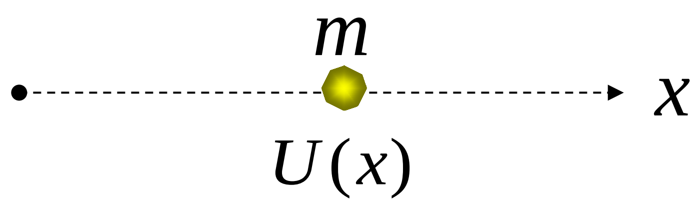
# Уравнение Шредингера

**Классическая механика**




**Квантовая механика**

**Уравнение Ньютона** $\quad x(t) \longrightarrow \Psi(x,t) \quad$ **Уравнение Шредингера**

$$\boxed{\frac{dp}{dt} = -\frac{dU}{dx}} \longrightarrow \boxed{i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + U\Psi = \hat{H}\Psi}$$

$$\Psi(x,t+\Delta t) = \Psi(x,t) + \frac{1}{i\hbar}\hat{H}\Psi(x,t)\Delta t$$

$$\begin{matrix} x(0) \\ p(0) \end{matrix} \longrightarrow x(t) \qquad \Psi(x,0) \longrightarrow \Psi(x,t)$$

**Волновая функция детерминирована, частица - нет:**

**Описание частицы вероятностное**

$$\boxed{dP = \Psi^*(x,t)\Psi(x,t)dx}$$

# Стационарное уравнение Шредингера

$$U = U(x)$$

(не зависит от времени)

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2} + U(x)\Psi(x,t)$$

$$\Psi(x,t) = \psi(x)T(t)$$

разделяем переменные

$$\frac{i\hbar \frac{\partial T(t)}{\partial t}}{T(t)} = \frac{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + U(x)\psi(x)}{\psi(x)} = E = const$$

$$i\hbar \frac{\partial T(t)}{\partial t} = ET(t) \qquad T(t) = e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$$

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x) + U(x)\psi(x) = E\psi(x)}$$

$$\boxed{\Psi(x,t) = \psi(x)e^{-i\frac{E}{\hbar}t}} \qquad \boxed{\Psi^*(x,t)\Psi(x,t) = \psi^*(x)\psi(x)}$$

Плотность вероятности определяется решением стационарного уравнения

# Уравнение Шредингера

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

Решение при E=const.

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

находим из

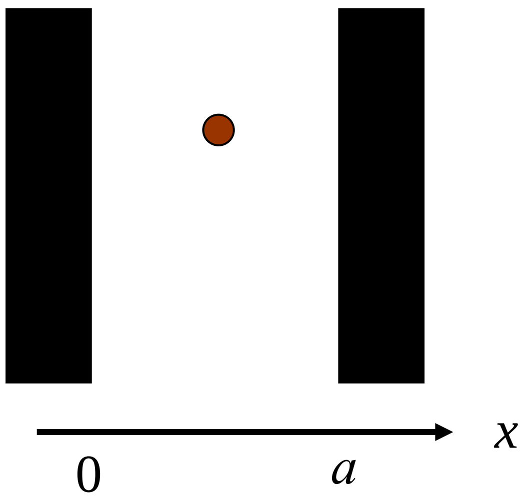
$$\hat{H}\varphi(x) = E\varphi(x)$$

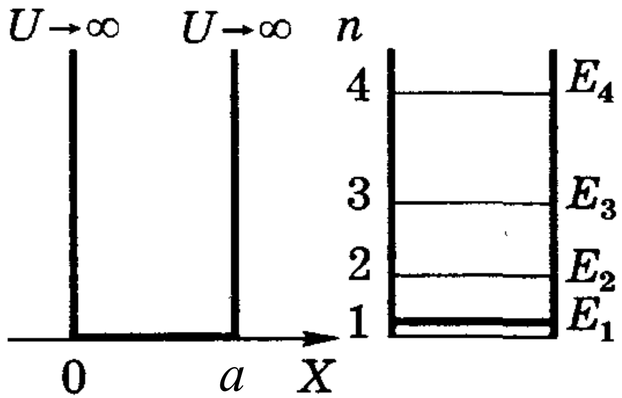
Уравнение Шредингера для стационарных состояний

Плотность вероятности определяется стационарным решением (не зависит от времени)

$$\psi^*(x,t)\psi(x,t) = \varphi^*(x)\varphi(x)$$

# Бесконечная потенциальная яма




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

$$\frac{\partial^2\varphi}{\partial x^2}+k^2\varphi=0 \quad \text{где} \quad k^2=\frac{2mE}{\hbar^2}$$

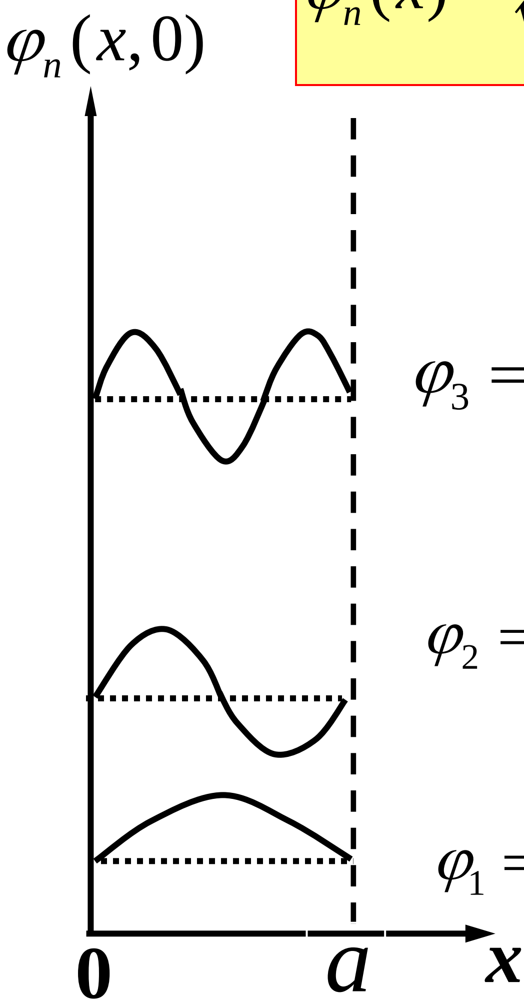
$$\varphi(0)=\varphi(a)=0$$

$$\boxed{\varphi_n(x)=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)}$$

$$\boxed{E_{\text{n}}=\frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}n^2}$$

# Стационарные состояния частицы в бесконечной потенциальной яме

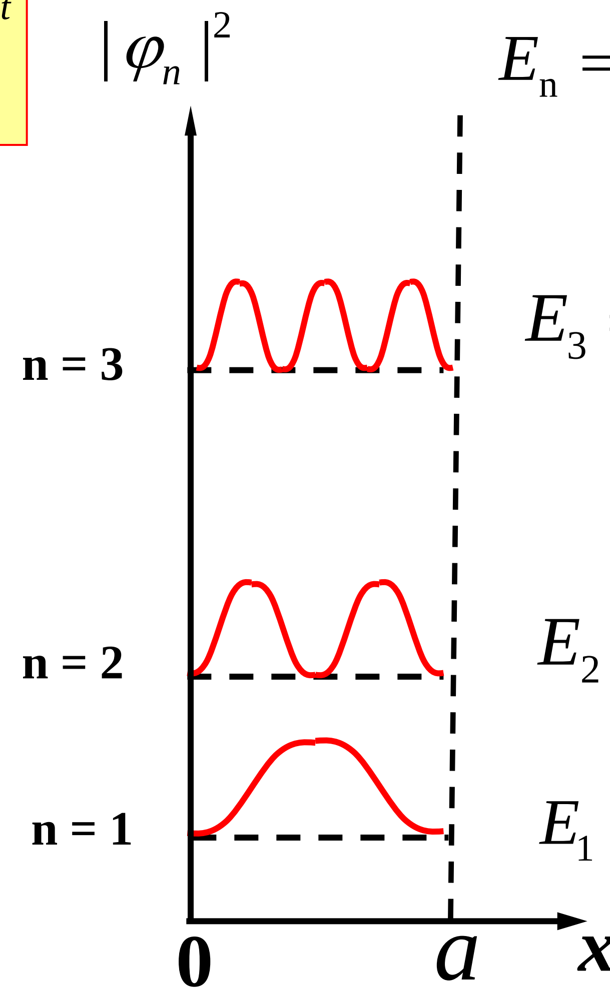
$$\boxed{\varphi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t}}$$




$$\varphi_3 = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{3\pi}{a}x$$

$$\varphi_2 = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{2\pi}{a}x$$

$$\varphi_1 = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{\pi}{a}x$$




$$E_n = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}n^2$$

$$E_3 = 9E_1$$

$$E_2 = 4E_1$$

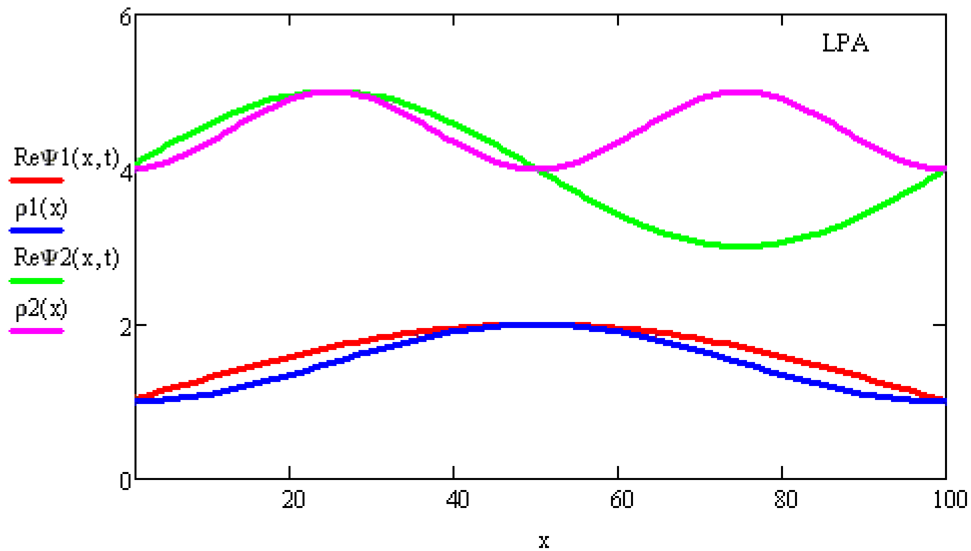
$$E_1 = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$$

Плотность вероятности не зависит от времени

# Стационарные состояния частицы в бесконечной потенциальной яме

$$\psi_2 = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin(\frac{2\pi}{a}x)e^{-i\frac{E_2}{\hbar}t}$$

$$\psi_1 = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin(\frac{\pi}{a}x)e^{-i\frac{E_1}{\hbar}t}$$




$$E_2 = 4E_1$$

$$E_1 = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$$

**Плотности вероятности стационарных состояний не зависят от времени**

[**Смотреть видео**]

# Нестационарные состояния

Принцип суперпозиции состояний

$$\boxed{\psi(x,t)=C_1\psi_1(x,t)+C_2\psi_2(x,t)}$$

Пример: суперпозиция двух состояний для частицы в яме

$$\psi(x,t)=\frac{1}{\sqrt{2}}\varphi_1(x)\exp(-\frac{i}{\hbar}E_1t)+\frac{1}{\sqrt{2}}\varphi_2(x)\exp(-\frac{i}{\hbar}E_2t)$$

$$\left|\psi(x,t)\right|^2=\frac{1}{2}\left|\varphi_1(x)\right|^2+\frac{1}{2}\left|\varphi_2(x)\right|^2+\varphi_1(x)\varphi_2(x)\cos(\omega t)$$

