Модель «СВОБОДНАЯ ЧАСТИЦА»

Определение 1 потенциальная энергия свободной частицы всюду равна нулю: $U(x, y, z) = 0$ (= const)

Определение 2 на свободную частицу не действуют никакие внешние силы: $F = grad\, U = 0$

Классическое описание

Свободная частица движется равномерно и прямолинейно

Наблюдаемые:

координата $x = x_o + v \cdot t$, где v — скорость, а t — время,

скорость $v_x = dx/dt$,

импульс $p_x = mv$,

кинетическая энергия $T = p^2/2m = mv^2/2$.

Квантовомеханическое описание

Задача: найти и охарактеризовать все состояния, в которых частица может быть обнаружена

СОСТОЯНИЕ $\Rightarrow$ **ВЕКТОР СОСТОЯНИЯ**

Координатное представление вектора состояния

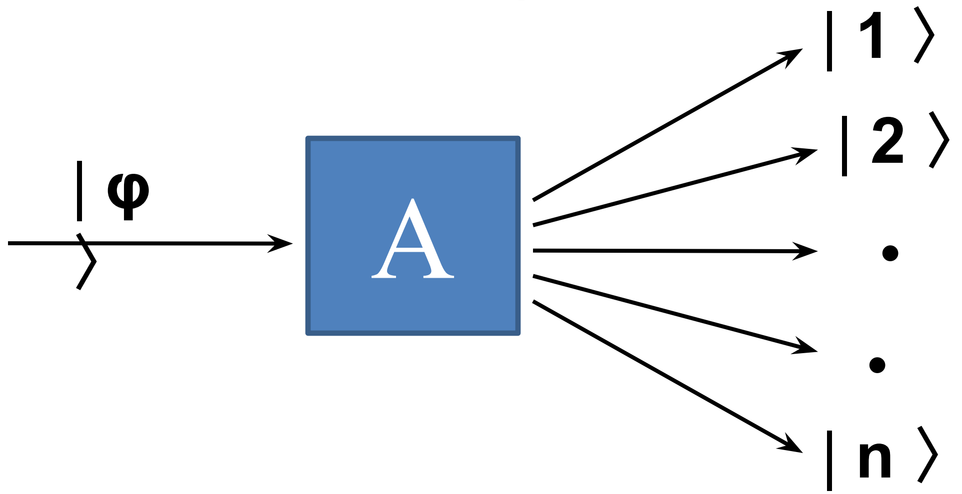
$$|\varphi\rangle = C_1|1\rangle + C_2|2\rangle + \ldots + C_n|n\rangle$$

Базисные состояния

$$|\varphi\rangle \Longleftrightarrow (C_1 \quad C_2 \ \ldots \ C_n)$$

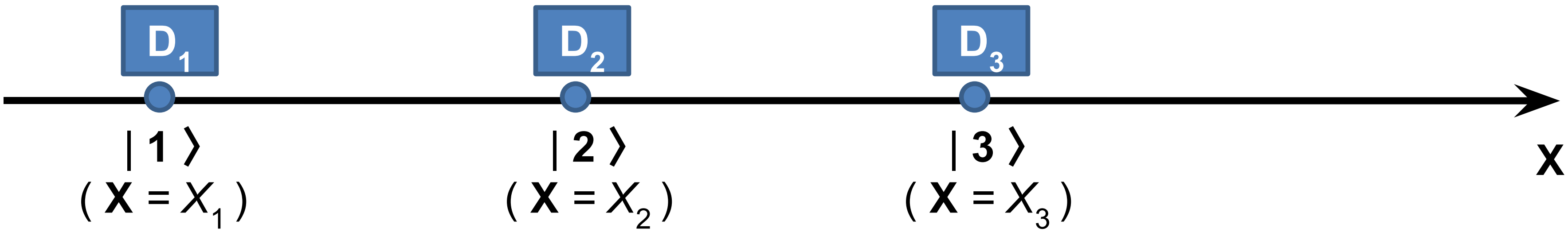
Проблема выбора базиса (базисных состояний)

Правило: каждый базисный набор порождается некоторым прибором (спектральным анализатором)



Какую наблюдаемую свободной частицы можно реально измерить с помощью спектрального анализатора?

