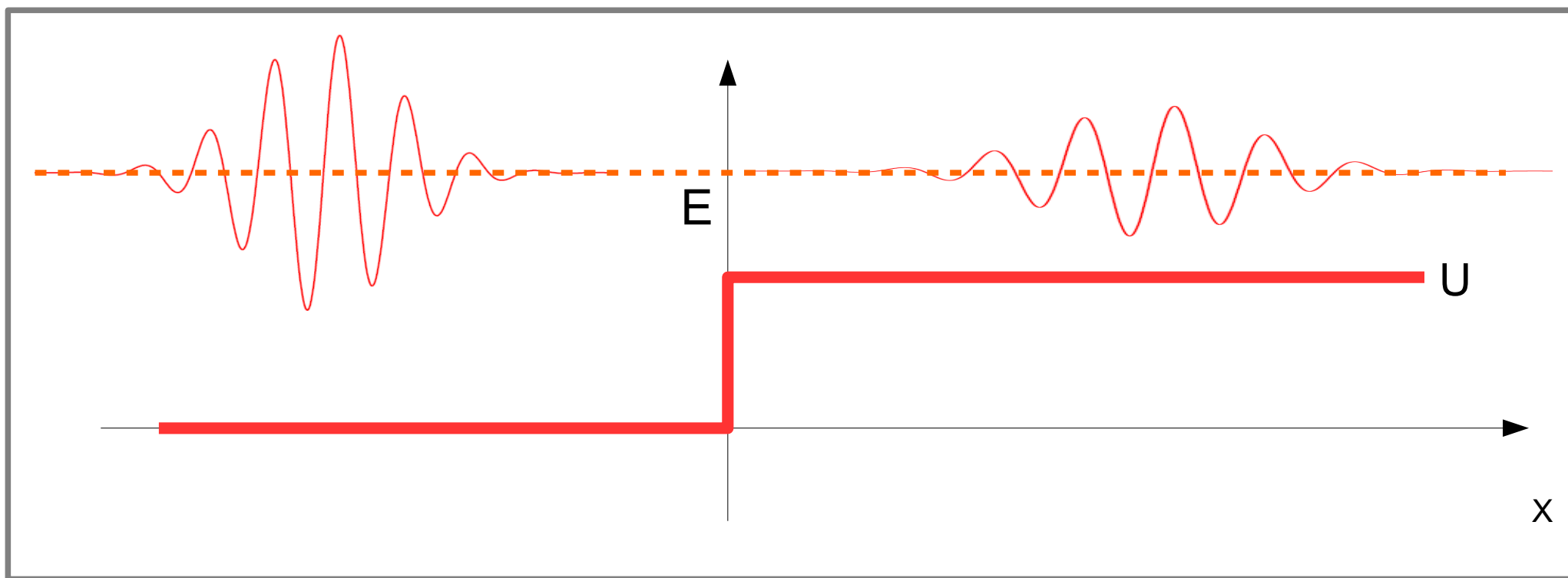
Задача о барьере

$$\frac{\hbar^2}{2m} \Psi'' + (E - U(x)) \Psi = 0$$



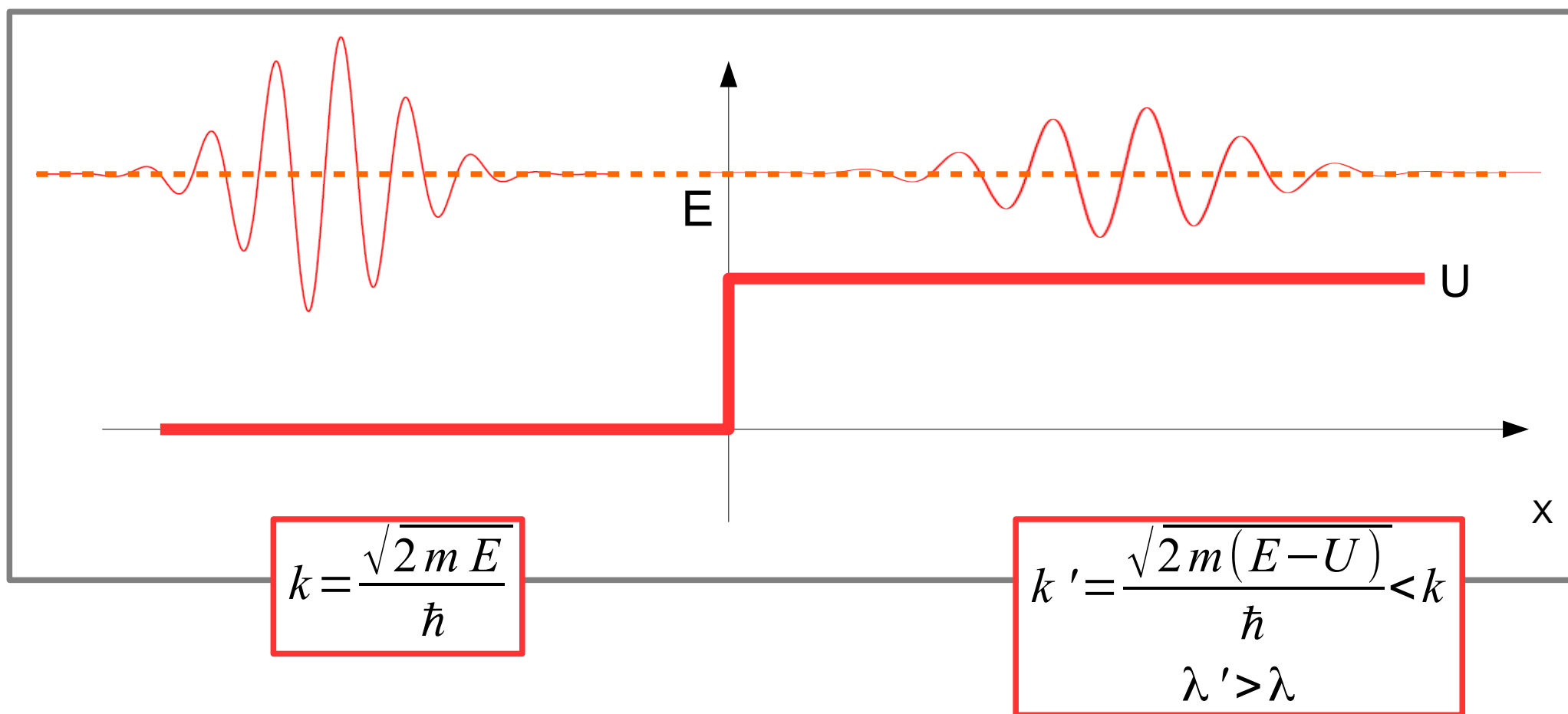