Плотность вероятности осциллирует с разностной частотой $\omega=\dfrac{E_2-E_1}{\hbar}$

$$\left\langle x\right\rangle=\int_{-a/2}^{a/2}\left\{x\frac{1}{2}\left|\varphi_1(x)\right|^2+x\frac{1}{2}\left|\varphi_2(x)\right|^2+\varphi_1(x)x\varphi_2(x)\cos(\omega t)\right\}dx=$$

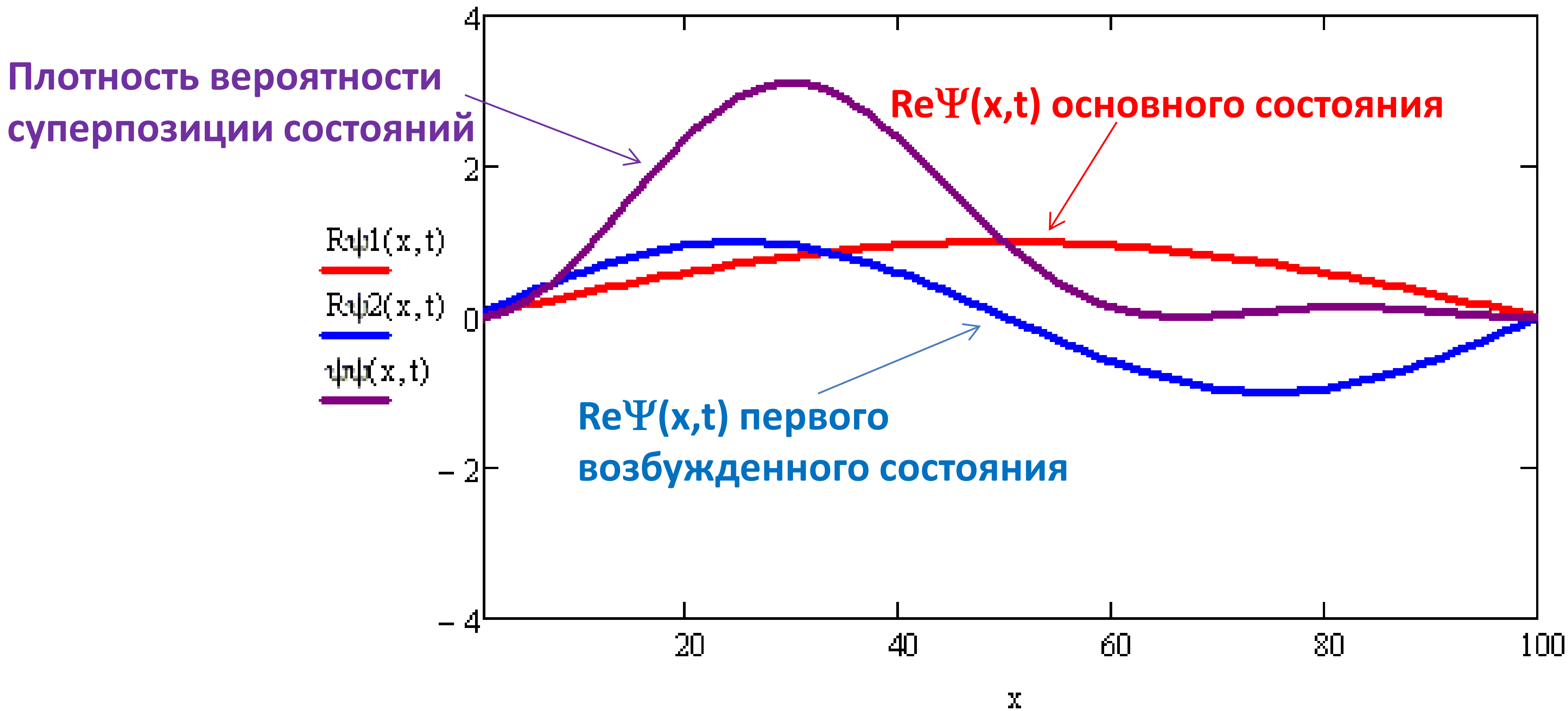
$$=\int_{-a/2}^{a/2}\varphi_1^*(x)x\varphi_2(x)\cos(\omega t)dx=\left\langle\varphi_1\middle|x\middle|\varphi_2\right\rangle=x_{12}\text{ - }\textit{матричный элемент } x$$

Правило отбора для дипольных переходов (**d=e<x>** ) : (правило Лапорта) возможны переходы только между состояниями с разной четностью

# Суперпозиция двух нижних состояний электрона в бесконечной яме

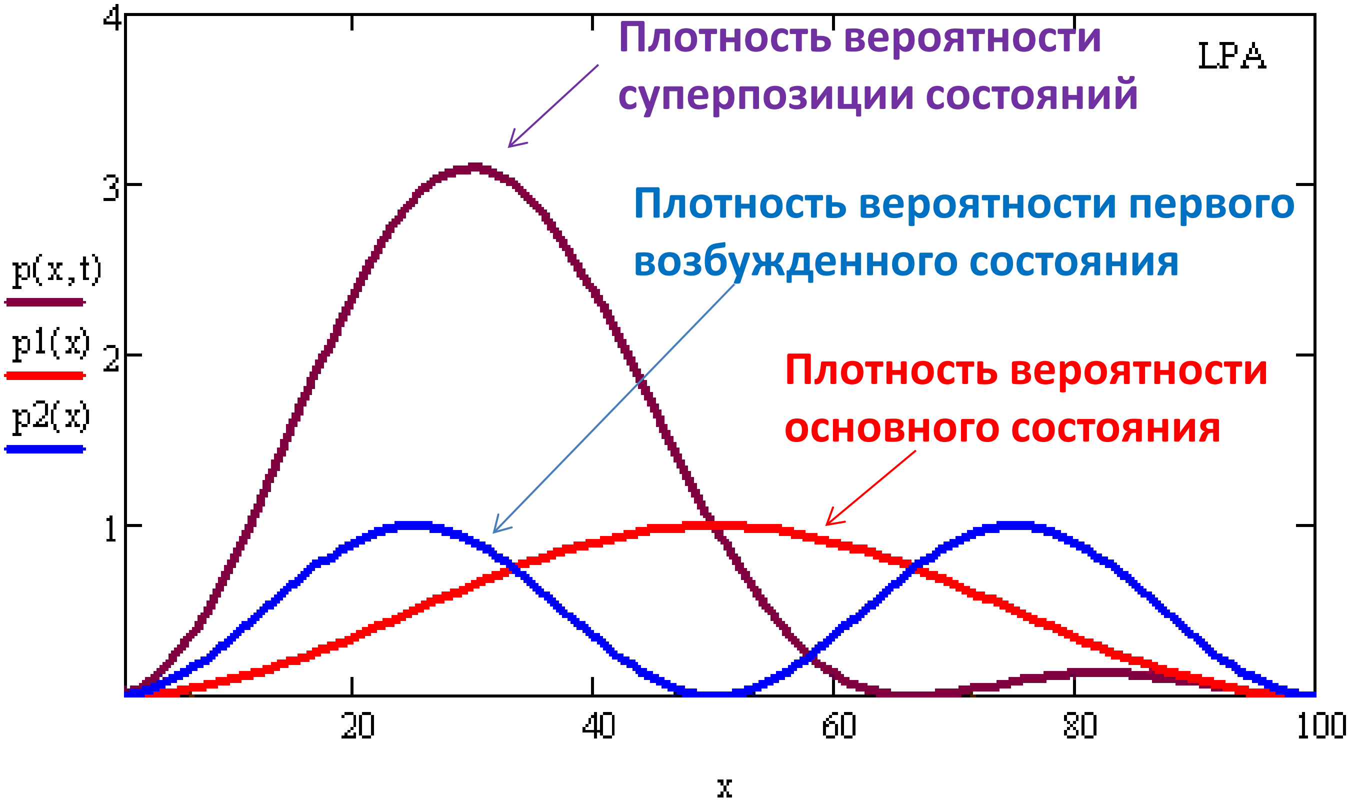
$$\psi1(x,t) := \sin\left(\pi\cdot\frac{x}{a}\right)\cdot e^{-i\cdot\frac{E1}{h}\cdot t} \qquad \psi2(x,t) := \sin\left(2\cdot\pi\cdot\frac{x}{a}\right)\cdot e^{-i\cdot\frac{E2}{h}\cdot t}$$

$$\psi(x,t) := \psi1(x,t) + \psi2(x,t) \qquad \psi\psi(x,t) := \psi(x,t)\cdot\overline{\psi(x,t)}$$



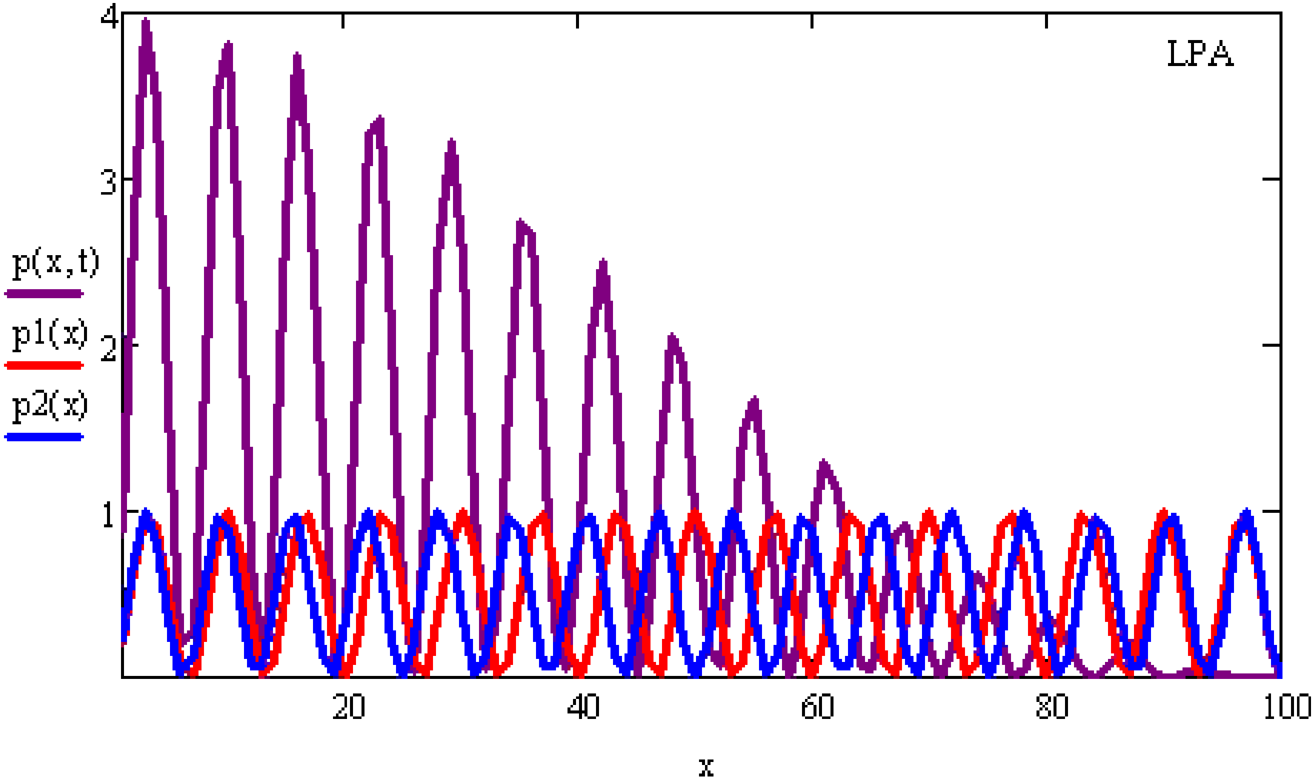

[Смотреть видео]