A = координата $X = X_i$ (положение частицы на пространственной оси X)

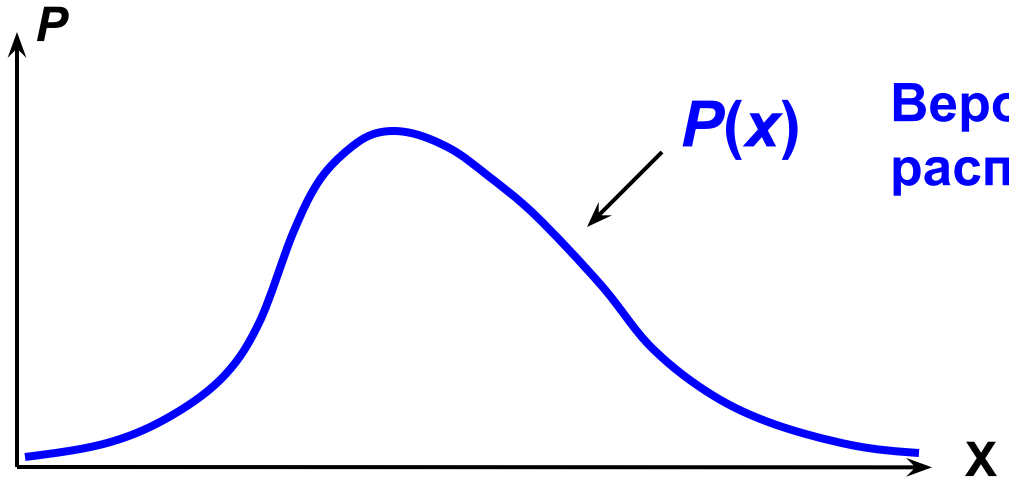


Каждое базисное состояние | i 〉 представляет собой точку на оси X, а коэффициенты разложения

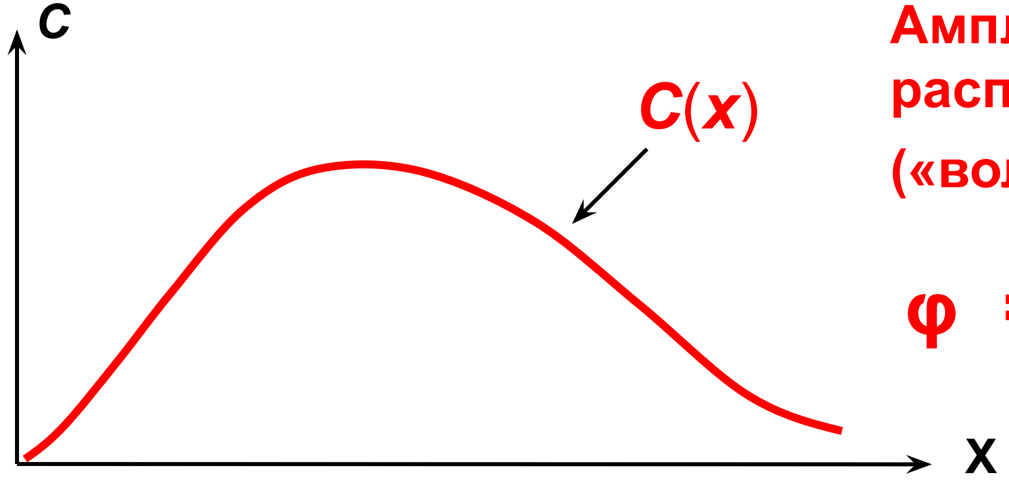
$$|\,\boldsymbol{\varphi}\,\rangle = (\,C_1 \quad C_2 \;\ldots\; C_n\,)$$

