

Постулаты квантовой механики

1. Наблюдаемой величине A ставится в соответствие оператор \hat{A} , причем измеряемые значения этой величины определяются уравнением на собственные значения

$$\hat{A}\varphi_a = a\varphi_a$$

2. Если измерение наблюдаемой величины дает значение a , то состояние системы сразу после измерения определяется собственной функцией, соответствующей этому собственному значению

$$\hat{A}\varphi_a = a\varphi_a$$

3. Состояние квантовой системы описывается волновой функцией $\Psi(x, t)$, причем средние значения любой наблюдаемой A вычисляются по формуле:

$$\langle A \rangle = \int \Psi^* \hat{A} \Psi dx$$

4. Волновая функция $\Psi(x, t)$ находится из уравнения Шредингера:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} = \hat{H} \Psi(x, t)$$

Операторы физических величин

координата

$$\hat{x} = x$$

импульс

$$\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$$

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

оператор Гамильтона

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

Момент
импульса

$$\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p} = \begin{vmatrix} \mathbf{e}_x & \mathbf{e}_y & \mathbf{e}_z \\ x & y & z \\ p_x & p_y & p_z \end{vmatrix}$$

$$\hat{L}_z = -i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right)$$

В сферических координатах

$$\hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}$$

Собственные функции оператора x

$$x\psi_{x'}(x) = x'\psi_{x'}(x)$$

$$\psi_{x'}(x) = \delta(x - x')$$

Условие нормировки

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_{x''}^*(x)\psi_{x'}(x)dx = \delta(x'' - x')$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x - x'')\delta(x - x')dx = \delta(x'' - x')$$

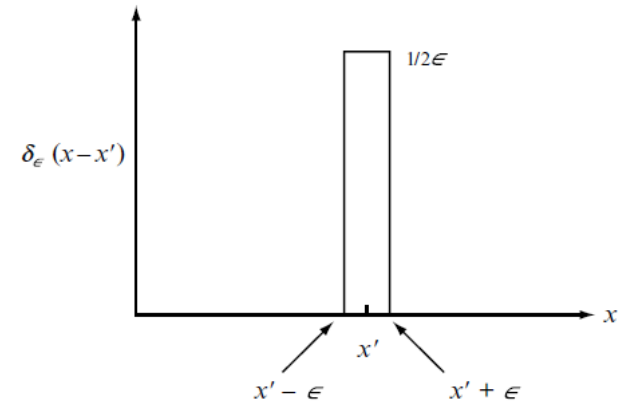
Свойства δ - функции Дирака

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x - x') dx = 1$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(x) \delta(x - x') dx = f(x')$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x - x'') \delta(x - x') dx = \delta(x'' - x')$$

$$\delta(x) = \delta(-x) \quad \delta(ax) = \frac{\delta(x)}{a}$$



**Представление
 δ - функции**

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{ikx} dk = 2\pi\delta(x)$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{ikx} dx = 2\pi\delta(k)$$

Собственные функции оператора импульса

$$\hat{p}_x \psi = -i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial x} = p \psi$$

$$\psi_p(x, t) = C(t) e^{\frac{i}{\hbar} px} = A e^{-\frac{i}{\hbar}(Et - px)} \quad \text{волна де Бройля}$$

$$\langle p \rangle = \int \psi_p(x, t)^* \hat{p} \psi_p(x, t) = p \int \psi_p(x)^* \psi_p(x) dx = p$$

$$\psi_p(x) = \sqrt{\frac{1}{L}} e^{\frac{i}{\hbar} px} \quad x \in (-L/2, L/2) \quad \text{Нормировка в "ящике"}$$

$$I = \int_{-L/2}^{L/2} \psi_{p'}(x)^* \psi_p(x) dx = \frac{1}{L} \int \exp\left\{\frac{i}{\hbar}(p - p')x\right\} dx = \frac{\sin(\Delta k L / 2)}{\Delta k L / 2}$$

$$\Delta k = (p - p') / \hbar \quad \Delta k = 0 \Rightarrow I = 1 \quad \Delta k \neq 0 \Rightarrow I = 0$$