# Суперпозиция двух нижних состояний электрона в бесконечной яме




[Смотреть видео]

# Суперпозиция 15-го и 16-го состояний электрона в прямоугольной яме




Смотреть видео

# Нестационарное состояние

Принцип суперпозиции состояний

$$\psi(x,t) = C_1\psi_1(x,t) + C_2\psi_2(x,t)$$

**Общий случай:** волновая функция, описывающая произвольное состояние квантовой частицы, может быть разложена по ортонормированному базису собственных функций эрмитового оператора, например гамильтониана H.

$$\psi(x,t) = \sum_n C_n \varphi_n(x) \mathrm{e}^{-i\frac{E_n}{\hbar}t}$$

$$\hat{H}\varphi_n = E_n\varphi_n$$

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

$$\sum_n C_n^2 = 1$$

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

При измерении система будет обнаружена в *n*-ом состоянии с вероятностью $P(n)=|C_n|^2$

$$P(n) = \left|C_n\right|^2$$

# Уравнение Шредингера для U=const

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

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+k^2\psi=0 \quad где \quad k^2=\frac{2m(E-U)}{\hbar^2}$$

**Частное решение** $\psi(x)=e^{i\beta x}$

**Характеристическое уравнение** $\beta^2=k^2 \Rightarrow \beta_{1,2}=\pm\sqrt{k^2}$

**Общее решение** $\psi(x)=Ae^{i\beta_1 x}+Be^{i\beta_2 x}$

**Если $k^2 > 0$, решение – две бегущие в противоположных направлениях волны (t=0)**

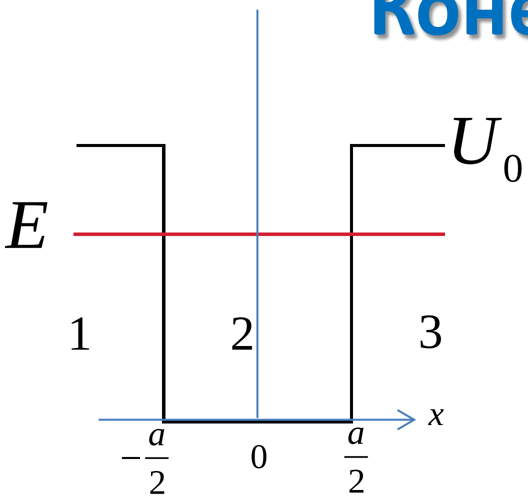
$$\psi(x)=Ae^{ikx}+Be^{-ikx}$$

**Если $k^2 < 0$, оставляем одно (не расходящееся) решение – в виде затухающей волны:**

$$\psi(x)=Ae^{-\alpha x},\ где\ k=i\alpha,\ \alpha\geq 0$$

**(для волны “ направо”)**

# Конечная потенциальная яма




$$УШ: \frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + k^2\psi = 0 \quad где \quad k^2 = \frac{2m(E - U(x))}{\hbar^2}$$

$$1: \quad \psi_1(x) = Ce^{\alpha x}, \ где \ k_1 = i\alpha, \ \alpha^2 = \frac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2} \geq 0$$

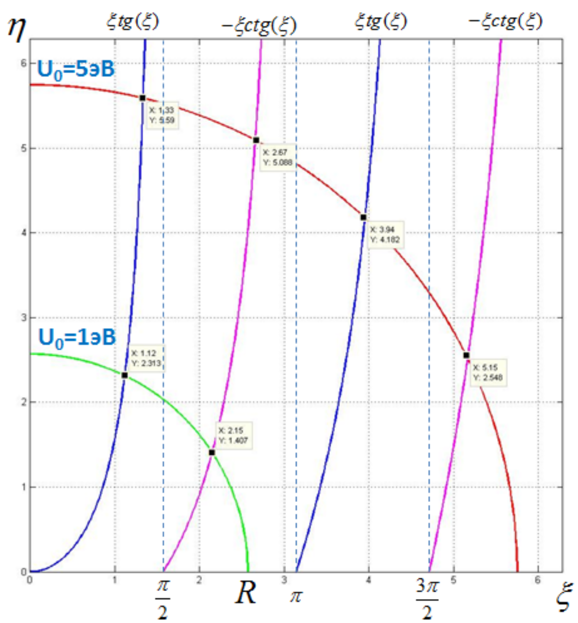
$$2: \quad \psi_2(x) = A\cos(kx) + B\sin(kx) \ \ где \ k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \geq 0$$

$$3: \quad \psi_3(x) = De^{-\alpha x}, \ где \ k_3 = i\alpha, \ \alpha^2 = \frac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2} \geq 0$$

**Для симметричной ямы** $|\psi(x)|^2 = |\psi(-x)|^2$ **т.е. возможны либо четные, либо нечетные волновые функции.**

**Четные решения:** $B = 0, \quad C = D$

Из условия непрерывности и гладкости $\psi(x)$ на границе:




$$\left.\begin{aligned} &\psi_2\left(\frac{a}{2}\right) = \psi_3\left(\frac{a}{2}\right) \\ &\frac{d\psi_2}{dx}\left(\frac{a}{2}\right) = \frac{d\psi_3}{dx}\left(\frac{a}{2}\right) \end{aligned}\right\} \quad \left.\begin{aligned} &A\cos\left(k\frac{a}{2}\right) = D\exp\left(-\alpha\frac{a}{2}\right) \\ &-Ak\sin\left(k\frac{a}{2}\right) = -\alpha D\exp\left(-\alpha\frac{a}{2}\right) \end{aligned}\right\} \quad \xi tg(\xi) = \eta$$

**где**

**Синий график**

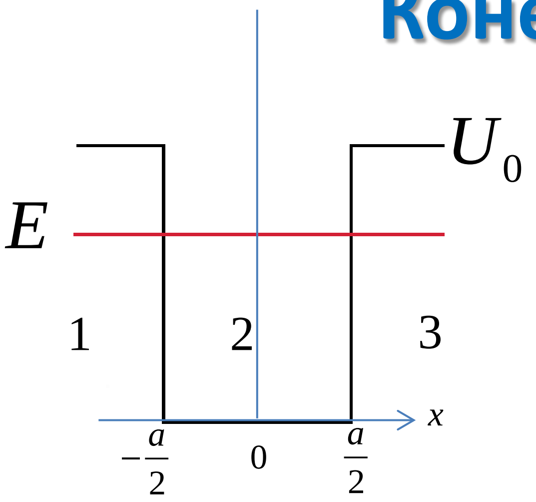
$$\xi^2 = \frac{a^2}{4}\frac{2mE}{\hbar^2} \qquad \eta^2 = \frac{a^2}{4}\frac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2}$$

Решая совместно с уравнением $R^2 = \xi^2 + \eta^2 = \frac{a^2}{4}\frac{2mU_0}{\hbar^2}$

находим $\xi$, *и вычисляем* $E$

**Красный график**

# Конечная потенциальная яма




$$УШ: \frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + k^2\psi = 0 \quad где \quad k^2 = \frac{2m(E - U(x))}{\hbar^2}$$

$$1: \quad \psi_1(x) = Ce^{\alpha x},\ где\ k_1 = i\alpha,\ \alpha^2 = \frac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2} \ge 0$$

$$2: \quad \psi_2(x) = A\cos(kx) + B\sin(kx) \quad где\ k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \ge 0$$

$$3: \quad \psi_3(x) = De^{-\alpha x},\ где\ k_3 = i\alpha,\ \alpha^2 = \frac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2} \ge 0$$

**Для симметричной ямы** $|\psi(x)|^2 = |\psi(-x)|^2$ **т.е. возможны либо четные, либо нечетные волновые функции.**

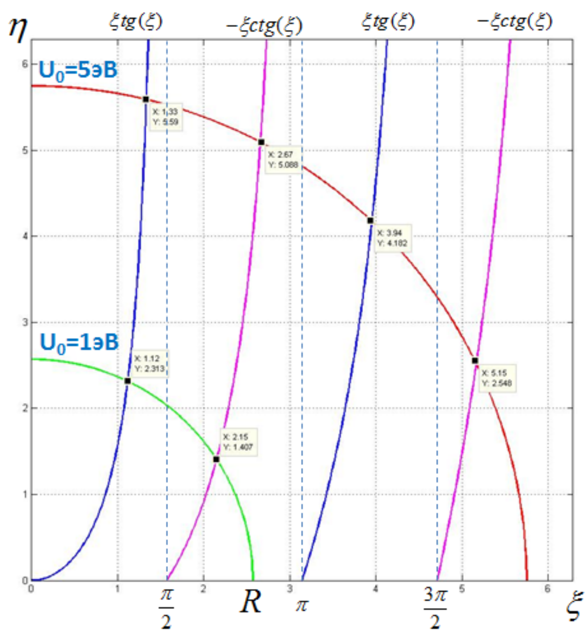
**Нечетные решения:** $A = 0, \quad C = -D$

Из условия непрерывности и гладкости $\psi(x)$ на границе:

$$\left.\begin{aligned} \psi_2\left(\frac{a}{2}\right) &= \psi_3\left(\frac{a}{2}\right) \\ \frac{d\psi_2}{dx}\left(\frac{a}{2}\right) &= \frac{d\psi_3}{dx}\left(\frac{a}{2}\right) \end{aligned}\right\} \quad \left.\begin{aligned} A\sin\left(k\frac{a}{2}\right) &= D\exp\left(-\alpha\frac{a}{2}\right) \\ Ak\cos\left(k\frac{a}{2}\right) &= -\alpha D\exp\left(-\alpha\frac{a}{2}\right) \end{aligned}\right\} \quad -\xi ctg(\xi) = \eta$$