являются амплитудами вероятности обнаружения частицы детектором, размещенным в данной точке:

$$|\,C_i\,|^2 = \boldsymbol{P}\,(\,\mathbf{X} = X_i\,)$$



Вероятностная функция распределения



Амплитудная функция распределения

(«волновая функция»)

$$\varphi = C(x) = ???$$

Задача: найти явный вид волновых функций, описывающих все возможные состояния свободной частицы:

$$\varphi(x, t) = ???$$

Уравнение Шредингера

$$-\,\mathrm{i}\,\square\,\frac{d\,\varphi(x, t)}{dt} = H\,\varphi(x, t)$$

□ — постоянная Планка (= 1,055 · 10^{-34} Дж · с)

i — мнимая единица

H — оператор Гамильтона (гамильтониан)

Стационарные волновые функции $\psi(x, t)$

$$H\,\psi(x, t) = E \cdot \psi(x, t)$$

(уравнение на собственные значения для оператора *H*)

Правило: собственные функции всякого оператора образуют базисный набор:

$$\boldsymbol{\phi}(x, t) = D_1 \cdot \boldsymbol{\psi}_1 + D_2 \cdot \boldsymbol{\psi}_2 + \ldots + D_r \cdot \boldsymbol{\psi}_r$$

$$-\mathrm{i}\hbar \frac{d\boldsymbol{\psi}(x, t)}{dt} = E \cdot \boldsymbol{\psi}(x, t)$$

$$\boldsymbol{\psi}(x, t) = \boldsymbol{\psi}(x) \cdot e^{\mathrm{i}\frac{E}{\hbar}t} = \boldsymbol{\psi}(x) \cdot e^{\mathrm{i}\omega t}$$

E — энергия стационарного состояния (собственное значение оператора Гамильтона)

ω — частота стационарного состояния (энергия, выраженная в единицах $\hbar$)

Проверка

$$\frac{d}{dt}\,\psi(x)\cdot e^{i\frac{E}{\hbar}t} = \psi(x)\cdot\frac{d}{dt}\,e^{i\frac{E}{\hbar}t} =$$

$$= \psi(x)\cdot i\,\frac{E}{\hbar}\cdot e^{i\frac{E}{\hbar}t} = i\,\frac{E}{\hbar}\cdot\psi(x,t)$$

$$-i\hbar\,\frac{d\psi(x,t)}{dt} = E\cdot\psi(x,t)$$

$(i \cdot i = -1)$

$$(-i\cdot i)\,\hbar\,\frac{E\,\psi(x,t)}{\hbar} = E\cdot\psi(x,t)$$

$$\boldsymbol{\psi}(x, t) = \boldsymbol{\psi}(x) \cdot e^{i\frac{E}{\hbar}t} = \boldsymbol{\psi}(x) \cdot e^{i\omega t}$$

Пространственный множитель

Временно́й множитель

(временна́я экспонента)

$$\boldsymbol{\psi}(\boldsymbol{x}) = ???$$

Вид пространственного множителя зависит от природы (строения) объекта

$$H\,\boldsymbol{\psi}(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{E} \cdot \boldsymbol{\psi}(\boldsymbol{x})$$

Правило: **пространственные множители волновых функций стационарных состояний — собственные функции оператора Гамильтона**

$$\boldsymbol{H} = \boldsymbol{T} = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m} = \frac{(-\mathrm{i}\square)^2}{2m} \cdot \left[\frac{d}{dx}\right]^2 = -\frac{\square^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}$$

$$-\frac{\square^2}{2m} \cdot \frac{d^2\boldsymbol{\psi}(x)}{dx^2} = \boldsymbol{E} \cdot \boldsymbol{\psi}(x)$$

Частные решения:

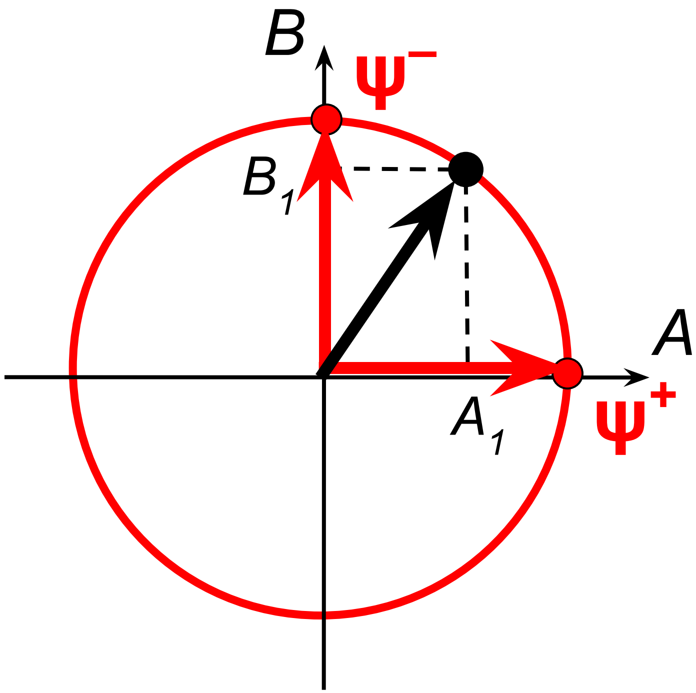
$\boldsymbol{\psi}^+(x) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{kx}}$ и $\boldsymbol{\psi}^-(x) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{kx}}$

Общее решение:

$$\boldsymbol{\psi}(x) = A \cdot \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{kx}} + B \cdot \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{kx}}$$

***A* и *B* — произвольные числа**

Условие нормировки: $A^2 + B^2 = 1$



Все в принципе возможные стационарные состояния (с определенным значением энергии) образуют двумерную линейную оболочку базисных состояний

$\boldsymbol{\psi}^{+}$ **и** $\boldsymbol{\psi}^{-}$

$$\boldsymbol{\psi}(x) = A \cdot e^{\mathbf{i}kx} + B \cdot e^{-\mathbf{i}kx} = A \cdot \boldsymbol{\psi}^{+} + B \cdot \boldsymbol{\psi}^{-}$$

Чтобы найти константу *k*, продифференцируем дважды любое частное решение:

$$d^2(e^{ikx})/dx^2 = -k^2(e^{ikx}) \qquad \text{или} \qquad d^2[\boldsymbol{\psi}(x)]/dx^2 = -k^2[\boldsymbol{\psi}(x)]$$

Подставим вторую производную вместо левой части уравнения

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{d^2\boldsymbol{\psi}(x)}{dx^2} = E \cdot \boldsymbol{\psi}(x)$$

Отсюда получим, что

$$-k^2[\boldsymbol{\psi}(x)] = (-2mE/\hbar^2)[\boldsymbol{\psi}(x)]$$

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} = \frac{P}{\hbar}$$

***P* — квантовомеханический «импульс»**

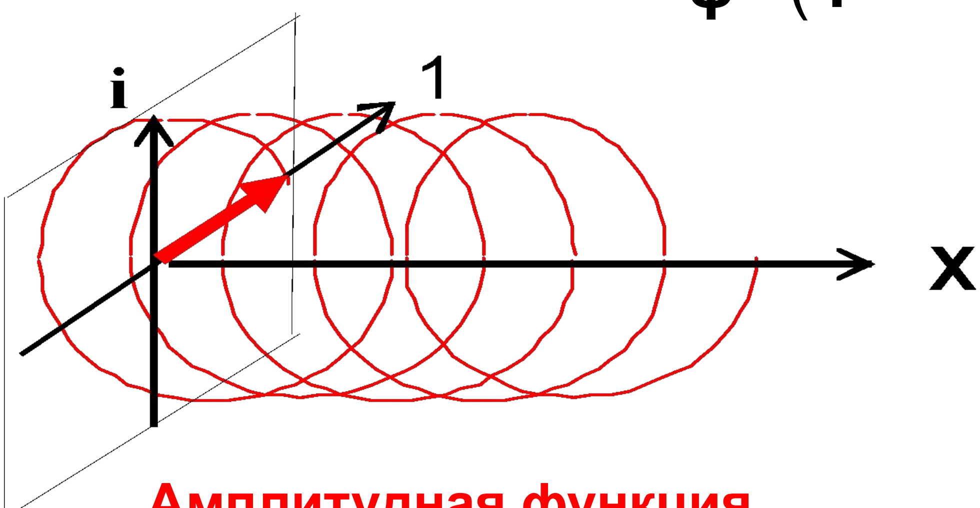
$$\psi(x) = A \cdot e^{i\frac{+P}{\square}x} + B \cdot e^{i\frac{-P}{\square}x}$$