Задача о барьере

$$\frac{\hbar^2}{2m} \Psi'' + (E - U(x)) \Psi = 0$$



Задача о барьере

$$\frac{\hbar^2}{2m} \Psi'' + (E - U(x)) \Psi = 0$$

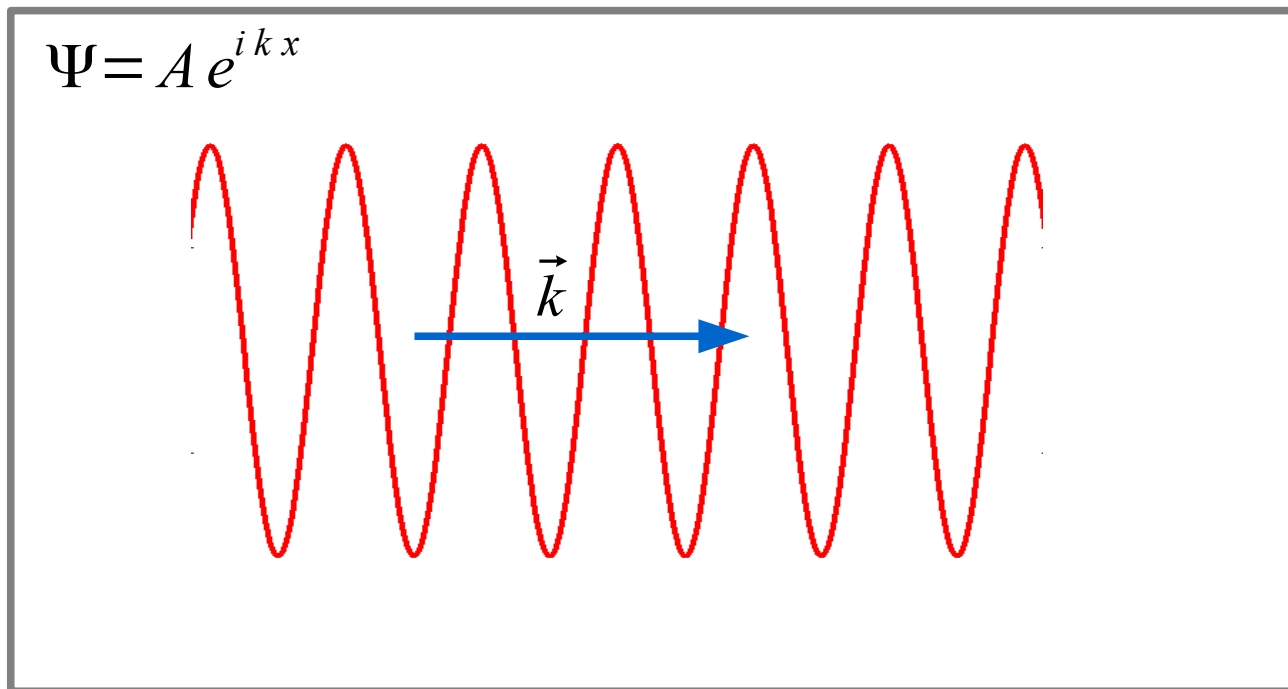


Задача о барьере

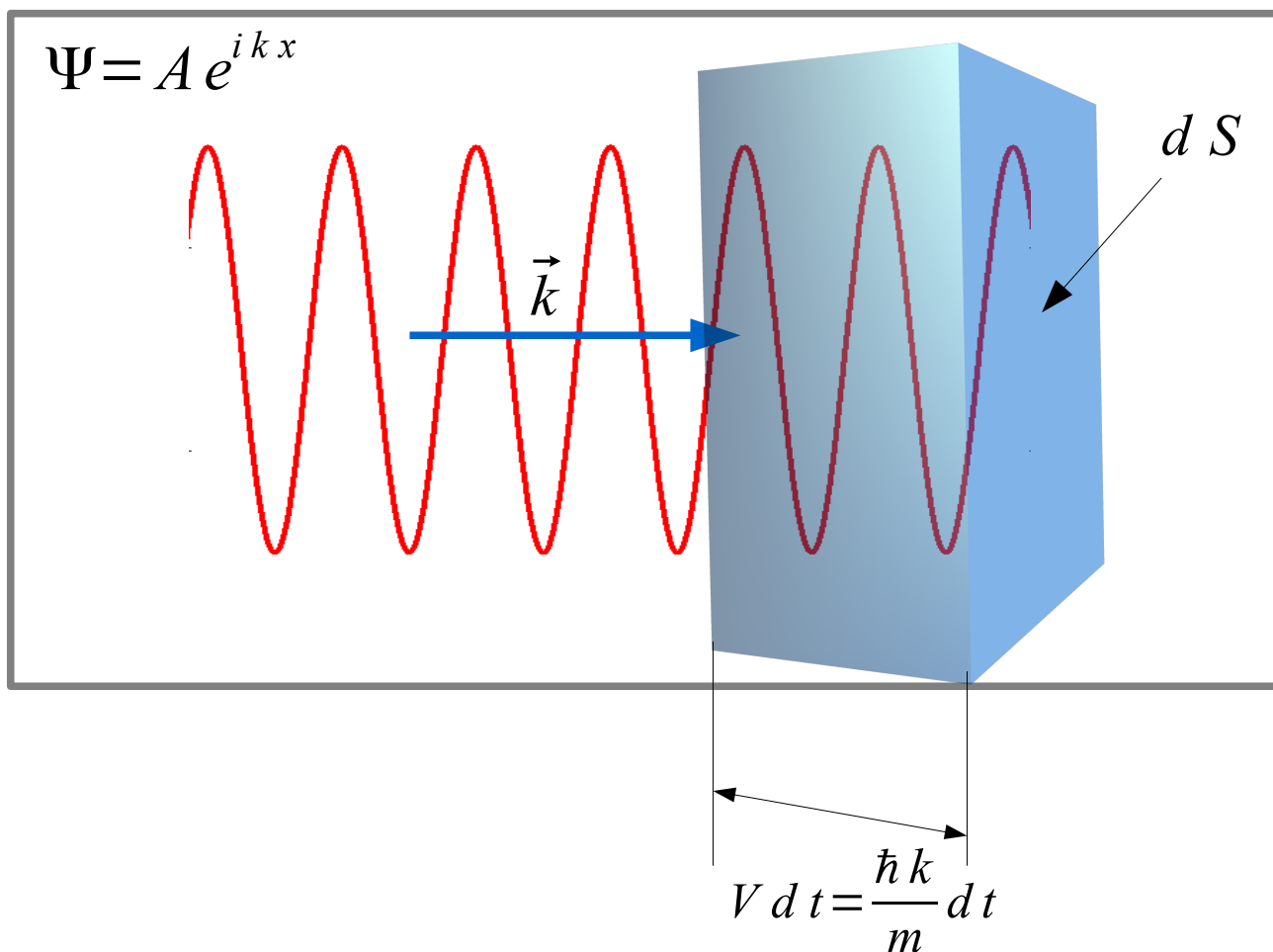
$$\frac{\hbar^2}{2m} \Psi'' + (E - U(x)) \Psi = 0$$