**где**

**Фиолетовый график**



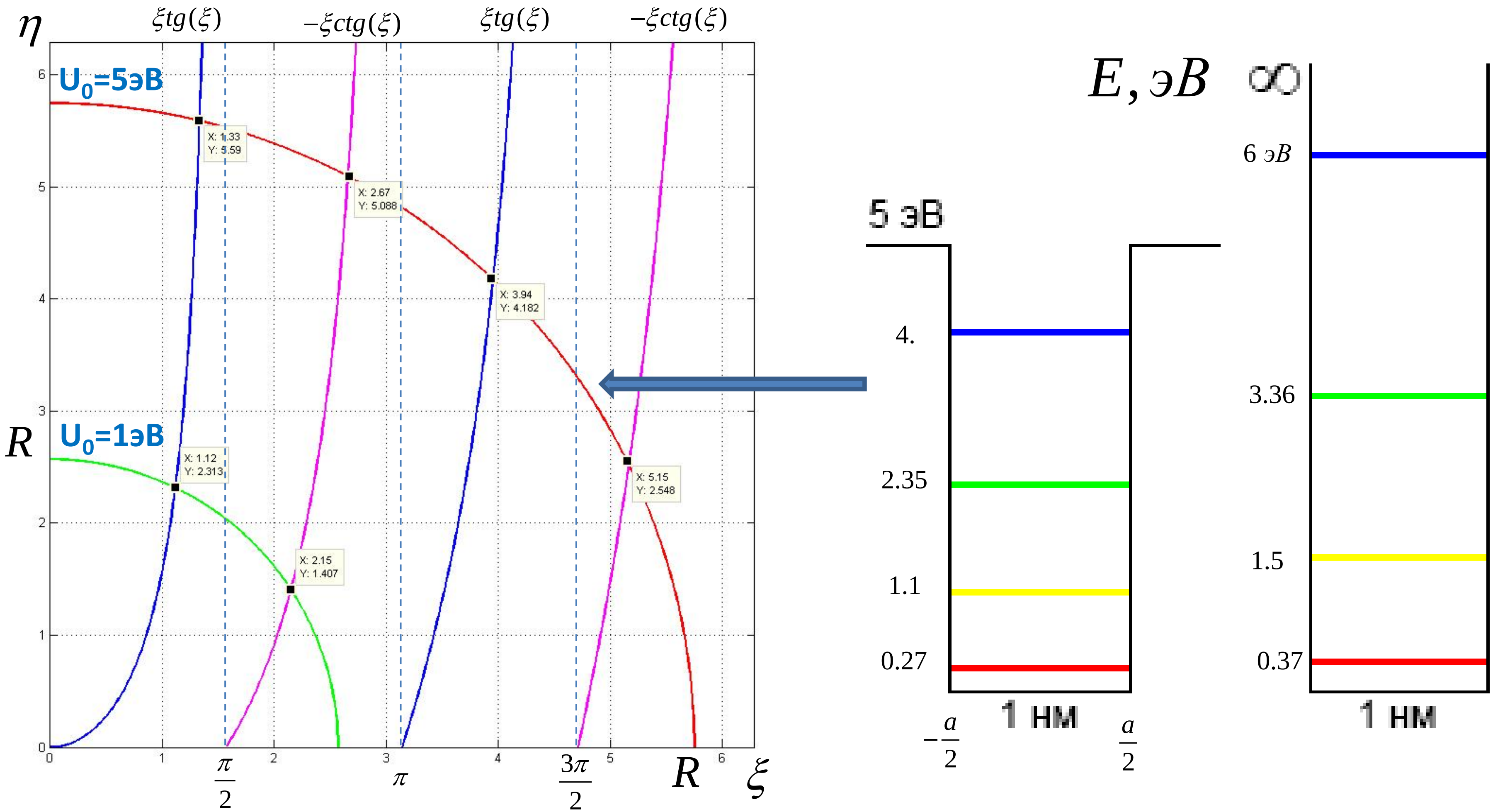

$$\xi^2 = \frac{a^2}{4}\frac{2mE}{\hbar^2} \qquad \eta^2 = \frac{a^2}{4}\frac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2}$$

Решая совместно с уравнением $R^2 = \xi^2 + \eta^2 = \frac{a^2}{4}\frac{2mU_0}{\hbar^2}$

**Красный график**

находим $\xi$, *и вычисляем* $E$

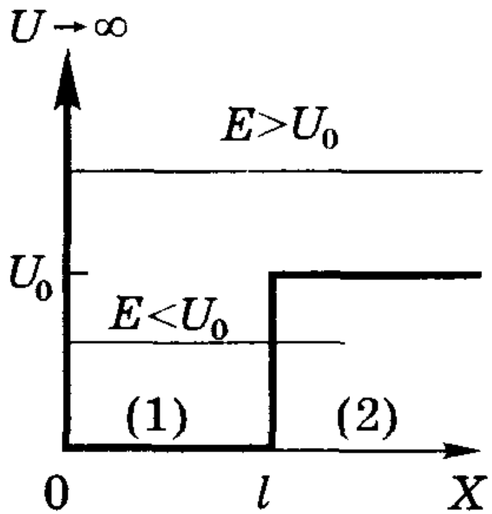
# Конечная потенциальная яма




$$\xi^2 = \frac{a^2}{4}\frac{2mE}{\hbar^2} \qquad \eta^2 = \frac{a^2}{4}\frac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2} \qquad R^2 = \xi^2 + \eta^2 = \frac{a^2}{4}\frac{2mU_0}{\hbar^2}$$

**Анимация:**

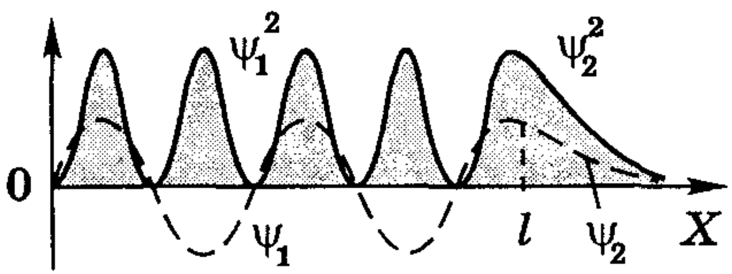
# Полубесконечная потенциальная яма




$$\psi_1'' + k^2\psi_1 = 0, \qquad k^2 = 2mE/\hbar^2,$$
$$\psi_2'' + \varkappa^2\psi_2 = 0, \qquad \varkappa^2 = 2m(U_0 - E)/\hbar^2.$$

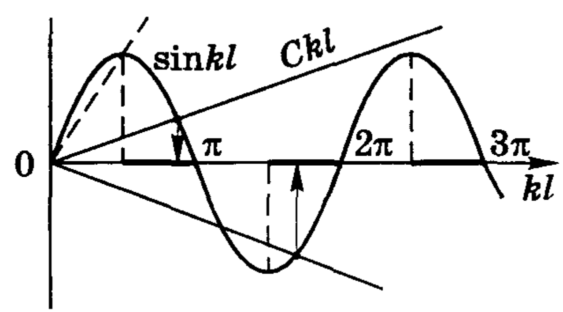
$$\psi_1(x) = a\sin(kx + \alpha),$$
$$\psi_2(x) = be^{-\varkappa x} + \cancel{c}e^{\varkappa x}.$$

$$\psi_1(l) = \psi_2(l), \qquad \psi_1'(l) = \psi_2'(l). \qquad \psi_1(0) = 0,$$




$$\mathrm{tg}\,kl = -k/\varkappa, \qquad \sin\alpha = 1/\sqrt{1+\mathrm{ctg}^2\alpha}.$$

$$\sin kl = \pm Ckl, \qquad C = \hbar/\sqrt{2ml^2U_0}$$




уровней нет при

$$C > \frac{1}{\pi/2} = \frac{2}{\pi}$$

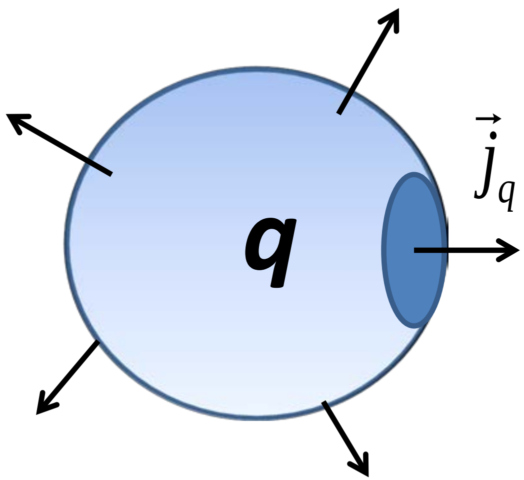
$$l^2U_0 < \pi^2\hbar^2/8m$$

См. И.Е. Иродов, Квантовая физика, Физматлит, 2001, стр. 90

# Вектор плотности потока вероятности

**Для заряда:** $\frac{\partial q}{\partial t} = -\oint_s \vec{j}_q d\vec{S}$ $\vec{j}_q$ **- плотность тока** $\frac{\partial \rho_q}{\partial t} = -div\vec{j}_q$

**Для вероятности P:** $\frac{\partial P}{\partial t} = -\oint_s \vec{j}\, d\vec{S}$ $\vec{j}$ **- плотность потока вероятности** $\frac{\partial \rho}{\partial t} = -div\vec{j}$




$i\hbar\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi + U(x)\Psi$ умножим слева на $\Psi^*$

$-i\hbar\frac{\partial \Psi^*}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi^* + U(x)\Psi^*$ умножим слева на $\Psi$

вычтем

$$i\hbar\left(\Psi^*\frac{\partial \Psi}{\partial t} + \Psi\frac{\partial \Psi^*}{\partial t}\right) = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\Psi^*\nabla^2\Psi - \Psi\nabla^2\Psi^*\right)$$

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

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -div\vec{j}$$

$$\vec{j} = \frac{\hbar}{2mi}(\Psi^*\nabla\Psi - \Psi\nabla\Psi^*)$$

# Вектор плотности потока вероятности

$$\vec{j} = \frac{\hbar}{2mi}(\Psi^*\nabla\Psi - \Psi\nabla\Psi^*)$$

Для свободной частицы:

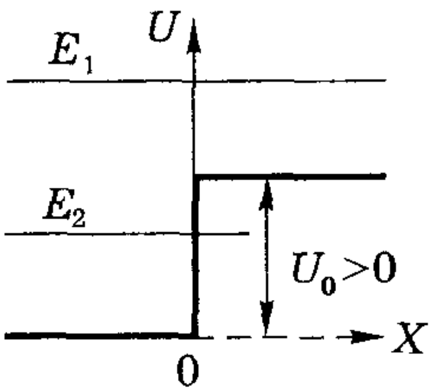
$$\psi(x,t) = Ae^{-\frac{i}{\hbar}(Et-px)} \quad j = \frac{p}{m}\psi^*\psi = \frac{p}{m}A^2 = \mathrm{v}A^2$$

Для массы: $\rho_m = m\Psi^*\Psi \quad \vec{j}_m = m\cdot\vec{j}$ плотность и поток массы

Для заряда: $\rho_q = q\Psi^*\Psi \quad \vec{j}_q = q\cdot\vec{j}$ плотность заряда и плотность электрического тока

# Потенциальные барьеры

$$E > U_0$$




$$\psi_1(x \leqslant 0) = a_1 \exp(ik_1 x) + b_1 \exp(-ik_1 x), \quad k_1 = \sqrt{2mE}/\hbar.$$

$$\psi_2(x \geqslant 0) = a_2 \exp(ik_2 x) + \cancel{b_2 \exp(-ik_2 x)}, \quad k_2 = \sqrt{2m(E - U_0)}/\hbar.$$

$$\psi_1(0) = \psi_2(0), \quad \text{или} \quad a_1 + b_1 = a_2,$$

$$\psi_1'(0) = \psi_2'(0), \quad \text{или} \quad a_1 k_1 + b_1 k_1 = a_2 k_2.$$

$$\frac{b_1}{a_1} = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}, \qquad \frac{a_2}{a_1} = \frac{2k_1}{k_1 + k_2}.$$