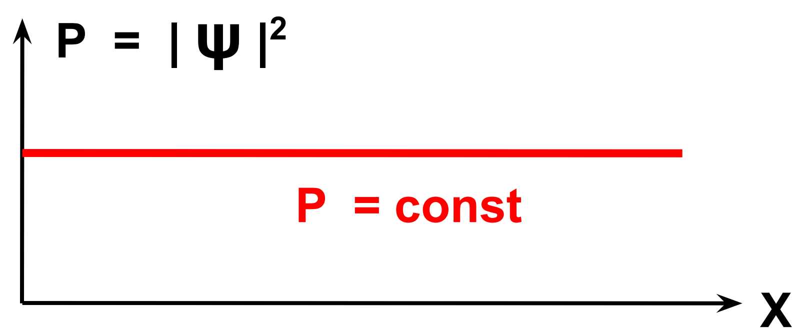
Состояния с определенным значением импульса

$\psi^{+}\ (\mathbf{P} = +P)$

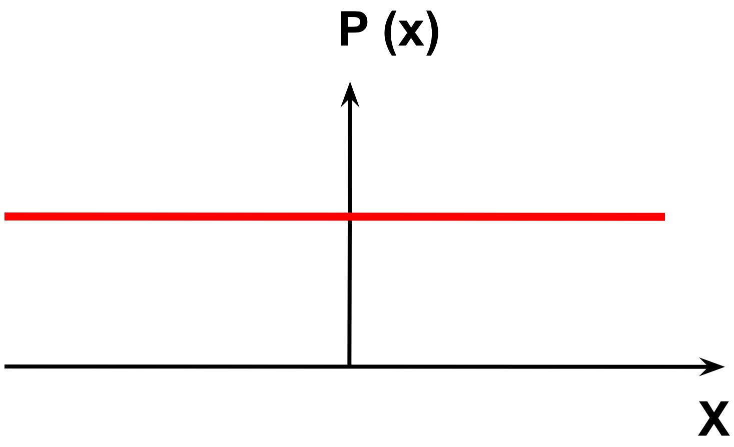
x

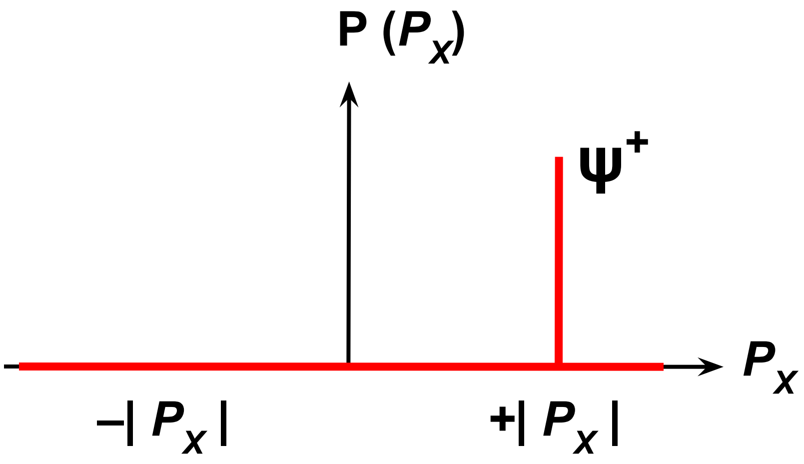
$\psi^{-}\ (\mathbf{P} = -P)$





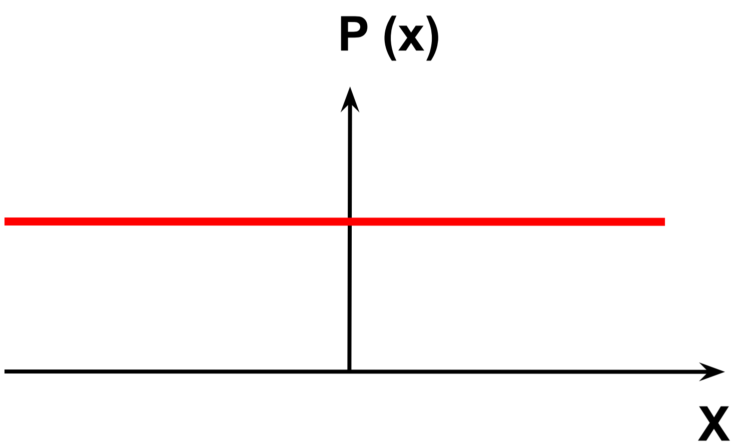
Амплитудная функция **Вероятностная функция**

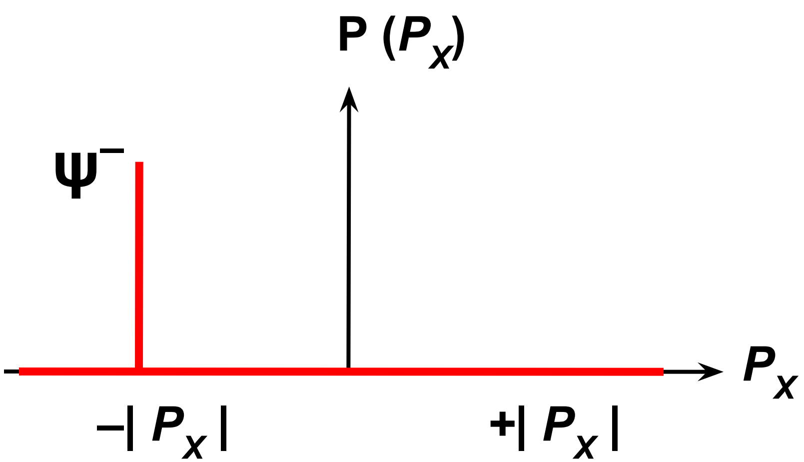




Пространственные функции распределения

Импульсные функции распределения





