Лекция 5. Временное уравнение Шредингера. Общее решение. Стационарные состояния. Плотность потока вероятности

Волновая функция удовлетворяет уравнению Шредингера

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

где $\hat{H}$ - оператор энергии, который называют также оператором Гамильтона или гамильтонианом. Как следует из (1), оператор $\hat{H}$ является генератором трансляции квантовой системы по времени:

$$\Psi(t+\delta t) = \Psi(t) + \frac{\partial\Psi}{\partial t}\delta t = \Psi(t) + \delta t\cdot\frac{\hat{H}}{i\hbar}\Psi(t) = (1-\delta t\cdot\frac{i}{\hbar}\hat{H})\Psi(t)$$

Лекция 5 (2 слайд)

Докажем, что уравнение Шредингера сохраняет нормировку волновой функции. Из уравнения Шредингера имеем

$$i\hbar\left(\Psi, \frac{\partial \Psi}{\partial t}\right) = \left(\Psi, \hat{H}\Psi\right) \qquad -i\hbar\left(\frac{\partial \Psi}{\partial t}, \Psi\right) = \left(\hat{H}\Psi, \Psi\right)$$

Вычитая эти уравнения и учитывая эрмитовость гамильтониана, получим

$$\frac{d}{dt}\left(\Psi, \Psi\right) = 0$$

что и означает сохранение нормировки волновой функции.

Лекция 5 (3 слайд)

Уравнение Ш. допускает решение в случае, когда гамильтониан квантовой системы не зависит явно от времени. Ищем решение в виде $\Psi(q,t) = f(q)g(t)$,

получим

$$i\hbar f(q)\frac{dg(t)}{dt} = g(t)\hat{H}f(q)$$

или

$$i\hbar\frac{g'(t)}{g(t)} = \frac{\hat{H}f(q)}{f(q)}$$

Лекция 5 (4 слайд)

Так как правая часть зависит только от координат, а левая – только от времени, то уравнение удовлетворяется только тогда, когда и правая и левая часть равны некоторой постоянной. Обозначим эту постоянную E. Тогда

$$i\hbar g'(t) = Eg(t)$$

$$\hat{H}f(q) = Ef(q)$$

Лекция 5 (5 слайд)

Отсюда следует, что постоянная E совпадает с одним из собственных значений, а функция $f(q)$ - с одной из собственных функций оператора Гамильтона:

$$f(q) \to f_n(q) \qquad E \to E_n$$

Решая уравнение для функции $g(t)$, получим

$$g(t) = C_n e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t}$$

где C_n - произвольная постоянная.

Лекция 5 (6 слайд)

Таким образом, любая функция вида

$$\Psi(q,t) = C_n f_n(q) e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t}$$

где $f_n(q)$ - собственная функции оператора Гамильтона, а E_n - соответствующее собственное значение, является решением у. Ш.

А поскольку уравнение линейно, то линейная комбинация

$$\Psi(q,t) = \sum_n C_n f_n(q) e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t}$$

также является общим решением временного уравнения Шредингера.

Лекция 5 (7 слайд)

Среди всех решений выделяются функции, которые представляют собой одно слагаемое общего решения

$$\Psi(q,t) = C_n f_n(q) e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t}$$

В этих состояниях никакие вероятности и средние не зависят от времени. Это связано с тем, что вероятности определяются билинейной комбинацией $\Psi\Psi^*$, из которой «уходит» время. По этой причине эти состояния называются стационарными.

Лекция 5 (8 слайд)

Рассмотрим одну частицу, движущуюся в трехмерном пространстве.

ировка волновой функции $\Psi(\vec{r},t)$

Так как норм сохраняется, то для плотности вероятности различных значений координат

$\rho(\vec{r},t)=|\Psi(\vec{r},t)|^2$ анения

справедлив закон сохр

$$\frac{d\rho(\vec{r},t)}{dt}+div\,\vec{J}(\vec{r},t)=0$$

где вектор $\vec{J}(\vec{r},t)$ имеет смысл плотности потока вероятности.

ера можно найти $\vec{J}(\vec{r},t)$.

Используя уравнение Шрединг

Лекция 5 (9 слайд)

Для этого умножим у. Ш. на $\Psi^*(\vec{r},t)$, комплексно сопряженное уравнение - на $\Psi(\vec{r},t)$, вычтем второе уравнение из первого и проинтегрируем по некоторому объему V. Имеем

$$\frac{d}{dt}\int_V \left|\Psi(\vec{r},t)\right|^2 d\vec{r} = \frac{1}{i\hbar}\int_V \left(\Psi^*\hat{H}\Psi - \Psi\hat{H}\Psi^*\right) d\vec{r} = -\frac{\hbar}{2mi}\int_V \left(\Psi^*\Delta\Psi - \Psi\Delta\Psi^*\right) d\vec{r}$$

Используя далее теорему Гаусса, получим

$$\frac{d}{dt}\int_V \left|\Psi(\vec{r},t)\right|^2 d\vec{r} = -\frac{\hbar}{2mi}\oint_S \left(\Psi^*\nabla\Psi - \Psi\nabla\Psi^*\right) d\vec{s}$$

Лекция 5 (10 слайд)

Отсюда следует, что величина $\vec{J}(\vec{r},t)$

$$\vec{J}(\vec{r},t) = \frac{\hbar}{2mi}\left(\Psi^*(\vec{r},t)\nabla\Psi(\vec{r},t) - \Psi(\vec{r},t)\nabla\Psi^*(\vec{r},t)\right)$$

имеет смысл плотности потока вероятности. Или, другими словами, изменение вероятности обнаружить частицу в некотором объеме определяется потоком вектора $\vec{J}(\vec{r},t)$ через поверхность, ограничивающую этот объем.