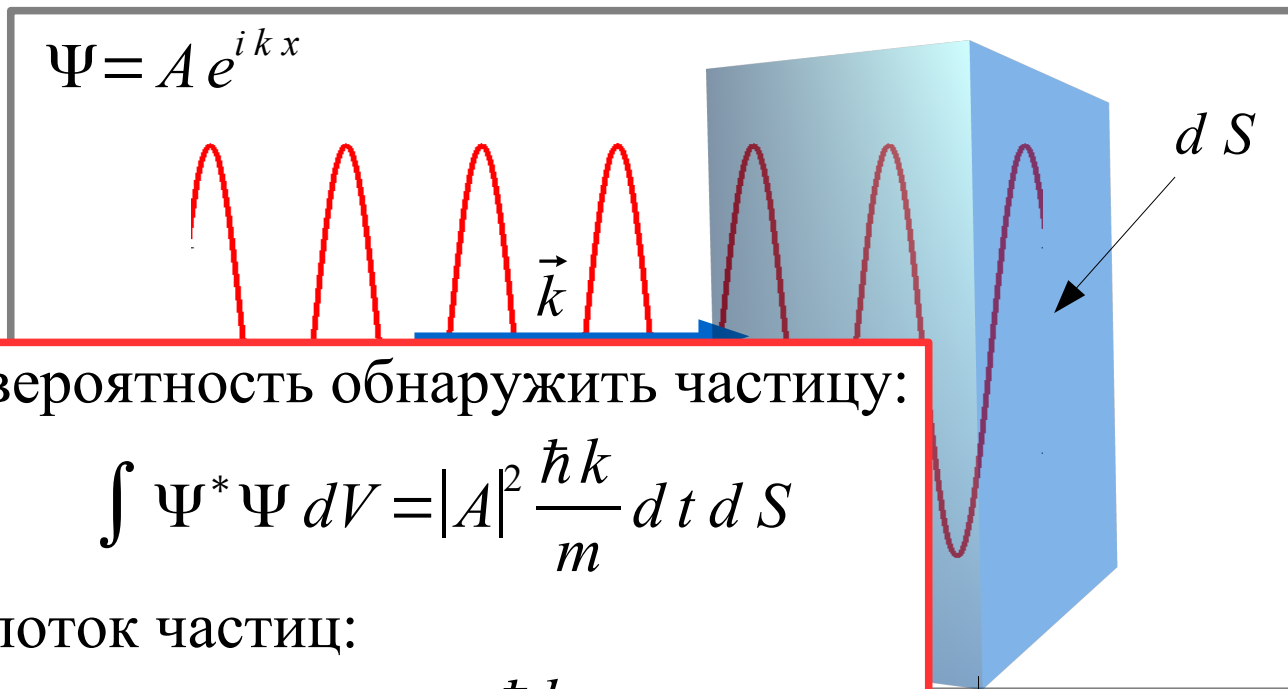
Нормировка волновой функции свободной частицы.



Нормировка волновой функции свободной частицы.



Нормировка волновой функции свободной частицы.