Нормировка на δ -функцию $\int_{-\infty}^{+\infty} e^{i \frac{(p-p')}{\hbar} x} dx = 2\pi\hbar \delta\left(\frac{(p-p')}{\hbar}\right) = 2\pi\hbar \delta(p - p')$

Непрерывный спектр. Нормировка на δ -функцию

Разложение волновой функции по ортонормированному базису

Дискретный спектр

Непрерывный спектр (оператора импульса)

$$\psi(x) = \sum_n C_n \varphi_n(x)$$

$$C_n = \int \varphi_n^*(x) \psi(x) dx$$

$$\sum_n C_n^2 = 1$$

$$\int \varphi_n^* \varphi_m(x) dx = \delta_{nm}$$

$$P(n) = C_n^2$$

$$\psi(x) = \int C(p') \varphi_{p'}(x) dp'$$

$$C(p) = \int \varphi_p^*(x) \psi(x) dx$$

$$C(p) = \int dp' C(p') \int \varphi_p^* \varphi_{p'}(x) dx$$

$$\Rightarrow \int \varphi_p^* \varphi_{p'}(x) dx = \delta(p - p')$$

$$P(p, p + dp) = C(p)^2 dp$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{i \frac{(p-p')}{\hbar} x} dx = 2\pi\hbar \delta\left(\frac{(p-p')}{\hbar}\right) = 2\pi\hbar \delta(p - p')$$

$$\varphi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{i \frac{p}{\hbar} x}$$

$$\varphi_k(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ikx}$$

Вероятность n -го состояния

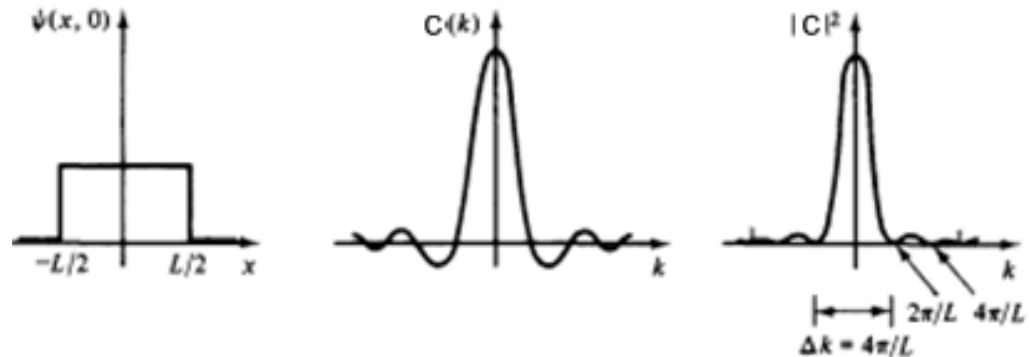
Волновая функция в x и p представлениях

$$\psi(x) = \int C(p) \varphi_p(x) dp \quad \text{Волновая функция в } x \text{ представлении}$$

$$C(p) = \int \psi(x) \varphi_p^*(x) dx \quad \text{Волновая функция в } p \text{ представлении}$$

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int C(p) e^{i\frac{p}{\hbar}x} dp$$

$$C(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \psi(x) e^{-i\frac{p}{\hbar}x} dx$$



