

Некоторые вопросы квантовой механики

Основы квантовой механики : метод. указания к практ. занятиям и самостоят. работе студентов / Минобрнауки России, ОмГТУ ; [сост.: И. И. Гончар, М. В. Чушнякова]. – Омск : Изд-во ОмГТУ, 2017.

Почти всю информацию об окружающем мире мы получаем с помощью волн. Это электромагнитные волны субмикрометрового диапазона (так называемый видимый свет), радиоволны, звуковые волны. Волна – это распространяющиеся в пространстве колебания, которые переносят энергию без заметного переноса вещества. Как известно, одна из четырёх базовых идей физики состоит в том, что с каждой частицей связан волновой вероятностный процесс. Поэтому представляется необходимым привести краткие сведения о волнах, известные из курса общей физики.

Уравнение плоской монохроматической волны, распространяющейся (бегущей) в положительном направлении оси x , имеет вид

$$\xi(x, t) = \xi_m \cos(\omega t - kx). \quad (1.1)$$

Легко видеть, что волновое число k играет по отношению к пространству ту же роль, что частота ω по отношению ко времени. Поэтому и формулы, связывающие частоту с периодом, а волновое число – с длиной волны λ , так похожи друг на друга:

$$\omega = 2\pi/T ; \quad (1.2)$$

Т.е. распространение в пространстве по x

$$k = 2\pi/\lambda. \quad (1.3)$$

Излучением называется такой вид материи, который состоит из частиц, масса покоя которых равна нулю. В жизни нам приходится сталкиваться только с электромагнитным излучением. Оно испускается квантами (порциями), поглощается квантами и распространяется в виде квантов. Эти кванты названы фотонами. Фотоны во многом похожи на обычные частицы, например электроны. Как и электрон, фотон обладает энергией W_Φ , импульсом $\vec{p}_\Phi$ и собственным моментом импульса (спином) $\vec{L}_{S\Phi}$.

С любой частицей связан вероятностный волновой процесс. Характеристики волны, отвечающей этому процессу, связаны с корпускулярными характеристиками соответствующих частиц. Основные характеристики волны – это её длина λ и период T . С ними связаны основные корпускулярные характеристики частицы – импульс p и энергия W :

Т.е. распространение в пространстве	→	$p = 2\pi\hbar/\lambda$;	(2.1)
-------------------------------------	---	---------------------------	-------

Из-за темпа колебаний во времени	→	$W = 2\pi\hbar/T$.	(2.2)
----------------------------------	---	---------------------	-------

где $\hbar = h/(2\pi)$, $\hbar = 1,054 \cdot 10^{-34}$ Дж·сек.

Впервые формулы (2.1) и (2.2) были получены для фотонов Максом Планком в 1900 г. Для частиц вещества эти формулы впервые использовал Луи де Бройль в 1925 г. Поэтому если формула (2.1) записана для частицы вещества, то входящую в неё длину волны называют дебройлевской.

Формулы (2.1) и (2.2) применимы как к веществу, так и к излучению. Однако связь импульса с энергией для частиц вещества и излучения различна:

$$W = p^2/(2m_0) ; \quad (2.3)$$

$$W = pc . \quad (2.4)$$

Формула (2.3) справедлива для медленно движущихся частиц вещества, а формула (2.4) – для фотонов. В отличие от многих привычных нам частиц (электрона, протона, нейтрона) фотон не имеет массы покоя и движется всё время с одной и той же скоростью $c = 2,998 \cdot 10^8$ м/сек относительно любой ИСО.

Отметим, что для частиц вещества применять формулу (2.3) можно только в том случае, когда скорость частицы и её кинетическая энергия малы ($v \ll c$, $W_k \ll m_0 c^2$).

СООТНОШЕНИЯ НЕОПРЕДЕЛЕННОСТЕЙ ГЕЙЗЕНБЕРГА

Классическая частица (материальная точка) движется по определенной траектории, так что в любой момент времени можно сколь угодно точно одновременно определить её координаты и импульс. Иными словами, в классической механике молчаливо предполагается, что погрешность определения координаты x , Δx , и погрешность определения проекции импульса на ось x , Δp_x , можно в принципе сделать сколь угодно малыми.