**Плотность потока вероятности**

$$j = \frac{p}{m}\psi^*\psi = \frac{p}{m}A^2 = \frac{\hbar k}{m}A^2 \sim kA^2$$

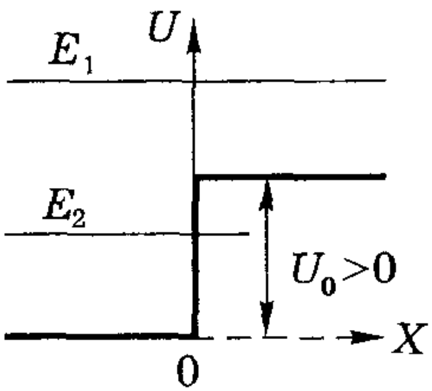
$$j \infty k_1 a_1^2, \qquad j' \infty k_1 b_1^2, \qquad j'' \infty k_2 a_2^2$$

$$R = \frac{j'}{j} = \left(\frac{b_1}{a_1}\right)^2 = \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}\right)^2, \quad D = \frac{j''}{j} = \frac{k_2}{k_1}\left(\frac{a_2}{a_1}\right)^2 = \frac{4k_1 k_2}{(k_1 + k_2)^2}$$

$$R + D = 1$$

# Потенциальные барьеры

$$E < U_0$$

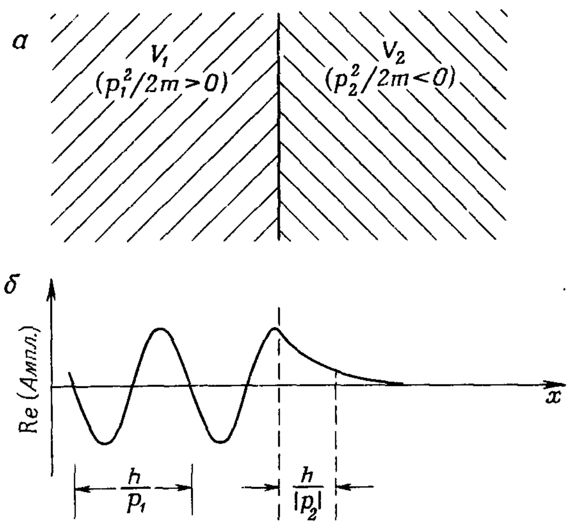



$$\psi_1(x \leqslant 0) = a_1\exp(\mathrm{i}k_1x) + b_1\exp(-\mathrm{i}k_1x), \; k_1 = \sqrt{2mE}/\hbar.$$

$$\psi_2(x \geqslant 0) = a_2\exp(\mathrm{i}k_2x) + \cancel{b_2\exp(-\mathrm{i}k_2x)}, \; k_2 = \sqrt{2m(E-U_0)}/\hbar.$$

$$k_2 = \mathrm{i}k, \text{ где } k = \sqrt{2m(U_0-E)}/\hbar$$

$$\psi_2 \propto e^{-kx}$$




$$R = \frac{j'}{j} = \left(\frac{b_1}{a_1}\right)^2 = \left(\frac{k_1-k_2}{k_1+k_2}\right)^2, \qquad R=1$$

$$P(x) = P(0)\, e^{-2kx}$$

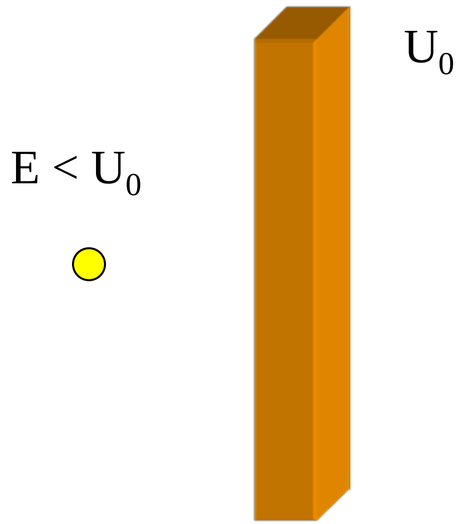
**Глубина проникновения** $\quad l = 1/2k = \hbar/\sqrt{8m(U_0-E)}$

$$U - E \approx 1 \text{эВ}$$

**для электрона** $\quad l \approx 10^{-10}\,\text{м}$

[**Анимация: барьеры, туннелирование**]

# Туннельный эффект

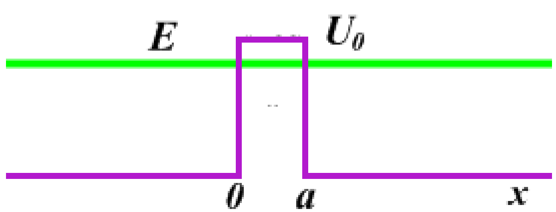



$$\psi_1(x) = A_1 e^{ikx} + B_1 e^{-ikx} \qquad k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

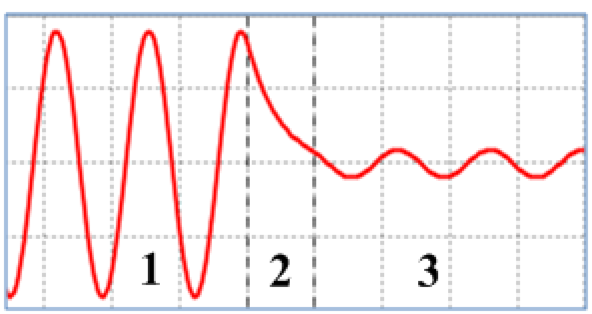
$$\psi_2(x) = A_2 e^{-\alpha x} \qquad \alpha = \sqrt{\frac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2}}$$

**Широкий барьер** $\alpha a \gg 1$ **(нет отраженной волны)**

$$\psi_3(x) = A_3 e^{ikx}$$




$$T = \left|\frac{A_3}{A_1}\right|^2 \approx T_0 \exp\left(-2a\sqrt{\frac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2}}\right)$$




$$T_0 = \frac{16E(U_0 - E)}{U_0^{\ 2}} \qquad T_0 \approx 1$$

$$U - E \approx 1\text{эВ}$$

$$a \approx 10^{-10}\,\text{м} \Longrightarrow T \approx 0,3$$

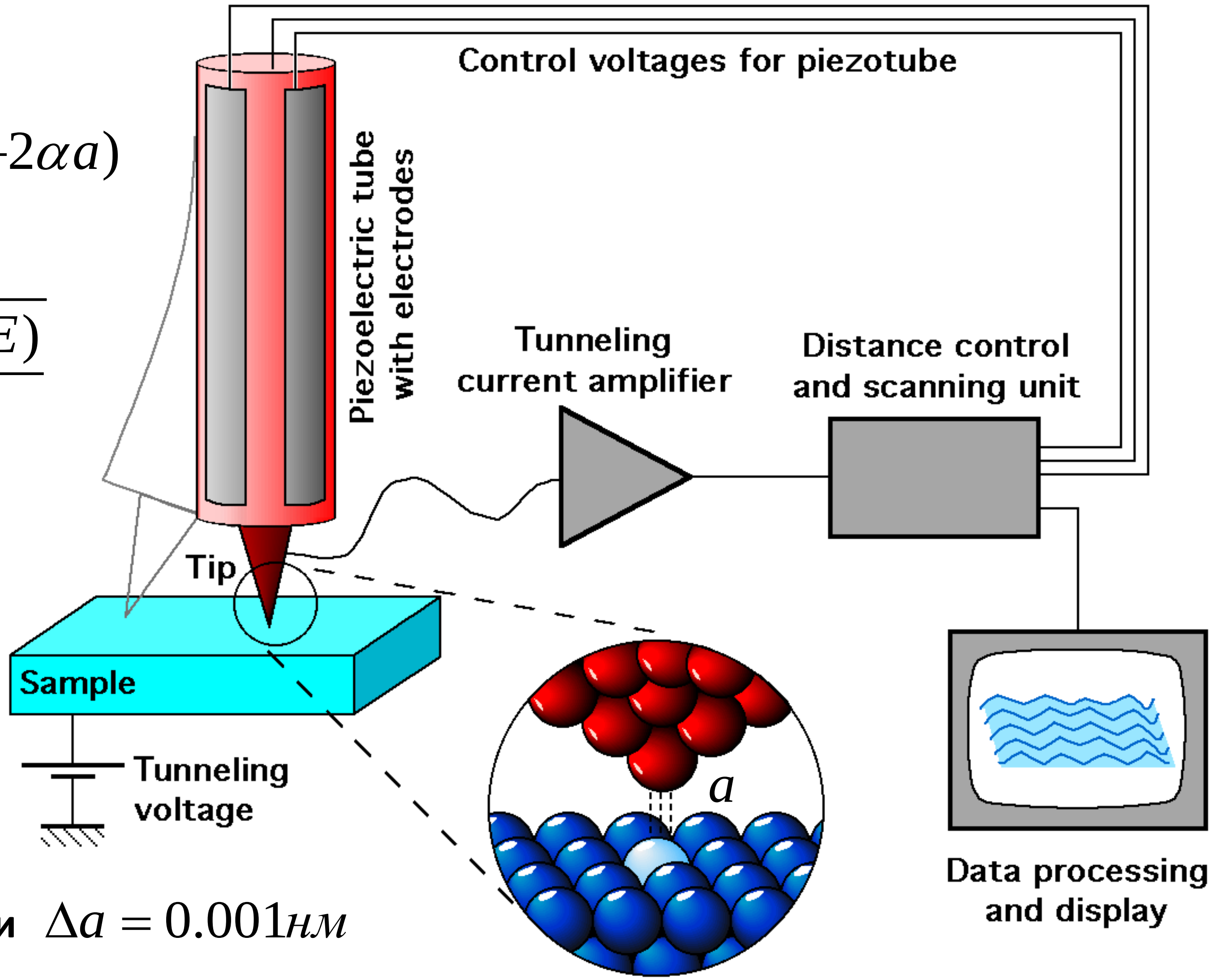
$$a \approx 10^{-9}\,\text{м} \Longrightarrow T \approx 10^{-8}$$

**Высокая чувствительность** $\dfrac{\Delta T}{T} = -2\alpha \Delta a$ **Изменение на 2% при** $\Delta a = 0.001\,нм$

# Сканирующий туннельный микроскоп (STM)

$$\text{òî ê} \sim T \approx \exp(-2\alpha a)$$

$$\alpha = \sqrt{\frac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2}}$$




**Высокая чувствительность**

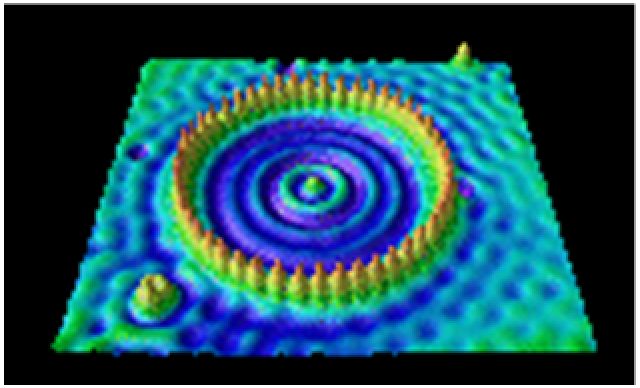
$$\frac{\Delta T}{T} = -2\alpha\Delta a$$