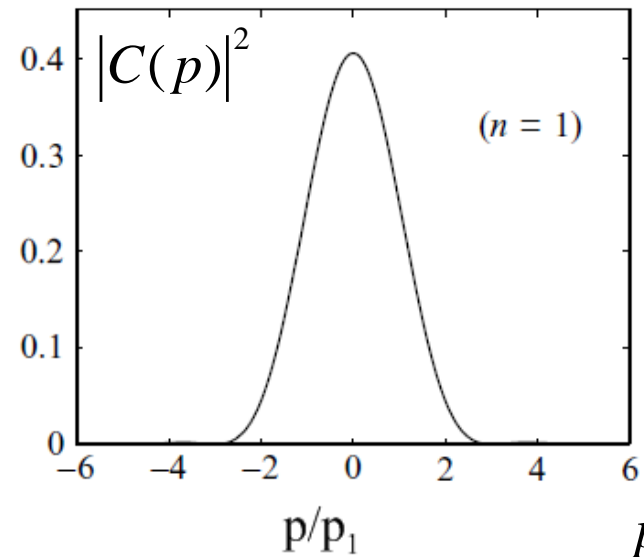
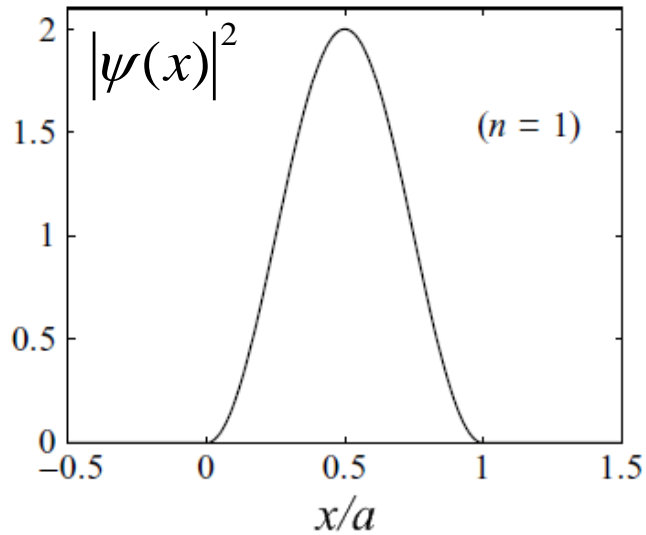
$$\Delta p = \hbar \Delta k = \frac{4\pi\hbar}{L}$$

$$\Delta x = L$$

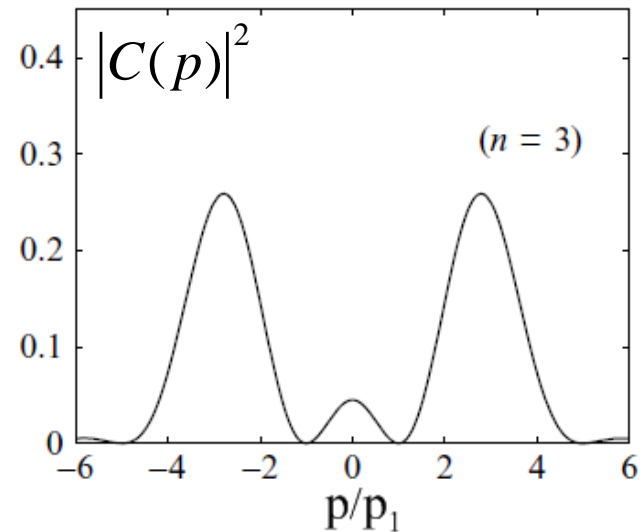
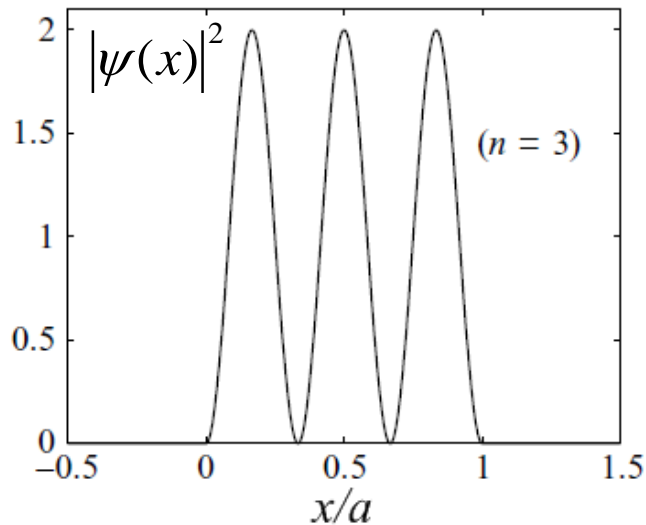
$$\Delta x \Delta p \simeq \hbar$$

$$\begin{aligned} \bar{C}(k) &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x, 0) \varphi_k^* dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x, 0) e^{-ikx} dx \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi L}} \int_{-L/2}^{+L/2} e^{-ikx} dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi L}} \frac{2}{k} \left(\frac{e^{ikL/2} - e^{-ikL/2}}{2i} \right) \\ &= \sqrt{\frac{2}{\pi L}} \frac{\sin(kL/2)}{k} \end{aligned}$$