...НО

Степень пригодности этих понятий для описания движения микрочастиц определяется соотношениями неопределенностей Гейзенберга: микрочастица не может иметь одновременно и определенную координату (x, y, z), и определенную соответствующую проекцию импульса (p_x, p_y, p_z), причем неопределенности этих величин удовлетворяют следующим условиям:

$$\Delta x \Delta p_x \geq 2\pi\hbar ; \quad (4.1)$$

$$\Delta y \Delta p_y \geq 2\pi\hbar ; \quad (4.2)$$

$$\Delta z \Delta p_z \geq 2\pi\hbar . \quad (4.3)$$

Полная квантовая теория приводит к выводу о том, что соотношение неопределенностей имеет место также для энергии W и времени t :

$$\Delta W \Delta t \geq 2\pi\hbar , \quad (4.4)$$

где ΔW – неопределенность значения энергии некоторого состояния системы; Δt – промежуток времени, в течение которого система находится в этом состоянии. Например, если Δt – среднее время жизни атома в возбужденном состоянии, то ΔW – ширина соответствующего энергетического уровня.

ВОЛНОВАЯ ФУНКЦИЯ И ЕЕ СТАТИСТИЧЕСКИЙ СМЫСЛ

Как уже упоминалось, с каждой квантовой частицей связан волновой вероятностный процесс. Наиболее полной количественной характеристикой этого волнового вероятностного процесса является так называемая волновая функция $\Psi(x, y, z, t)$ (другое её название – амплитуда вероятности). Квадрат модуля волновой функции имеет смысл плотности вероятности найти частицу в момент времени t в точке с координатами x, y, z :

$$|\Psi(x, y, z, t)|^2 = \frac{d\Pi}{dV} , \quad (5.1)$$

где $d\Pi$ – вероятность обнаружить частицу в момент времени t в объеме $dV = dx dy dz$ в окрестности точки с координатами x, y, z .

Волновая функция (амплитуда вероятности) всегда является комплексной, поэтому знак модуля в формуле (5.1) играет существенную роль. В отличие от классической механики квантовое описание движения частицы имеет статистический, вероятностный характер.

Вероятность найти частицу в момент времени t в объеме V :

$$\Pi = \int_V d\Pi = \int_V |\Psi(x, y, z, t)|^2 dV . \quad (5.2)$$

Если частица реально существует, вероятность найти ее в какой-либо точке пространства представляет собой вероятность достоверного события, равную 1:

$$\int_{\substack{\text{по всему} \\ \text{пространству}}} |\Psi(x, y, z, t)|^2 dV = 1 . \quad (5.3)$$

Уравнение (5.3) представляет собой условие нормировки волновой функции.

В случае одномерного движения, например вдоль оси Ox , формула (5.1) принимает вид

$$|\Psi(x, t)|^2 = \frac{d\Pi}{dx} . \quad (5.4)$$

Вероятность обнаружить частицу в интервале от x_1 до x_2 :

$$\Pi = \int_{x_1}^{x_2} d\Pi = \int_{x_1}^{x_2} |\Psi(x, t)|^2 dx . \quad (5.5)$$

Условие нормировки (5.3) в случае одномерного движения имеет вид

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x, t)|^2 dx = 1 . \quad (5.6)$$

УРАВНЕНИЕ ШРЕДИНГЕРА

Основное уравнение нерелятивистской квантовой механики (уравнение Шредингера (УШ)) было получено Э. Шредингером в 1926 г.

В качестве неизвестной в нем выступает волновая функция, о которой шла речь в предыдущем разделе. УШ, которое играет в квантовой механике ту же роль, что и второй закон Ньютона в классической механике, имеет вид

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi + W_p(x, y, z, t)\Psi = i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}, \quad (6.1)$$

где $W_p(x, y, z, t)$ – потенциальная энергия частицы; $\Psi = \Psi(x, y, z, t)$ – волновая функция; $\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$ – оператор Лапласа.