Наблюдаемые X (координата) и P_X (импульс) связаны между собой соотношением неопределенности Гейзенберга:

если величина одной из них известна точно

$$\boldsymbol{P_X} = +|P_X| \quad \text{или} \quad \boldsymbol{P_X} = -|P_X|$$

то величина второй становится неопределенной:

$$\boldsymbol{X} = ???$$

(**при измерении X может быть обнаружено с равной вероятностью любое допустимое значение** X_i)

Суперпозиционные состояния

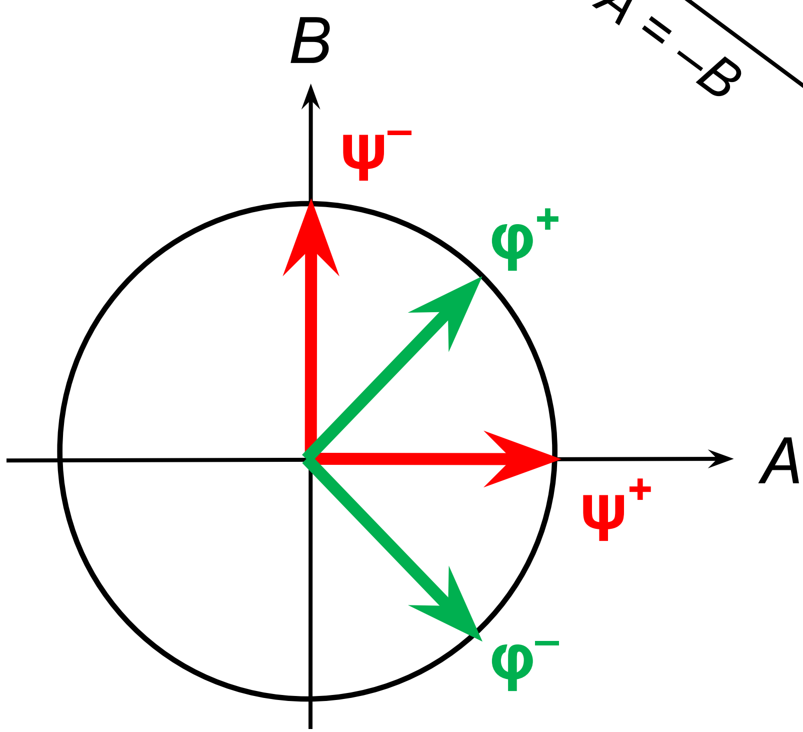
$$\psi(x) = A \cdot e^{\mathbf{i}kx} + B \cdot e^{-\mathbf{i}kx}$$