Плотность вероятности в x и p представлениях



$$p_1 = \frac{\hbar\pi}{a}$$



Частица в яме шириной a . Координата и импульс нормированы.

Состояние, в котором физическая величина Q имеет определенное (точное) значение q , находится из уравнения на собственные значения

$$\hat{Q}\psi(x, t) = q\psi(x, t)$$

Дисперсия $\sigma^2 = \langle (\Delta Q)^2 \rangle = \langle (Q - \langle Q \rangle)^2 \rangle = \langle Q^2 \rangle - 2\langle Q \rangle \langle Q \rangle + \langle Q \rangle^2$

$$\sigma^2 = \langle Q^2 \rangle - \langle Q \rangle^2$$

В случае $\hat{Q}\psi(x, t) = q\psi(x, t)$

$$\langle Q \rangle = \int \psi^*(x, t) \hat{Q} \psi(x, t) dx = q \int \psi^*(x, t) \psi(x, t) dx = q$$

$$\langle Q^2 \rangle = \int \psi^*(x, t) \hat{Q} \hat{Q} \psi(x, t) dx = q^2 \int \psi^*(x, t) \psi(x, t) dx = q^2$$

Стандартное отклонение $\sigma = \sqrt{\sigma^2} = 0$ (нет разброса значений Q)

Совместные измерения

Две физические величины A и B могут быть измерены точно одновременно, если они коммутируют, т.е. их коммутатор

$$[\hat{A}, \hat{B}] \equiv \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} \quad \text{равен нулю.}$$

если $\hat{A}\psi = a\psi$ и $\hat{B}\psi = b\psi$

то $\hat{A}(\hat{B}\psi) = \hat{A}b\psi = b\hat{A}\psi = ba\psi$

$$\hat{B}(\hat{A}\psi) = \hat{B}a\psi = a\hat{B}\psi = ab\psi$$

т.е. $\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A}$ или $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$

Пример: $[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar \neq 0$ т.к. $\left\{ x(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}) - (-i\hbar \frac{\partial}{\partial x})x \right\} \psi = i\hbar \psi$

x и p_x не могут быть измерены точно одновременно (несовместны)

Пример: $[L_x, L_y] = i\hbar L_z$ $[L^2, L_z] = 0$

Совместны L^2
и одна из проекций (L_z)

Свойства коммутатора

$$[\hat{A}, \hat{B}] \equiv \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$$

$$[\hat{A}, a] = 0$$

$$[\hat{A}, a\hat{B}] = [a\hat{A}, \hat{B}] = a[\hat{A}, \hat{B}]$$

$$[\hat{A}, \hat{A}^2] = (\hat{A}\hat{A}^2 - \hat{A}^2\hat{A}) = (\hat{A}\hat{A}\hat{A} - \hat{A}\hat{A}\hat{A}) = 0 \quad \Rightarrow \quad [f(\hat{A}), \hat{A}] = 0$$

$$[\hat{x}, \hat{p}]g(x) = i\hbar\left(-x\frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x}x\right)g(x) = i\hbar\left(-x\frac{\partial g}{\partial x} + x\frac{\partial g}{\partial x} + g\right) = i\hbar g(x) \quad \Rightarrow \quad [\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$$

Пример: $[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar \neq 0$ т.к. $\left\{x(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}) - (-i\hbar\frac{\partial}{\partial x})x\right\}\psi = i\hbar\psi$

x и p_x не могут быть измерены точно одновременно (несовместны)

Пример: $[L_x, L_y] = i\hbar L_z$ $[L^2, L_z] = 0$

Совместны L^2
и одна из проекций (L_z)