УШ является линейным однородным дифференциальным уравнением в частных производных относительно Ψ . Оно, как и все основные уравнения физики (уравнения Ньютона, Максвелла), не может быть выведено теоретически из других уравнений, а появляется как обобщение огромного числа экспериментальных данных. Правильность уравнения Шредингера подтверждается тем, что полученные с его помощью результаты согласуются с опытом.

В общем случае потенциальная энергия частицы зависит от времени: $W_p = W_p(x, y, z, t)$. Однако для большого числа физических явлений, происходящих в микромире, силовые поля, определяющие потенциальную энергию частицы, являются стационарными: $W_p = W_p(x, y, z)$. В этом случае УШ (6.1) можно упростить и прийти к так называемому стационарному УШ:

$$\Delta\Phi + \frac{2m}{\hbar^2}(W - W_p)\Phi = 0, \quad (6.2)$$

где W – полная энергия частицы, а волновые функции $\Psi(x, y, z, t)$ и $\Phi(x, y, z)$ связаны соотношением

$$\Psi(x, y, z, t) = \Phi(x, y, z) \exp\left(-\frac{iWt}{\hbar}\right). \quad (6.3)$$

// Т.е. в стационарном случае решение ищется в виде (6.3): можно его подставить в (6.1) и получить (6.2), причем $\exp(-iWt/\hbar)$ везде останется множителем не равным нулю. Поэтому на него можно сократить и останется именно (6.2), отделяющее ПРОСТРАНСТВЕННУЮ зависимость волновой функции, а временная зависимость как раз выражается множителем $\exp(-iWt/\hbar)$. //

Решение ищется НЕ при любых значениях параметра W , а лишь при определенном их наборе, характерном для данной задачи. Эти значения полной энергии частицы W называются собственными значениями, а соответствующие им решения – собственными функциями. Собственные значения W могут образовывать как непрерывный, так и дискретный спектр.

ДВИЖЕНИЕ СВОБОДНОЙ ЧАСТИЦЫ

Движению любой частицы в квантовой механике соответствует волновой вероятностный процесс. Если движение частицы ничем не ограничено (инфинитно), то ему соответствует бегущая волна де Бройля. К инфинитному близко движение электронов в кинескопах телевизоров и осциллографов XX в. Самый простой случай инфинитного движения – движение свободной частицы, которая движется в отсутствие внешних полей.

Пусть частица движется вдоль оси x . Так как внешние силы на нее не действуют, потенциальную энергию частицы можно принять равной нулю. Тогда полная энергия частицы равна ее кинетической энергии. Вспоминая, что волновое число связано с кинетической энергией соотношением

$$\frac{2m}{\hbar^2} W_k = k^2, \quad (7.1)$$

получаем стационарное УШ в виде

$$\frac{d^2 \Phi}{dx^2} + k^2 \Phi = 0. \quad (7.2)$$

...

Это уравнение по структуре совпадает с дифференциальным уравнением свободных колебаний. Одно из возможных решений имеет вид

$$\Phi = \Phi_0 \exp(ikx). \quad (7.3)$$

Это решение имеет место для любых вещественных значений k . Тогда, как видно из формулы (7.1), кинетическая энергия W_k тоже может принимать любые значения, т. е. энергетический спектр свободной частицы является непрерывным.

Результирующее выражение для волновой функции $\Psi(x, t)$ с учетом того, что $k = p_x/\hbar$, имеет вид

$$\Psi(x, t) = \psi_0 \exp\left(\frac{ip_x x - iWt}{\hbar}\right). \quad (7.4)$$

Плотность вероятности обнаружить свободную частицу в данной точке пространства $|\Psi|^2$ не зависит от времени, т. е. все положения свободной частицы являются равновероятными.

ОДНОМЕРНЫЙ ГАРМОНИЧЕСКИЙ ОСЦИЛЛЯТОР

Гармонический осциллятор – система, совершающая одномерное движение под действием квазиупругой силы. Подобным образом движутся атомы в молекуле или молекулы вблизи узлов кристаллической решетки. Потенциальная энергия гармонического осциллятора

$$W_p = \frac{m\omega^2 x^2}{2}, \quad (10.1)$$

где m – обобщенная масса осциллятора; ω – собственная частота гармонического осциллятора.