$A = B$

$A = -B$

$$\varphi^{+} = e^{\mathbf{i}kx} + e^{-\mathbf{i}kx}$$

$$\varphi^{-} = e^{\mathbf{i}kx} - e^{-\mathbf{i}kx}$$

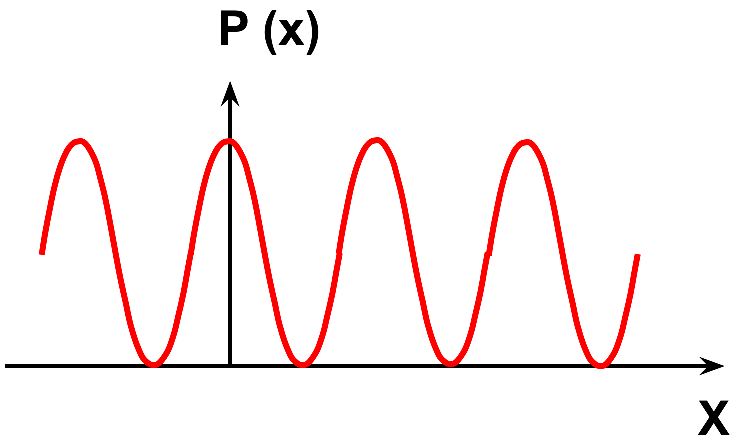


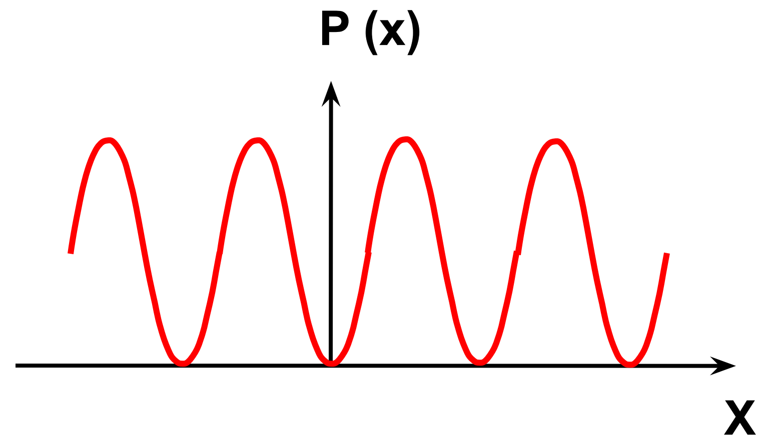
$$\varphi^{+} = \cos(kx)$$

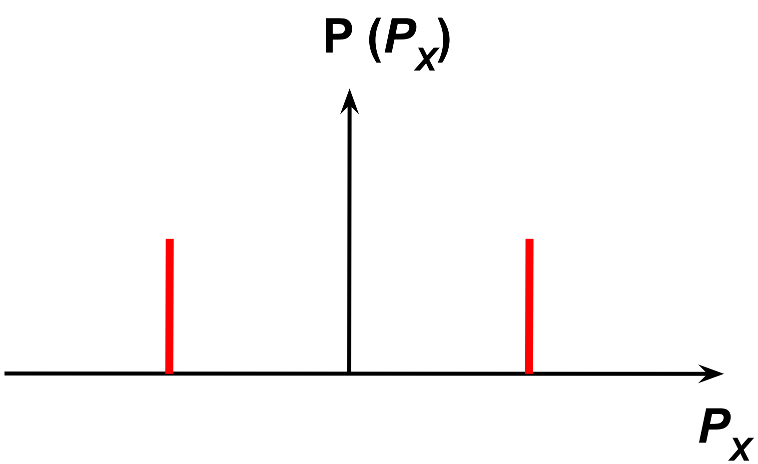
$$\varphi^{-} = \mathbf{i} \cdot \sin(kx)$$