вероятность обнаружить частицу:

$$\int \Psi^* \Psi dV = |A|^2 \frac{\hbar k}{m} dt dS$$

ПОТОК частиц:

$$j = |A|^2 \frac{\hbar k}{m}$$

$$V dt = \frac{\hbar k}{m} dt$$

Поток вероятности

$$w = \int \Psi^* \Psi dV$$
$$\frac{d w}{d t} = \int \left(\frac{d \Psi^*}{d t} \Psi + \Psi^* \frac{d \Psi}{d t} \right) dV$$

Поток вероятности

$$w = \int \Psi^* \Psi dV$$
$$\frac{d w}{d t} = \int \left(\frac{d \Psi^*}{d t} \Psi + \Psi^* \frac{d \Psi}{d t} \right) dV$$

$$i \hbar \frac{d \Psi}{d t} = \hat{H} \Psi$$
$$-i \hbar \frac{d \Psi^*}{d t} = \hat{H} \Psi^*$$

Поток вероятности

$$w = \int \Psi^* \Psi dV$$
$$\frac{dw}{dt} = \int \left(\frac{d\Psi^*}{dt} \Psi + \Psi^* \frac{d\Psi}{dt} \right) dV$$

$$i\hbar \frac{d\Psi}{dt} = \hat{H} \Psi$$

$$-i\hbar \frac{d\Psi^*}{dt} = \hat{H} \Psi^*$$

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

$$\begin{aligned} \frac{dw}{dt} &= \frac{i}{\hbar} \int \left((\hat{H} \Psi^*) \Psi - \Psi^* (\hat{H} \Psi) \right) dV = \\ &= \frac{i\hbar}{2m} \int (\Psi^* \Delta \Psi - \Psi \Delta \Psi^*) dV \end{aligned}$$

Поток вероятности

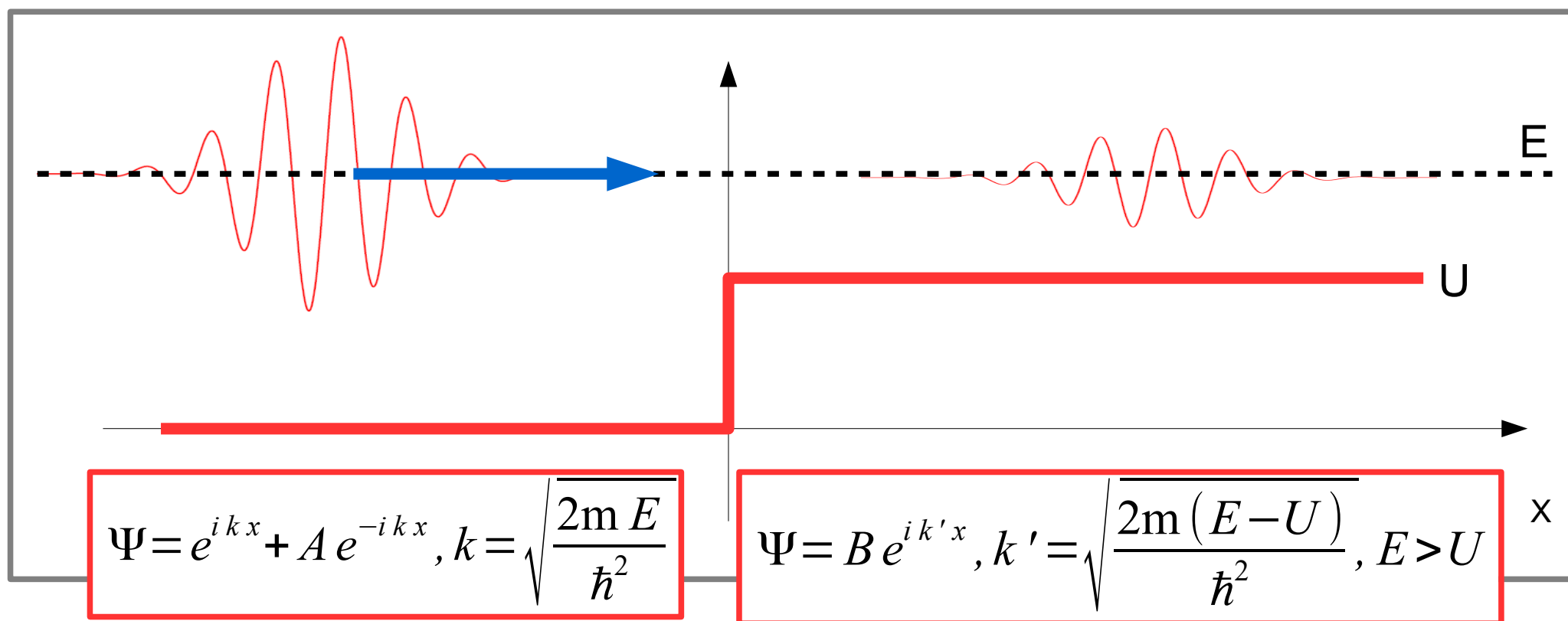
$$\begin{aligned}\frac{d w}{d t} &= \frac{i \hbar}{2 m} \int \left(\Psi^* \Delta \Psi - \Psi \Delta \Psi^* \right) dV = \\ &= \frac{i \hbar}{2 m} \int \operatorname{div} \left(\Psi^* \vec{\nabla} \Psi - \Psi \vec{\nabla} \Psi^* \right) dV = \\ &= \int \frac{i \hbar}{2 m} \left(\Psi^* \vec{\nabla} \Psi - \Psi \vec{\nabla} \Psi^* \right) d\vec{S}\end{aligned}$$