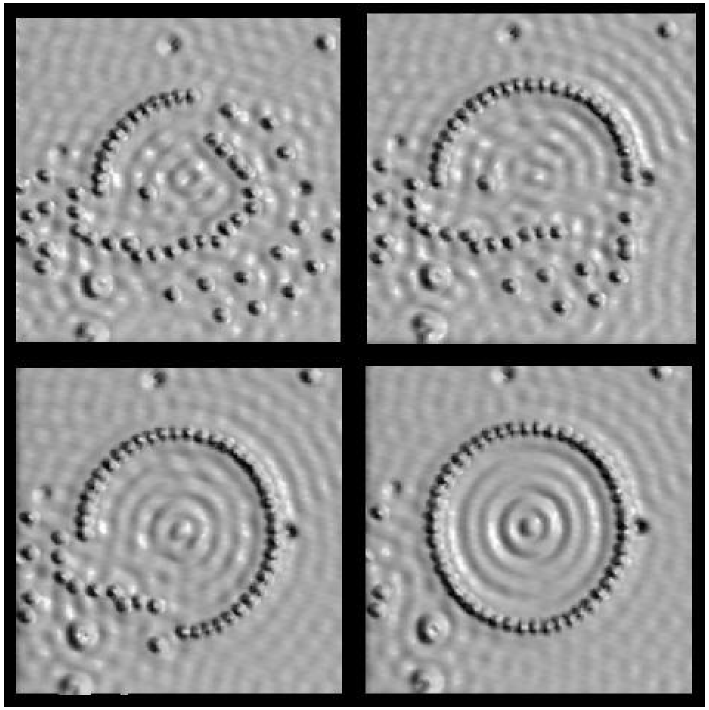
**Изменение на 2% при** $\Delta a = 0.001\,нм$

# STM Image Gallery

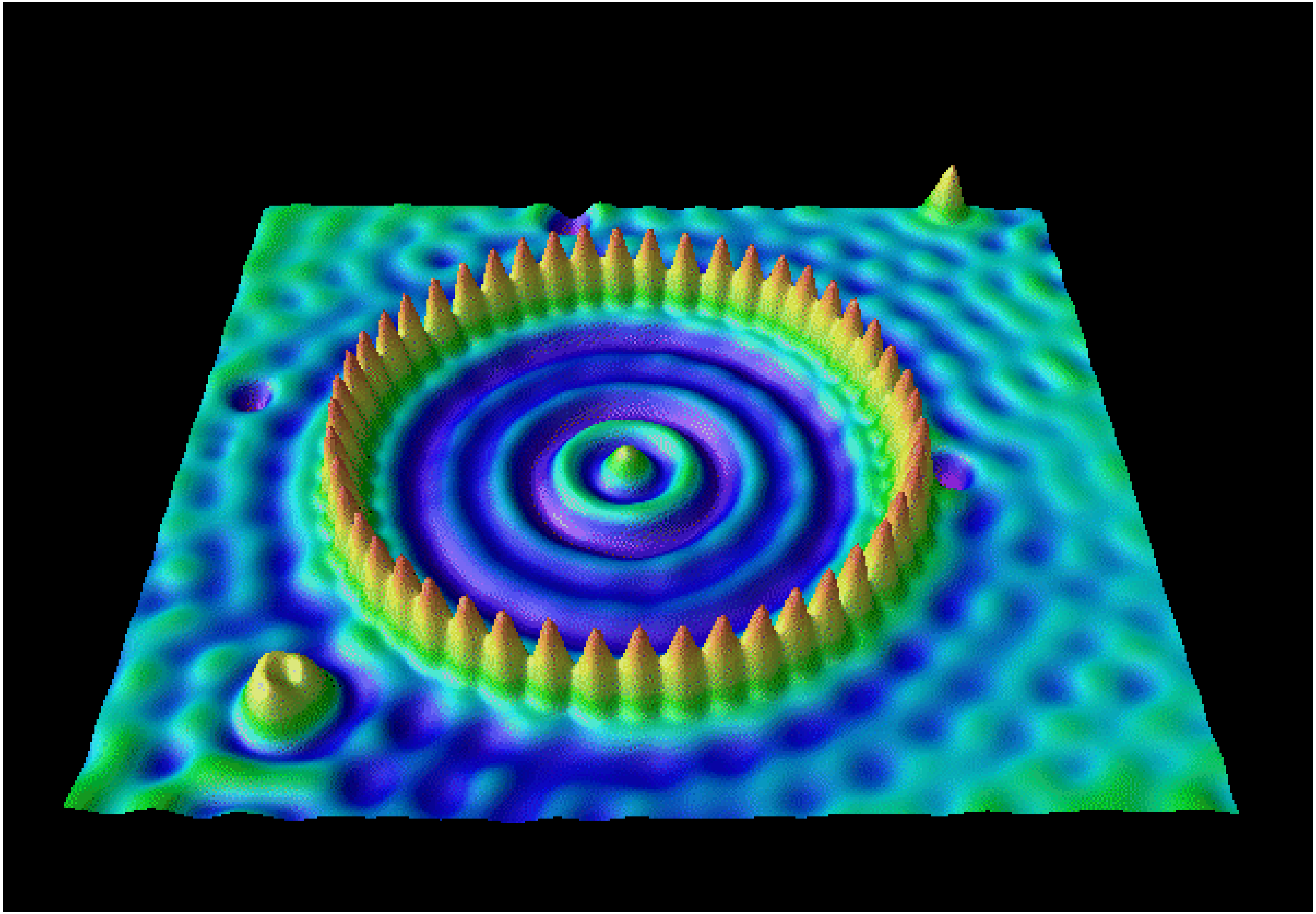
## "Image originally created by IBM Corporation."

Scientists discovered a new method for confining electrons to artificial structures at the nanometer lengthscale. Surface state electrons on Cu(111) were confined to closed structures (corrals) defined by barriers built from Fe adatoms. The barriers were assembled by individually positioning Fe adatoms using the tip of a low temperature scanning tunneling microscope (STM). A circular corral of radius 71.3 Angstrom was constructed in this way out of 48 Fe adatoms.

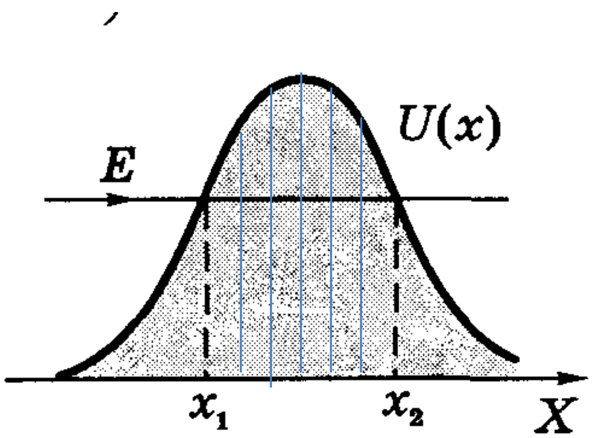




[http://www.almaden.ibm.com/vis/stm/stm.html](http://www.almaden.ibm.com/vis/stm/stm.html)



# Туннельный эффект




$$T \approx \exp(-2a\sqrt{\frac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2}})$$

$$T \approx T_1 \cdot T_2 \cdot T_3 \cdot T_4 \cdots$$

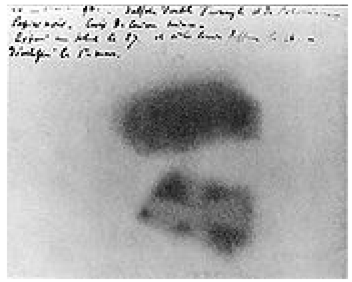
$$\ln T = \ln T_1 + \ln T_2 + \ln T_3 + \ln T_4 + \cdots$$

$$\ln T_n \approx -2\sqrt{\frac{2m(U(x_n) - E)}{\hbar^2}}dx_n$$

$$\ln T \approx -2\int_{x1}^{x2} dx\sqrt{\frac{2m(U(x) - E)}{\hbar^2}})$$

$$\boxed{T \approx \exp\left(-2\int_{x1}^{x2} dx\sqrt{\frac{2m(U(x) - E)}{\hbar^2}}\right)}$$

# Радиоактивный распад



Антуан Анри Беккерель (1896)

В 1903 г. получил совместно с Пьером и Марией Кюри Нобелевскую премию по физике «В знак признания выдающихся заслуг, выразившихся в открытии самопроизвольной радиоактивности».

**Альфа-распад** $^{A}_{Z}\mathrm{X} \rightarrow {}^{A-4}_{Z-2}\mathrm{Y} + {}^{4}_{2}\mathrm{He}$

**Бета-распад** $^{1}_{0}\mathrm{n} \rightarrow {}^{1}_{1}\mathrm{p} + {}^{0}_{-1}\mathrm{e} + \bar{\nu}_e$

**Гамма-распад**
**(изомерный переход)** гамма-квант

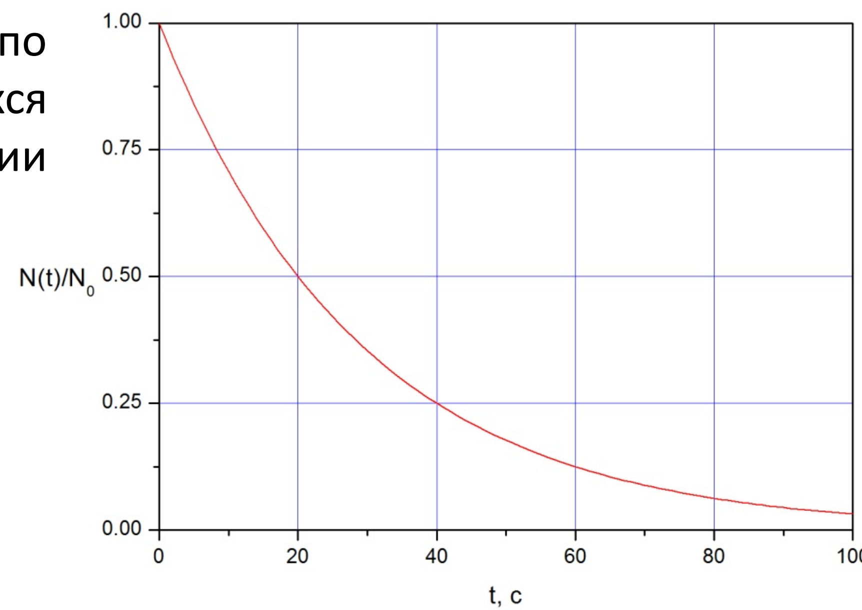
$$dN = -\lambda N dt \Rightarrow N(t) = N_0 e^{-\lambda t}$$