С учетом выражения (10.1) стационарное УШ принимает вид

$$\frac{d^2\Phi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left(W - \frac{m\omega^2 x^2}{2} \right) \Phi = 0. \quad (10.2)$$

от амплитуды вероятности требуется, чтобы она стремилась к нулю при стремлении x к $\pm\infty$. Решение стационарного УШ ищут в виде полинома,

умноженного на экспоненту, которая убывает при стремлении x к $\pm\infty$. В результате получается

$$\Phi_n(x) = \alpha_n H_n(\xi) \exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right), \quad (10.3)$$

где

$$\xi = x \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}; \alpha_n = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \left(\frac{m\omega}{\pi \hbar} \right)^{1/4}; \quad (10.4)$$

$$H_n(\xi) = (-1)^n \exp(\xi^2) \frac{d^n}{d\xi^n} \exp(-\xi^2). \quad (10.5)$$

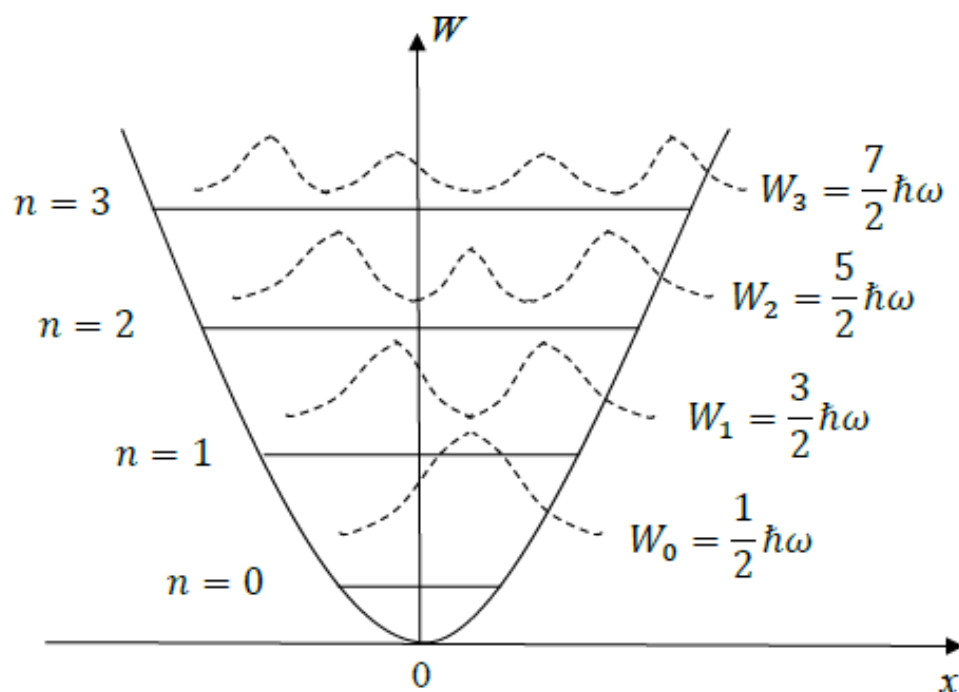
Функции $H_n(\xi)$ называются полиномами Эрмита. При решении стационарного УШ коэффициент при старшей степени в каждом полиноме Эрмита $H_n(\xi)$ (ещё до нормировки) можно выбирать произвольно. Он выбирается равным 2^n , а коэффициент α_n получается потом из условия нормировки.

Собственные значения энергии квантового гармонического осциллятора

$$W_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega, n = 0, 1, 2, \dots \quad (10.6)$$

Из формулы (10.6) видно, что энергетический спектр квантового гармонического осциллятора дискретен. (Энергетический спектр классического гармонического осциллятора является непрерывным.)

Состояния с $n > 0$ являются возбужденными. Для переходов между уровнями энергии гармонического осциллятора выполняется правило отбора $\Delta n = \pm 1$. Такие переходы называются разрешенными, а все остальные – запрещенными. Запрещенные переходы на самом деле происходят, но их вероятность очень мала.