$$\vec{j} = -\frac{i \hbar}{2 m} \left(\Psi^* \vec{\nabla} \Psi - \Psi \vec{\nabla} \Psi^* \right)$$

для определенности потока
вероятности необходима гладкость и
дифференцируемость волновой
функции

Задача о барьере

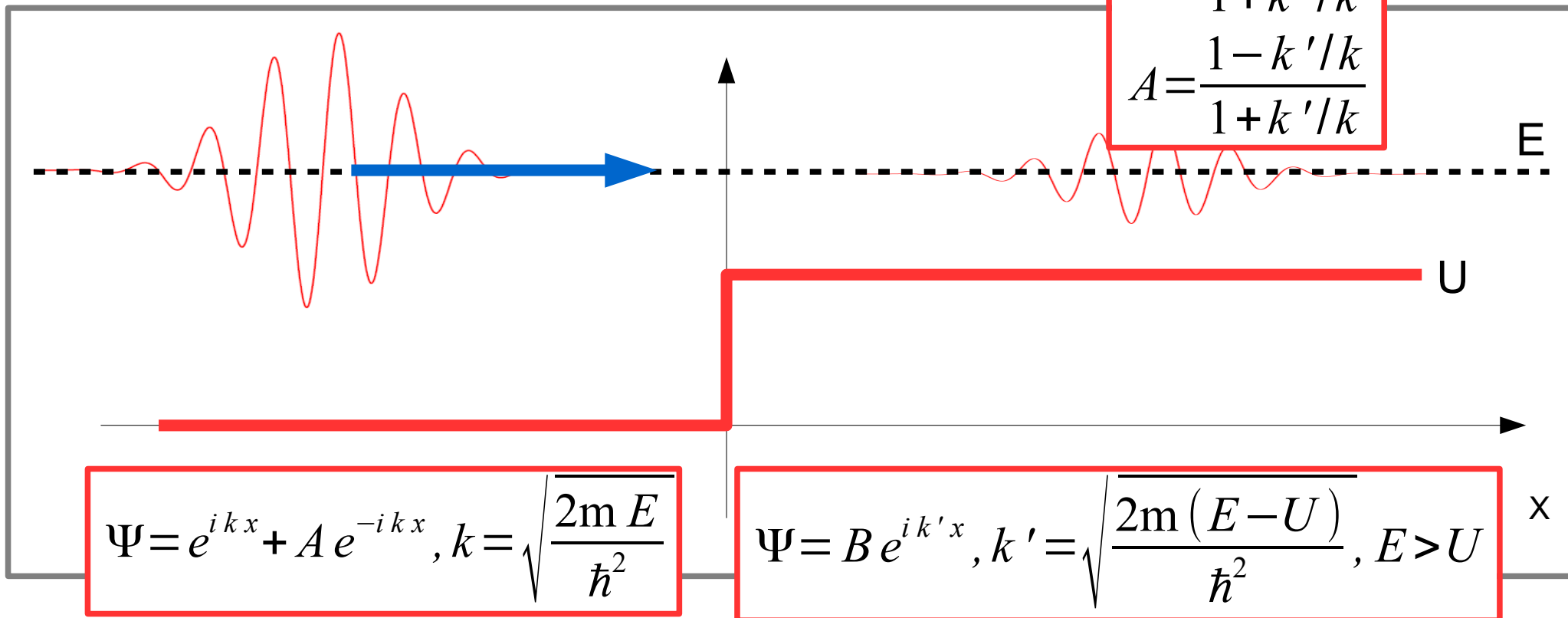
$$\frac{\hbar^2}{2m} \Psi'' + (E - U(x)) \Psi = 0$$