$\lambda$ – *постоянная распада*

**Вероятность распада в единицу времени** $\dfrac{-dN}{Ndt} = \lambda$

$$N(\tau) = N_0 / 2$$

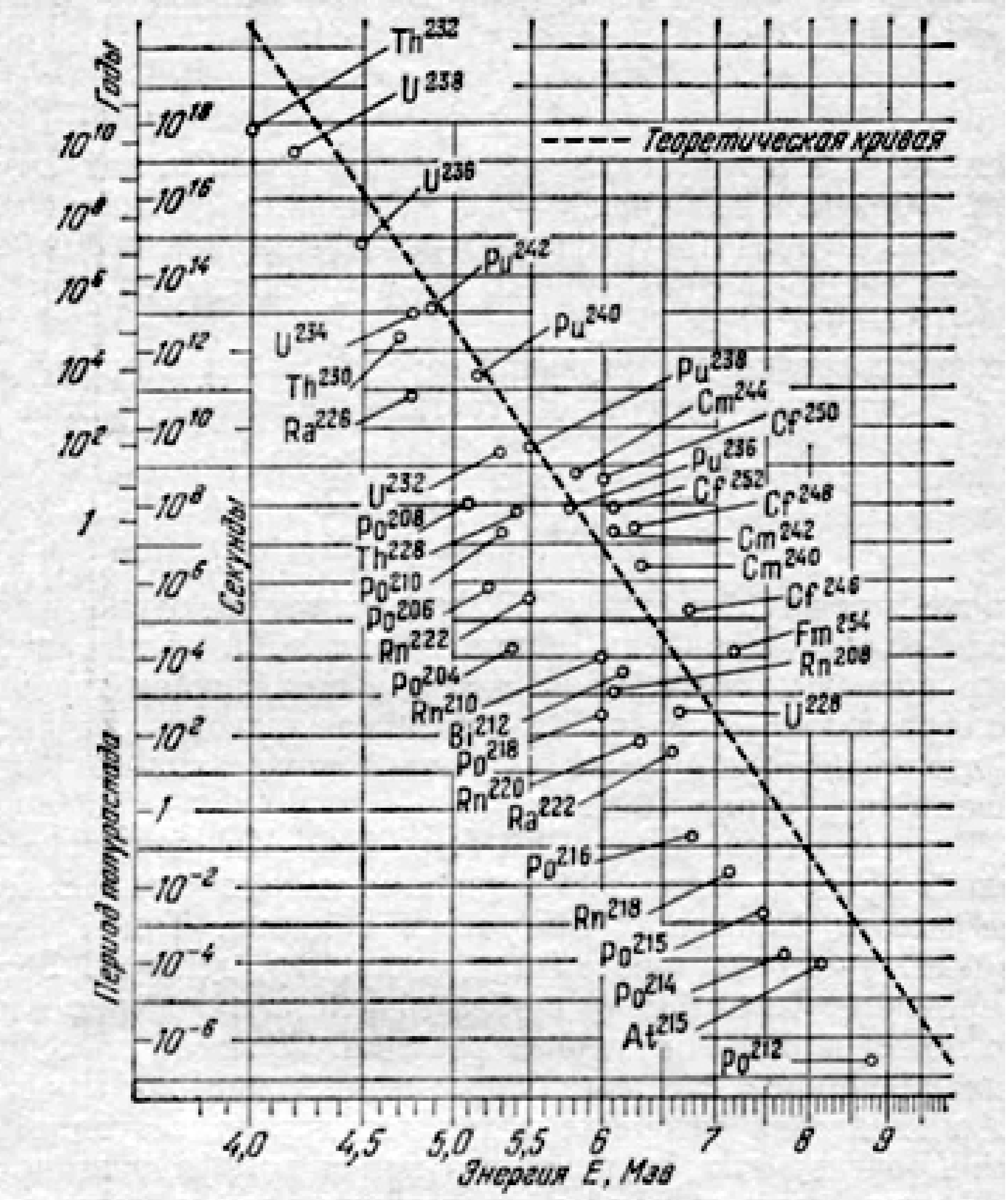
$$\tau = \frac{1}{\lambda}\ln 2 - \textit{период полураспада}$$



# $\alpha$-радиоактивность

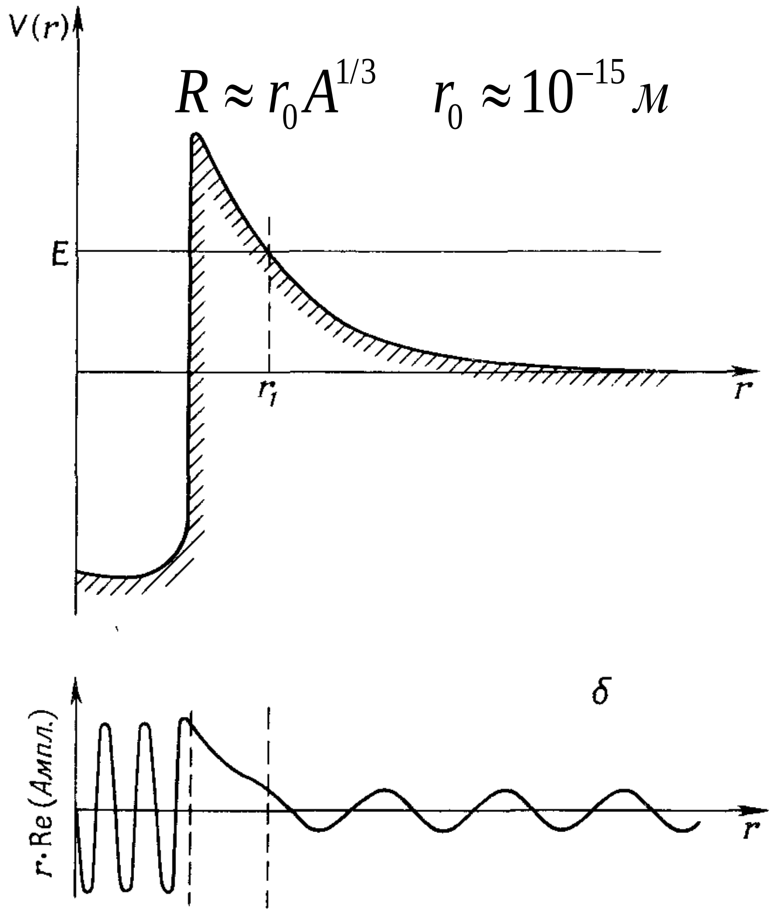
**Период полураспада меняется от $10^{-6}$ секунды до $10^{10}$ лет при изменении энергии $\alpha$- частиц от 8 до 4 Мэв**

**?**



# Теория α-радиоактивности

$$R \approx r_0 A^{1/3} \qquad r_0 \approx 10^{-15}\,м$$




$$E_\alpha = U(r_1) = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{2e^2(Z-2)}{r_1}$$

$$_{88}Ra^{226} \qquad R \approx 7.3\cdot 10^{-15}\,м$$

$$E_\alpha = 4.78\,Мэв \qquad r_1 = 50\cdot 10^{-15}\,м$$

$$\lambda = nT \qquad n = \frac{v}{2R} \qquad v = \frac{p_\alpha}{m_\alpha} = \frac{\hbar}{m_\alpha R}$$

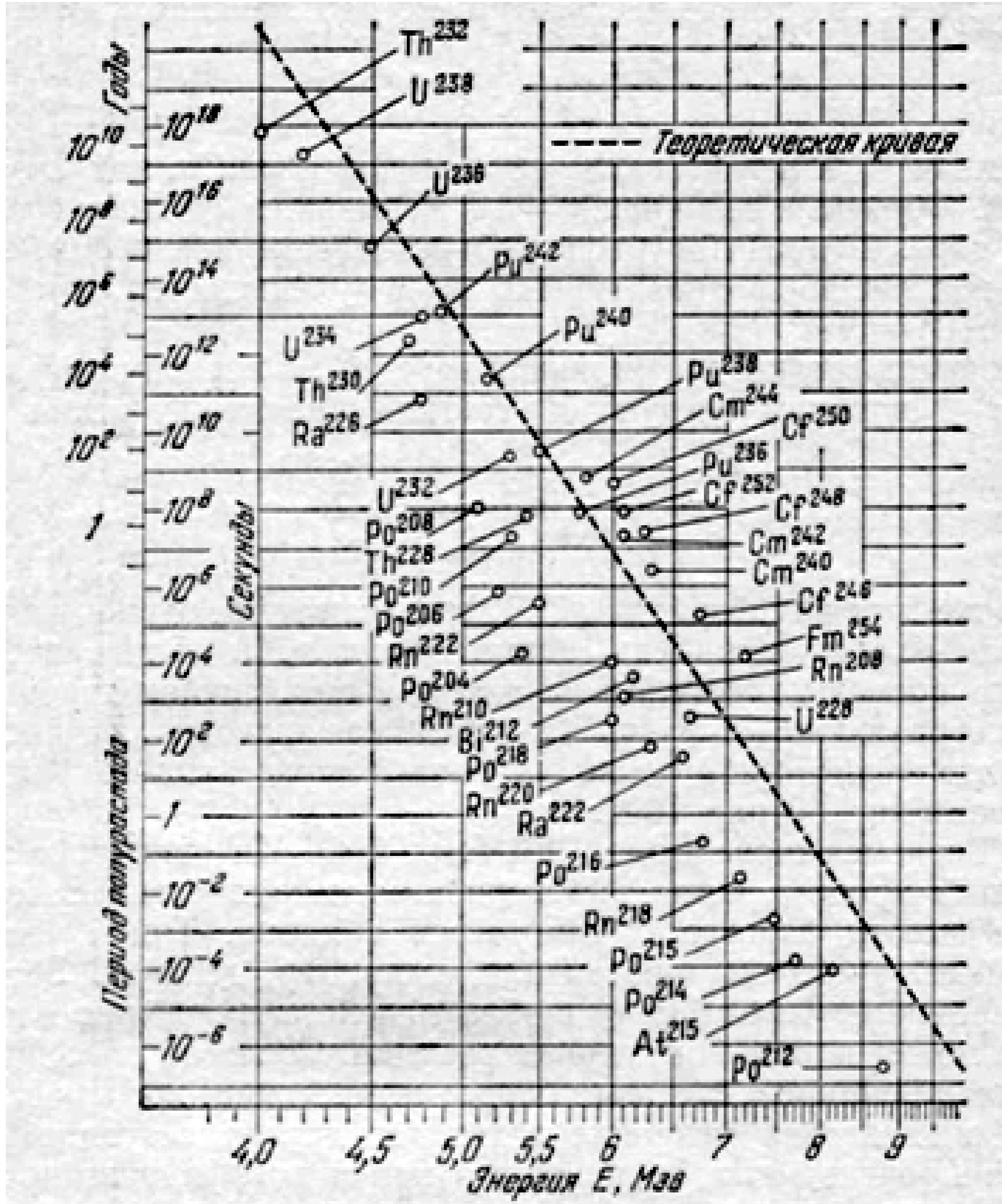
$$\lambda \approx \frac{\hbar T}{2m_\alpha R^2} \qquad T = \exp\left(-\frac{2}{\hbar}\int_R^{r1} dr\sqrt{2m_\alpha(U(r)-E_\alpha)}\right)$$

$$t_{1/2} = \frac{2m_\alpha R^2 \ln 2}{\hbar}\exp\left(\frac{4}{\hbar 4\pi\varepsilon_0} q q_\alpha \sqrt{\frac{2m_\alpha}{E_\alpha}}\right)$$

$$\ln t_{1/2} = A + \frac{B}{\sqrt{E_\alpha}}$$

# Теория α-радиоактивности

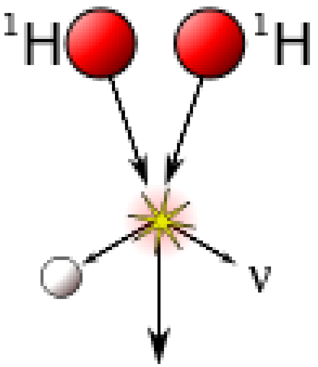
$$\ln t_{1/2} = A + \frac{B}{\sqrt{E_\alpha}}$$