Обозначения Дирака

$$\langle \psi | \varphi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) \varphi(x) dx \qquad \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \varphi dx < \infty$$

$$\langle \psi | a\varphi \rangle = a \langle \psi | \varphi \rangle$$

$$\langle a\psi | \varphi \rangle = a^* \langle \psi | \varphi \rangle$$

$$\langle \psi | \varphi \rangle^* = \langle \varphi | \psi \rangle$$

$$\langle \varphi + \psi | = \langle \psi | + \langle \varphi |$$

Эрмитов оператор: $(\langle \varphi | \hat{A} | \psi \rangle = \langle \varphi | (\hat{A} | \psi \rangle)) \Rightarrow \int (\hat{A}\varphi)^* \psi dx = \int \varphi^* (\hat{A}\psi) dx$

Пример: $\frac{\partial}{\partial x}$ эрмитов ? $\int (\frac{\partial}{\partial x} \varphi)^* \psi dx = - \int \varphi^* (\frac{\partial}{\partial x} \psi) dx$ **НЕТ!**

Обозначения Дирака

Состояние квантовой частицы может быть описано кет-вектором. Кет-векторы можно умножать на комплексные числа и складывать между собой, получая другие кет-векторы, т.е. кет-векторы образуют линейное пространство на поле комплексных чисел.

$$z_1 |a\rangle + z_2 |b\rangle = |c\rangle$$

Если кет-вектор, соответствующий некоторому состоянию, умножить на любое неравное нулю комплексное число, то полученный кет-вектор будет соответствовать тому же состоянию, т.е. **состояние определяется лишь направлением кет-вектора**, а длина, которую ему можно приписать, несущественна:

$$z_1 |a\rangle + z_2 |a\rangle = (z_1 + z_2) |a\rangle$$

Кет-вектору $|a\rangle$ можно сопоставить сопряженный ему бра-вектор $\langle a|$

Кет-вектор можно представить как вектор–столбец, координаты которого - комплексные числа. Тогда сопряженный ему бра-вектор будет вектор-строка, координаты которого равны комплексно-сопряженным координатам вектора кет, (для краткости будем считать, что размерность пространства равна двум):

$$|a\rangle = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} \quad \langle a| = (a_1^*, a_2^*) \quad \text{Тогда норма вектора (квадрат длины) будет определяться скалярным произведением:}$$

$$\langle a|a\rangle = (a_1^* a_1 + a_2^* a_2) \geq 0 \quad (\text{действительное число})$$

Эрмитовы операторы

Линейный оператор \hat{A} переводит кет в другой кет: $\hat{A}|a\rangle = |b\rangle$

Тогда, оператору \hat{A} будет соответствовать эрмитово-сопряженный оператор \hat{A}^+ , который действует на сопряженные векторы:

$$\langle a|\hat{A}^+ = \langle b|$$

Если $\hat{A}^+ = \hat{A}$, то оператор называется самосопряженным или эрмитовым.

Такие операторы имеют действительные собственные значения, а их собственные векторы ортогональны. Действительно, если $\hat{A}|\varphi_n\rangle = a_n|\varphi_n\rangle$,

то, если сначала подействовать на кет, получим $\langle\varphi_m|\hat{A}|\varphi_n\rangle = a_n\langle\varphi_m|\varphi_n\rangle$,

а если сначала подействовать на бра, то $\langle\varphi_m|\hat{A}|\varphi_n\rangle = a_m^*\langle\varphi_m|\varphi_n\rangle$. Вычитая,

имеем: $(a_n - a_m^*)\langle\varphi_m|\varphi_n\rangle = 0$, следовательно $a_n = a_n^*$, $\langle\varphi_m|\varphi_n\rangle = \delta_{nm}$.

Можно показать, что такой ортонормированный базис является полным, т.е. по нему можно разложить любой вектор.