Задача о барьере

$$\frac{\hbar^2}{2m} \Psi'' + (E - U(x)) \Psi = 0$$

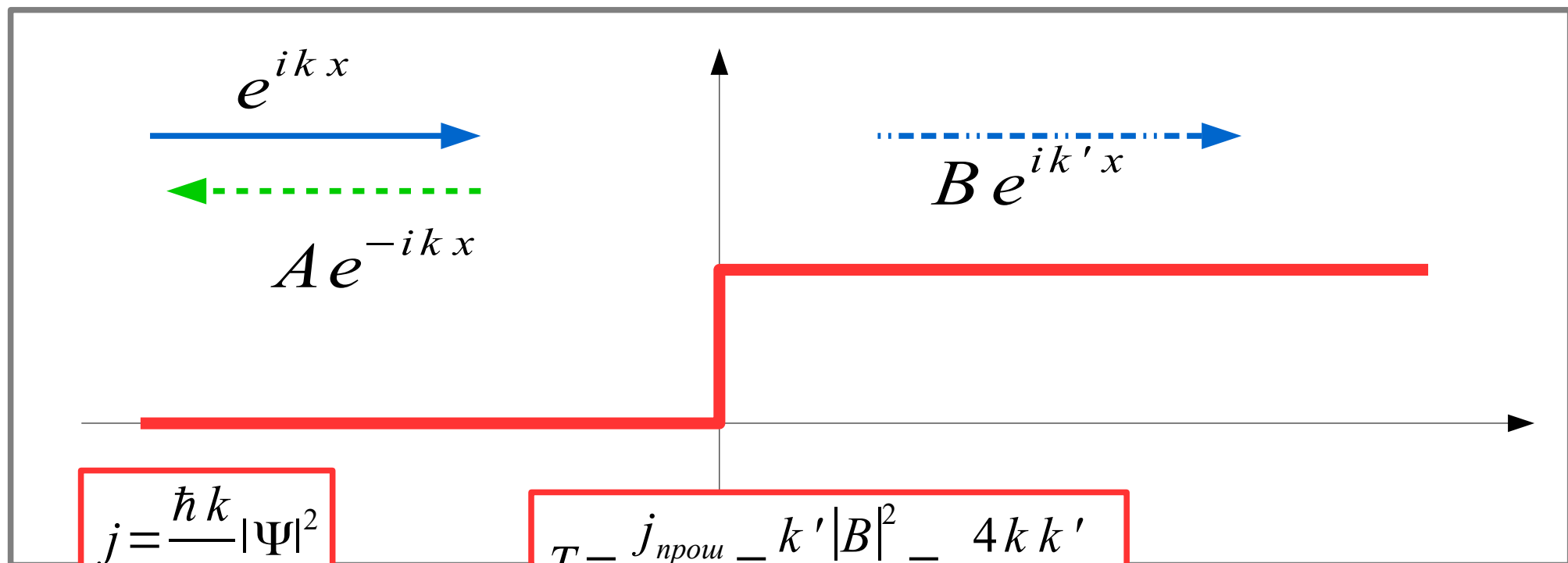
$$E > U$$
$$B = \frac{2}{1 + k'/k}$$
$$A = \frac{1 - k'/k}{1 + k'/k}$$



$$\Psi = e^{ikx} + A e^{-ikx}, k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

$$\Psi = B e^{ik'x}, k' = \sqrt{\frac{2m(E-U)}{\hbar^2}}, E > U$$

Прозрачность барьера



$$j = \frac{\hbar k}{m} |\Psi|^2$$

$$T = \frac{j_{\text{прош}}}{j_{\text{над}}} = \frac{k' |B|^2}{k} = \frac{4kk'}{(k+k')^2}$$

$$B = \frac{2}{1 + k'/k}$$

$$A = \frac{1 - k'/k}{1 + k'/k}$$

$$R = \frac{j_{\text{отп}}}{j_{\text{над}}} = \frac{k |A|^2}{k} = |A|^2 = \frac{(k - k')^2}{(k + k')^2}$$

Главное на лекции