Плотности вероятностей и уровни энергии для гармонического осциллятора

Снова об этом...

Мартинсон, Л. К.

М29 Квантовая физика : учебное пособие / Л. К. Мартинсон, Е. В. Смирнов. — 5-е изд., испр. — Москва : Издательство МГТУ им. Н. Э. Баумана, 2021. — 527, [1] с. : ил. (Серия «Физика в техническом университете» ; науч. ред. Л. К. Мартинсон, А. Н. Морозов).

Уравнение Шредингера

Как, зная структуру силового поля, в котором движется частица, определить волновую функцию, описывающую квантовомеханическое состояние этой частицы? Как, зная волновую функцию в начальный момент времени, описать эволюцию волновой функции во времени? Ответы на эти вопросы дает основное уравнение нерелятивистской квантовой механики, сформулированное Э. Шредингером в 1926 г.

Общее *временное уравнение Шредингера* позволяет определить в любой момент времени волновую функцию Ψ для частицы массой m_0 , движущейся в силовом поле $\vec{F} = -\text{grad}U$, описываемом скалярной потенциальной функцией $U(x, y, z, t)$. Это уравнение имеет вид

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \Delta \Psi + U\Psi. \quad (3.8)$$

Гамильтониан

Здесь $i = \sqrt{-1}$ — мнимая единица, а $\hbar$ — рационализированная постоянная Планка. Стандартным символом Δ в (3.8) обозначен дифференциальный оператор Лапласа, который в декартовой прямоугольной системе координат определяется следующим образом:

$$\Delta \equiv \nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}. \quad (3.9)$$

Уравнение Шредингера тесно связано с гипотезой де Бройля и вытекающим из нее корпускулярно-волновым дуализмом материи. Действительно, легко убедиться, что для свободной частицы, с кинетической энергией $E = \frac{p^2}{2m_0}$, движущейся в отсутствие силовых полей ($U = 0$, $\vec{F} = 0$) в направлении оси x , решением соответствующего уравнения Шредингера

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} \quad (3.10)$$

является волновая функция

$$\Psi(x, t) = A \exp \left[-\frac{i}{\hbar} (Et - px) \right], \quad (3.11)$$

соответствующая плоской волне де Бройля. Этот факт позволяет утверждать, что и в общем случае уравнение Шредингера, описывающее движение микрочастицы, имеет волновые решения.

Представление физических величин операторами

Как, зная волновую функцию, предсказать результат измерения какой-либо физической величины у частицы, находящейся в рассматриваемом квантовом состоянии? Для получения информации о физических величинах, связанных с движущейся частицей, в квантовой механике разработан специальный математический аппарат, в котором используют операторы физических величин и результаты их действия на волновые функции.

В работах М. Борна, П. Дирака и других ученых был сформулирован *второй постулат квантовой механики*, утверждающий, что каждой физической величине соответствует определенный оператор этой физической величины. При этом соотношения между операторами в квантовой механике имеют ту же структуру, что и соотношения между соответствующими им физическими величинами в классической механике.

Для расшифровки этого постулата дадим некоторые пояснения. Оператор — это математическое правило, следуя которому мы можем преобразовать одну функцию в другую. Задать оператор — значит определить рецепт этого преобразования. Такое преобразование может быть простым умножением исходной функции на число или известную функцию, дифференцированием функции, перестановкой аргументов функции и др.

В квантовой механике в качестве символа соответствующего оператора используется классическое обозначение физической величины со “шляпкой” над буквой в виде значка “^”. Например, $\hat{x}$ — это оператор координаты x , $\hat{p}_x$ — оператор проекции импульса на ось x , $\hat{U}$ — оператор потенциальной энергии и т. д. Оператор предполагается действующим на написанную за ним функцию. В качестве таких функций в квантовой механике выступают волновые функции. При этом равенство двух функций $\hat{A}\Psi = \hat{B}\Psi$ в операторной форме будет записываться как равенство операторов: $\hat{A} = \hat{B}$.

Определим операторы основных физических величин в квантовой механике.