Пусть $\langle n|m\rangle = \delta_{nm}$ ортонормированный базис. Тогда: $|a\rangle = \sum_n |n\rangle\langle n|a\rangle$

$$\langle m|\hat{A}|a\rangle = \sum_n \langle m|\hat{A}|n\rangle\langle n|a\rangle = \langle m|b\rangle \Rightarrow \sum_n A_{mn} a_n = b_m$$
$$\langle a|\hat{A}^+|m\rangle = \sum_n \langle a|n\rangle\langle n|\hat{A}^+|m\rangle = \langle b|m\rangle \Rightarrow \sum_n a_n^* A_{nm}^+ = b_m^*$$

$$A_{nm}^+ = A_{mn}^*$$

Зависимость средних от времени

$$\frac{d\langle A \rangle}{dt} = \frac{\partial \langle A \rangle}{\partial t} \quad \frac{d\langle \psi | \hat{A} \psi \rangle}{dt} = \int dx \frac{\partial}{\partial t} (\psi^* \hat{A} \psi)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\psi^* \hat{A} \psi) = \left(\frac{\partial \psi^*}{\partial t} \right) \hat{A} \psi + \psi^* \hat{A} \frac{\partial \psi}{\partial t} + \psi^* \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \psi \quad \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{-i\hat{H}}{\hbar} \psi, \quad \frac{\partial \psi^*}{\partial t} = \frac{i\hat{H}\psi^*}{\hbar}$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\psi^* \hat{A} \psi) = \frac{i}{\hbar} \left(\hat{H} \psi^* \hat{A} \psi - \psi^* \hat{A} \hat{H} \psi + \hbar \psi^* \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \psi \right)$$

$$\frac{d\langle \hat{A} \rangle}{dt} = \frac{i}{\hbar} \left(\langle \hat{H} \psi | \hat{A} \psi \rangle - \langle \psi | \hat{A} \hat{H} \psi \rangle + \hbar \left\langle \psi \left| \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \psi \right. \right\rangle \right)$$

$$\frac{d\langle A \rangle}{dt} = \left\langle \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{A}] + \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \right\rangle$$



$$\frac{d\langle A \rangle}{dt} = \frac{i}{\hbar} \langle [\hat{H}, \hat{A}] \rangle$$

$$\frac{d\langle x \rangle}{dt} = \frac{i}{\hbar} \langle [\hat{H}, \hat{x}] \rangle = \frac{i}{\hbar} \left\langle \left[\frac{\hat{p}^2}{2m}, \hat{x} \right] \right\rangle = \frac{i}{2m\hbar} \langle \hat{p}[\hat{p}, \hat{x}] + [\hat{p}, \hat{x}]\hat{p} \rangle = \frac{i}{2m\hbar} \langle -2i\hbar p \rangle = \left\langle \frac{p}{m} \right\rangle$$

$$[\hat{H}, \hat{p}] = i\hbar \frac{\partial V}{\partial x} \quad \longrightarrow \quad \frac{d\langle p \rangle}{dt} = - \langle \nabla V(x, y, z) \rangle = \langle \mathbf{F}(x, y, z) \rangle$$

Теорема Эренфеста

Уравнения
Гамильтона

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

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

$$\frac{dp}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial x}$$
$$\frac{dx}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p}$$

\Rightarrow

$$\frac{dp}{dt} = -\frac{\partial U}{\partial x}$$

$$\frac{dx}{dt} = \frac{p}{m}$$

$$\frac{d\langle p \rangle}{dt} = -\left\langle \frac{\partial U}{\partial x} \right\rangle$$

$$\frac{d\langle x \rangle}{dt} = \frac{\langle p \rangle}{m}$$

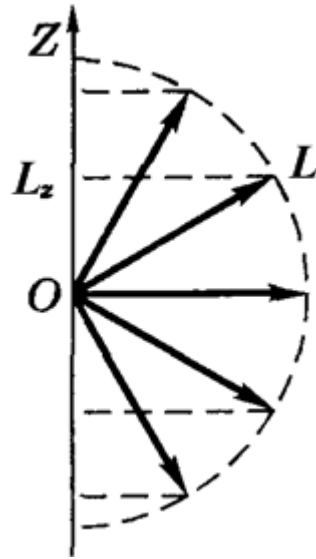
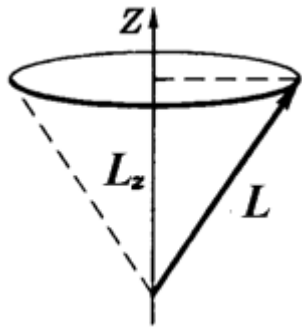
Средние значения квантовомеханических переменных удовлетворяют тем же уравнениям движения, что и соответствующие классические переменные, если волновая функция, для которой вычисляются средние,