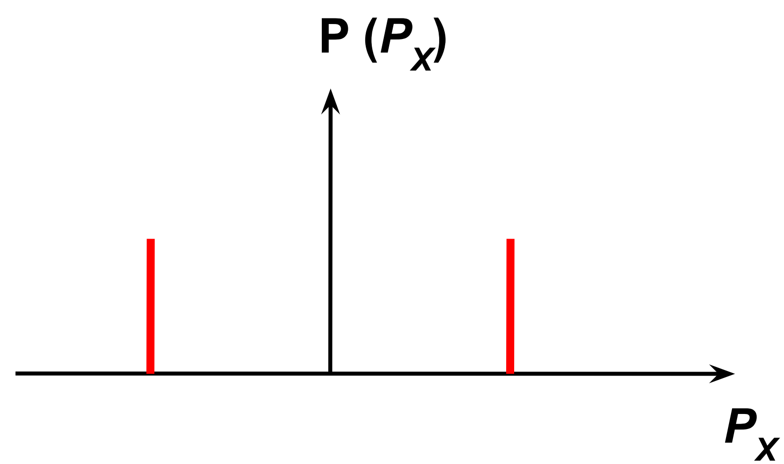
$$\varphi^{+} = \cos(kx)$$

$$\varphi^{-} = \mathbf{i} \cdot \sin(kx)$$

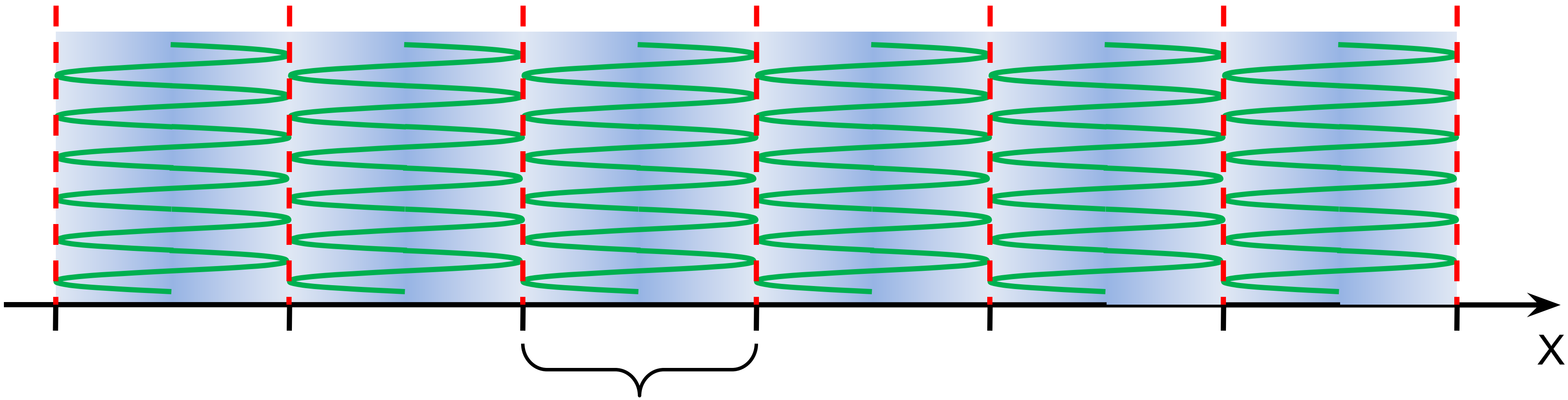








Узловые поверхности



$$\Delta X = \pi / k = \pi\hbar / P_x$$

Если $P_x = 1$ н · с, то $\Delta X \approx 10^{-34}$ м

Волновой характер не проявляется («классическое» поведение)

Если $P_x = 10^{-34}$ н · с, то $\Delta X \approx 1$ м

Волновой характер ясно виден («квантовое» поведение)