1. *Оператор координаты.* Действие этого оператора на волновую функцию сводится к умножению ее на соответствующую координату, т. е.

$$\hat{x}\Psi = x\Psi, \quad \hat{y}\Psi = y\Psi, \quad \hat{z}\Psi = z\Psi. \quad (3.27)$$

$$\hat{x} = x, \quad \hat{y} = y, \quad \hat{z} = z. \quad (3.28)$$

Объединяя эти формулы, можно ввести векторный оператор $\hat{\vec{r}}$, соответствующий радиус-вектору $\vec{r}$ в классической механике. Такой оператор формально рассматривается как некоторый вектор, имеющий в качестве компонент в декартовой прямоугольной системе координат операторы $\hat{x}$, $\hat{y}$, $\hat{z}$. Поэтому

$$\hat{\vec{r}} = \vec{e}_x \hat{x} + \vec{e}_y \hat{y} + \vec{e}_z \hat{z}. \quad (3.29)$$

Здесь $\vec{e}_x$, $\vec{e}_y$, $\vec{e}_z$ — единичные орты координатных осей.

2. *Оператор импульса.* С помощью операций дифференцирования по координатам определим операторы проекций импульса, записав эти определения в символической операторной форме:

импульс

$$\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}, \quad \hat{p}_y = -i\hbar \frac{\partial}{\partial y}, \quad \hat{p}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial z}. \quad (3.30)$$

Все эти три формулы можно объединить в одну, введя векторный оператор импульса $\hat{\vec{p}} = \vec{e}_x \hat{p}_x + \vec{e}_y \hat{p}_y + \vec{e}_z \hat{p}_z$, который с учетом (3.30) запишем как

$$\hat{\vec{p}} = -i\hbar \nabla. \quad (3.31)$$

определим оператор квадрата импульса

$$\hat{p}^2 = (\hat{p}_x)^2 + (\hat{p}_y)^2 + (\hat{p}_z)^2 = -\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right). \quad (3.32)$$

Используя символ оператора Лапласа, представим (3.32) в более компактном виде:

$$\hat{p}^2 = -\hbar^2 \Delta. \quad (3.33)$$

3. *Оператор момента импульса.* Согласно формуле классической механики, определяющей момент импульса частицы как вектор $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$, запишем выражения для его проекций на координатные оси:

$$L_x = yp_z - zp_y, \quad L_y = zp_x - xp_z, \quad L_z = xp_y - yp_x.$$

Эти соотношения превратим в операторные, определяющие операторы проекций момента импульса:

$$\begin{aligned} \hat{L}_x &= \hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y = -i\hbar \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right), \\ \hat{L}_y &= \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z = -i\hbar \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right), \\ \hat{L}_z &= \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x = -i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right). \end{aligned} \quad (3.34)$$

Оператор квадрата момента импульса можно построить по правилу

$$\hat{L}^2 = \hat{L}_x \hat{L}_x + \hat{L}_y \hat{L}_y + \hat{L}_z \hat{L}_z. \quad (3.35)$$

4. *Операторы энергий.* Классическая формула связи кинетической энергии частицы с квадратом ее импульса $E_k = p^2 / (2m_0)$ позволяет записать аналогичное соотношение между соответствующими операторами. Поэтому

$$\hat{E}_k = \frac{\hat{p}^2}{2m_0} = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \Delta. \quad (3.37)$$

Если частица движется в стационарном силовом поле и ее потенциальная энергия $U = U(x, y, z)$ определена в любой точке пространства, то оператор потенциальной энергии $\hat{U}$ определяется как оператор умножения на функцию U , т. е.

$$\hat{U}\Psi = U \cdot \Psi \quad \text{или} \quad \hat{U} = U. \quad (3.38)$$

Так как полная энергия частицы в классической механике есть сумма кинетической и потенциальной энергий, то в квантовой механике оператор полной энергии $\hat{H}$ определяется как сумма операторов кинетической и потенциальной энергий. Поэтому

$$\hat{H} = \hat{E}_k + \hat{U} = \frac{\hat{p}^2}{2m_0} + U.$$

Подставляя выражение для оператора квадрата импульса из формулы (3.33), запишем оператор полной энергии как

Гамильтониан

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \Delta + U(x, y, z). \quad (3.39)$$

В классической механике полную энергию частицы, выраженную через ее координаты и импульс, называют функцией Гамильтона. Поэтому в квантовой механике оператор полной энергии $\hat{H}$ называют оператором функции Гамильтона или просто *гамильтонианом*.