$$\langle p \rangle = \int \psi^* \hat{p} \psi dx \quad \langle x \rangle = \int \psi^* \hat{x} \psi dx$$

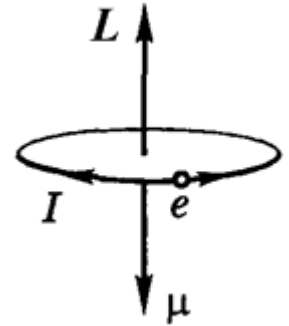
удовлетворяет уравнению Шредингера

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} = \hat{H} \psi(x,t)$$

Квантование момента импульса



$$\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p} = \begin{vmatrix} \mathbf{e}_x & \mathbf{e}_y & \mathbf{e}_z \\ x & y & z \\ p_x & p_y & p_z \end{vmatrix}$$



В центральном поле
L сохраняется

$$\frac{d\mathbf{L}}{dt} = \mathbf{r} \times \mathbf{F} = 0$$

$$[L^2, L_z] = 0$$

$$[L_z, L_x] = i\hbar L_y$$

$$[L_y, L_z] = i\hbar L_x$$

Совместны L^2 и L_z

Собственные значения L^2 $\hat{L}^2 \psi = L^2 \psi$

$$L^2 = l(l+1)\hbar^2, \quad l = 0, 1, 2, \dots$$

$$L = \hbar \sqrt{l(l+1)}$$

Вращательное движение

$$\hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}$$

$$x \rightarrow \varphi$$

$$p_x \rightarrow L_z$$

$$e^{i\frac{p_x}{\hbar}} \rightarrow e^{i\frac{L_z}{\hbar}\varphi}$$

Собственные значения L_z

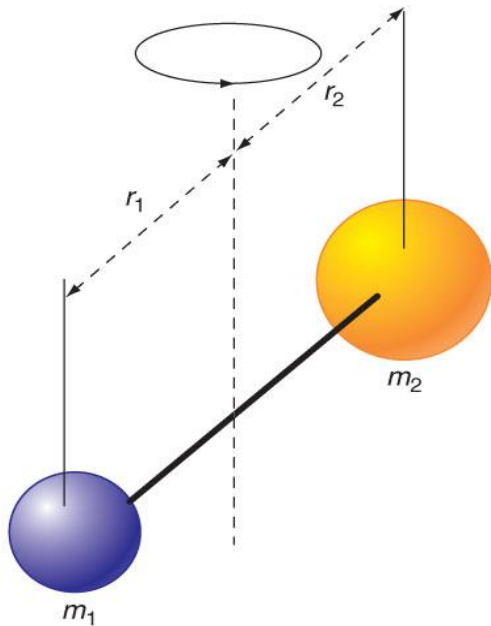
$$\psi = A e^{im\varphi} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{i\frac{L_z}{\hbar}\varphi}$$

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} \psi = L_z \psi$$

$$\psi(\varphi + 2\pi) = \psi(\varphi)$$

$$L_z = m\hbar, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

Ротатор



Момент инерции: $I = m_1 r_1^2 + m_2 r_2^2$

$$\hat{E}_{rot} = \frac{\hat{L}^2}{2I}$$

$$E_J = \frac{\hbar^2}{2I} J(J+1)$$

Правила отбора

$J = 0, 1, 2, \dots$ Вращательное квантовое число

$$\Delta J = \pm 1 \quad \Rightarrow \quad \omega = \frac{\hbar}{I} (J+1) = \omega_1 (J+1)$$