Гамильтониан $\hat{H}$ является основным оператором квантовой механики, поскольку, выбирая конкретный вид гамильтониана с учетом силового поля, действующего на частицу, мы формулируем на математическом языке все особенности квантовой системы. Поэтому и основное уравнение нерелятивистской квантовой механики — уравнение Шредингера (3.8) — может быть записано в операторной форме, содержащей гамильтониан $\hat{H}$:

[Структура уравнения Шредингера](#)

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H} \Psi. \quad (3.40)$$

Заметим, что формула (3.39) определяет гамильтониан квантовой системы и в том случае, когда силовое поле является нестационарным, т. е. $U = U(x, y, z, t)$, а $\vec{F} = -\text{grad } U$.

Собственные функции и собственные значения операторов

Основные свойства собственных функций. Значения, которые может принимать данная физическая величина f , называют в квантовой механике ее собственными значениями. Нахождение таких значений тесно связано с математической задачей определения собственных функций и соответствующих им собственных значений оператора $\hat{F}$.

Если при действии оператора на некоторую функцию получается та же самая функция, умноженная на число, т. е. если

$$\hat{F}\Psi = f\Psi, \quad (3.43)$$

то такую функцию называют собственной функцией оператора $\hat{F}$, а число f — его собственным значением.

Спектры собственных значений квантово-механических операторов. Физическое содержание проблемы нахождения собственных значений квантово-механических операторов, которое будет рассмотрено в 3.6, обуславливает принципиально важную роль в квантовой механике этой на первый взгляд чисто математической задачи.

Рассмотрим несколько таких задач о нахождении спектров собственных значений операторов.

1. Спектр собственных значений оператора координаты $\hat{x}$ непрерывен. В самом деле, так как действие этого оператора на волновую функцию сводится к умножению ее на координату x , то уравнение задачи на собственные значения оператора $\hat{x}$, имеющее вид

$$\hat{x}\Psi = x\Psi, \quad (3.60)$$

соответствует операторному равенству $\hat{x} = x$, которое, по определению, выполняется для любого значения $x \in (-\infty, +\infty)$. Аналогичные выводы получаем для операторов $\hat{y}$ и $\hat{z}$.

2. Спектр оператора проекции импульса $\hat{p}_x$ также является непрерывным спектром. Действительно, задача на собственные значения такого оператора сводится к решению дифференциального уравнения первого порядка

$$-i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial x} = p_x \Psi, \quad (3.61)$$

из которого следует определить возможные значения p_x .

Решение уравнения (3.61)

$$\Psi = C \exp\left(i \frac{p_x x}{\hbar}\right) \quad (3.62)$$

при всех действительных значениях p_x определяет функцию Ψ , удовлетворяющую всем стандартным условиям регулярности. Поэтому собственные значения оператора $\hat{p}_x$ образуют непрерывный спектр от $-\infty$ до $+\infty$. Такой же вывод относится к собственным значениям операторов $\hat{p}_y$ и $\hat{p}_z$.

...

3.6. Измерения физических величин в квантовых системах

Пусть известна волновая функция, описывающая состояние частицы в квантовой системе. Каков будет результат измерения физической величины f в этой системе? Как рассчитать и предсказать результаты эксперимента по определению значений этой физической величины? Ответ на эти вопросы о результатах измерений физических величин дает *третий постулат квантовой меха-*

ники, утверждающий, что в результате измерения физической величины f в любой квантовой системе могут быть получены только такие значения, которые являются собственными значениями оператора $\hat{F}$, соответствующего этой величине.

Этот важный постулат квантовой механики устанавливает связь между теорией и возможностью ее экспериментальной проверки. Математический аппарат теории, в котором физические величины представлены операторами, позволяет предсказать результаты измерений физических величин в различных квантовых системах. Эти выводы теории могут быть проверены экспериментально.

Опять про уравнение Шредингера....

Опять про уравнение Шредингера....:

уравнение Шредингера:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \Delta \Psi + U \Psi.$$

Гамильтониан:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \Delta + U(x, y, z).$$

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

Что это такое?

Для классической механической системы имеется уравнение Гамильтона-Якоби

Уравнение Гамильтона-Якоби

Пусть $H(q_i, p_i, t)$ - функция Гамильтона механической системы с n степенями свободы. В начале XIX века немецким математиком Карлом Якоби было установлено, что интегрирование уравнений движения в канонической форме

$$\frac{dq_i}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_i}, \quad \frac{dp_i}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q_i}, \quad i = \overline{1, n} \quad (1)$$

тесно связано с интегрированием следующего уравнения в частных производных:

$$\frac{\partial S}{\partial t} + H(q_i, \frac{\partial S}{\partial q_i}, t) = 0. \quad (2)$$

Уравнение (2) называют *уравнением Гамильтона-Якоби*. Оно получено подстановкой производных $\frac{\partial S}{\partial q_i}$ вместо обобщенных импульсов p_i в выражение для гамильтониана $H(q_i, p_i, t)$ с последующим его суммированием с производной $\frac{\partial S}{\partial t}$.

Уравнение Гамильтона-Якоби.

«Теорема Якоби сводит решение системы обыкновенных дифференциальных уравнений к отысканию полного интеграла уравнения в частных производных. Может показаться удивительным, что такое сведение более простого к более сложному доставляет эффективный метод решения конкретных задач. Между тем оказывается, что это – самый сильный из существующих методов точного интегрирования, и многие задачи, решенные Якоби, вообще не поддаются решению другими методами».

В.И.Арнольд

ГАМИЛЬТОНА – ЯКОБИ УРАВНЕНИЕ, дифференциальное уравнение в частных производных 1-го порядка, к интегрированию которого сводится решение уравнений движения голономной консервативной механич. системы, представленных в форме Гамильтона уравнений. Г. – Я. у. имеет вид

$$\frac{\partial S}{\partial t} + H(t, q_1, \dots, q_n, \frac{\partial S}{\partial q_1}, \dots, \frac{\partial S}{\partial q_n}) = 0,$$

где S – неизвестная функция времени t и обобщённых координат $q_1, \dots, q_n$, называемая действием, $H = H(t, q_i, p_i)$ – Гамильтона функция, $p_1, \dots, p_n$ – обобщённые импульсы, n – число степеней свободы системы.

Согласно теореме Якоби, полный интеграл Г. – Я. у., т. е. решение $S(t, q_i, a_i)$ этого уравнения, зависящее от n произвольных постоянных $a_1, \dots, a_n$ и удовлетворяющее условию $\det([\delta^2 S]/[\delta q_i \delta a_i]) \neq 0$, позволяет получить общее решение уравнений Гамильтона в виде

$$q_i = q_i(t, a_j, b_j), p_i = p_i(t, a_j, b_j)$$

из соотношений

$$p_i = \frac{\partial S}{\partial q_i}, b_i = \frac{\partial S}{\partial a_i} (i = 1, \dots, n),$$

где $b_1, \dots, b_n$ – произвольные постоянные.

Если функция Гамильтона H не зависит от времени, то уравнения Гамильтона допускают интеграл энергии $H = h = a_1$ и функцию S можно искать в виде $S = -ht + W(q_i, a_2, \dots, a_n)$, где функция W удовлетворяет уравнению

$$H(q_1, \dots, \frac{\partial W}{\partial q_1}, \dots, \frac{\partial W}{\partial q_n}) = h.$$

Интегрирование Г. – Я. у. – удобный способ решения мн. задач геометрии и теоретич. физики, особенно механики, оптики и квантовой механики. Это уравнение нашло также применение в задачах оптимального управления.

Уравнение Шредингера ↔ Уравнение Гамильтона-Якоби.