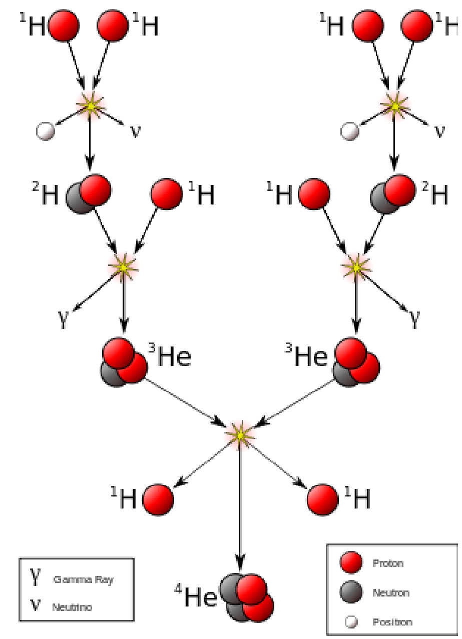
# Протон-протонный цикл на Солнце

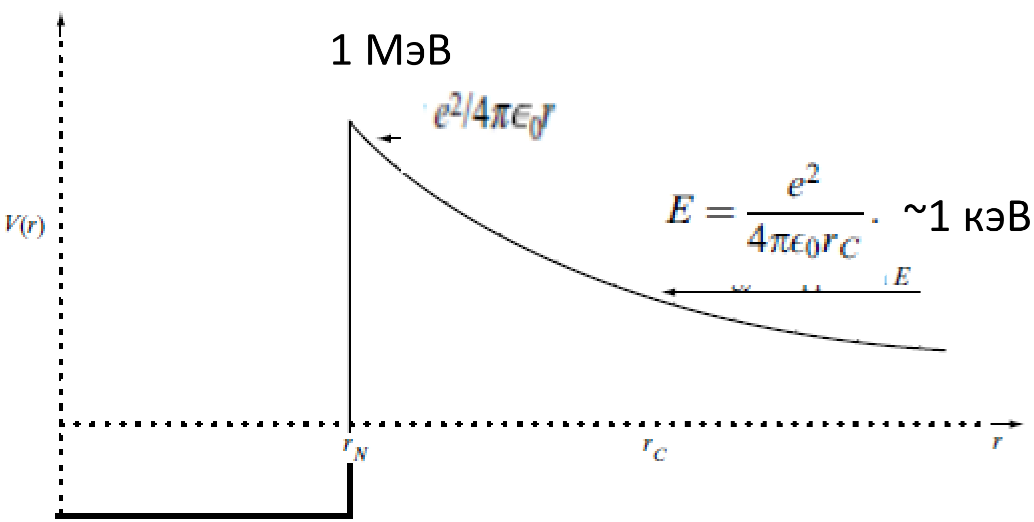
$$4H^1 \longrightarrow He^4$$

4,03188 4,0026




$$p + p \rightarrow {}^2H + e^+ + \nu_e + 0{,}4 \text{ МэВ}$$




$$E = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_C}.$$ ~1 кэВ

$$T \approx \exp\left(-\frac{2}{\hbar}\int_{x1}^{x2} dx\sqrt{2m(U(x)-E)}\right)$$

$$T \approx \exp\left[-\left(\frac{E_G}{E}\right)^{1/2}\right]$$

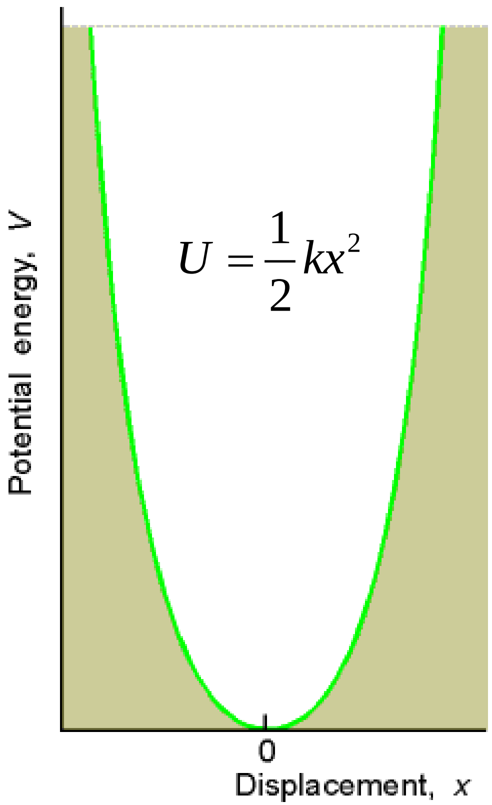
$$E_G = \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar c}\right)^2 2\pi^2 \mu c^2. \quad 493 \text{ keV}$$

$$T \approx \exp[-22] \approx 3 \times 10^{-10}.$$

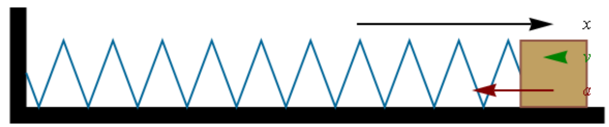
# Гармонический осциллятор

Классическая механика

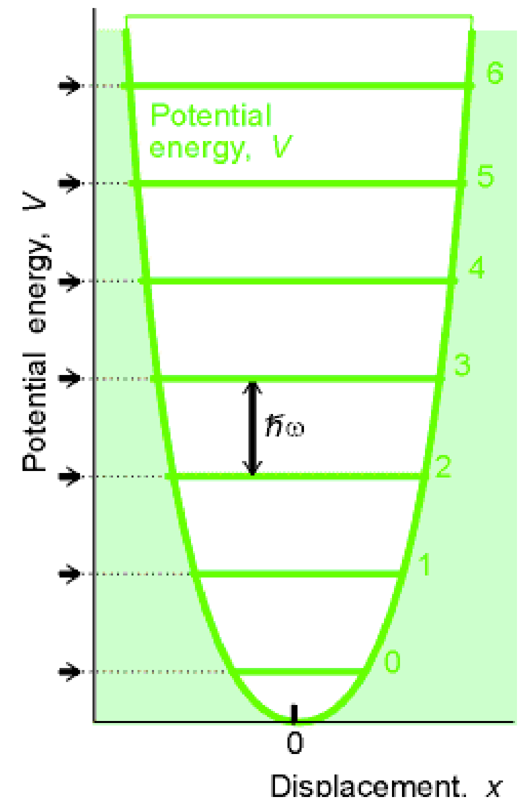
Квантовая механика




$$U = \frac{1}{2}kx^2$$



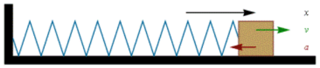

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2}kx^2\right]\psi = E\psi$$




$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega\,; \quad n = 0, 1, 2, \ldots$$

$$\omega = \left(\frac{k}{m}\right)^{1/2}$$

- ***Разность энергий*** = ħω



# Гармонический осциллятор

$$U(x)=\frac{1}{2}kx^2 \qquad \omega^2=\frac{k}{m} \qquad \hat{H}\psi(x)=E\psi(x) \qquad \hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+\frac{m\omega^2x^2}{2}$$

Решаем стационарное уравнение Шрёдингера

$$\left(\frac{d^2}{dx^2}-\frac{m^2\omega^2x^2}{\hbar^2}+\frac{2mE}{\hbar^2}\right)\psi(x)=0$$

Перейдем к безразмерным величинам: $\xi=x/a \quad \varepsilon=E/E_0 \;\; \left(a=\sqrt{\hbar/m\omega},\; E_0=\hbar\omega/2\right)$

$$\left(\frac{d^2}{d\xi^2}-\xi^2+\varepsilon\right)\psi(\xi)=0$$

Найдем асимптотическое решение:

$$\xi\to\pm\infty \;\Rightarrow\; \frac{d^2\psi}{d\xi^2}-\xi^2\psi\approx 0 \;\Rightarrow\; \psi\sim\exp(-\xi^2/2)$$

Удовлетворяет УШ при всех x ?

$$\left(\frac{d^2}{d\xi^2}-\xi^2+\varepsilon\right)\psi(\xi)=0$$

Да, если $\varepsilon=1$ т.е. асимптотика является основным состоянием ( нет узлов)

$$\psi_0(\xi)=A_0\exp\left(\frac{-\xi^2}{2}\right)$$

с энергией $E_0=\hbar\omega/2$

Ищем общее решение в виде произведения асимптотики на полином $n$-ой степени (чтобы обеспечить $n$ узлов)

$$\psi_n(\xi)=H_n(\xi)\exp\left(\frac{-\xi^2}{2}\right)$$

# Гармонический осциллятор
## свойства полиномов Эрмита

подставляем $\psi_n(\xi) = H_n(\xi)\exp(\frac{-\xi^2}{2})$ в $\left(\frac{d^2}{d\xi^2} - \xi^2 + \varepsilon\right)\psi(\xi) = 0$ получаем

$$H'' - 2\xi H' + (\varepsilon - 1)H = 0 \to H_n'' - 2\xi H_n' + 2nH_n = 0 \text{ при } E_n = \hbar\omega(n + 1/2)$$

$$n = 0, 1, 2, 3...$$

решение этого уравнения хорошо известны – это ***полиномы Эрмита***

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

(формула Родригеса)

**Свойства полиномов Эрмита:**

$$\int\limits_{-\infty}^{\infty} H_n(\xi)H_m(\xi)\exp\left(-\xi^2\right)d\xi = 2^n n!\sqrt{\pi}\delta_{mn}$$

Это свойство используем для получения нормировочного коэффициента $A_n$

$$H_n' = 2nH_{n-1}$$

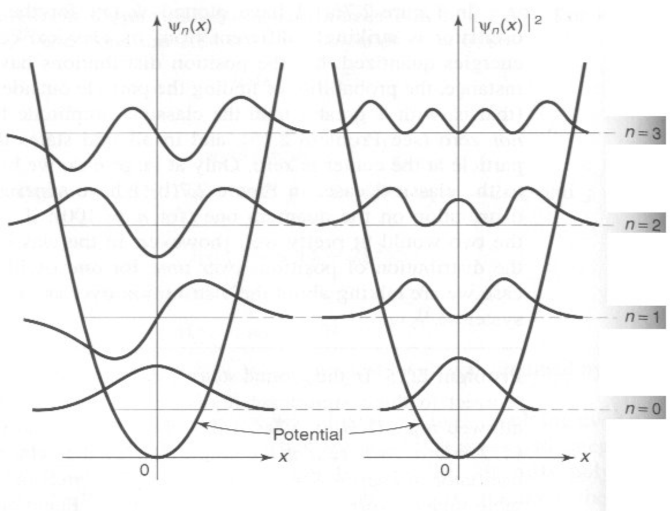
$$\xi H_n = \frac{1}{2}H_{n+1} + nH_{n-1}$$

Перейдем к $x$: $\xi = x/a \qquad a = \sqrt{\hbar/m\omega}$

$$\psi_n(x) = A_n H_n(\frac{x}{a})\exp(\frac{-x^2}{2a^2}) \qquad A_n = \frac{1}{\sqrt{2^n n! a\sqrt{\pi}}}$$

# Гармонический осциллятор

## Стационарные состояния




$$\psi_n(x) = \left(2^n n! a\sqrt{\pi}\right)^{-\frac{1}{2}} e^{-\frac{\xi^2}{2}} H_n(\xi)$$

$$\xi = \frac{x}{a}$$

$$H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2}$$

$$a = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$$

(формула Родригеса)

$n = 0$ $\quad E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega \quad \psi_0(x) = \left(\frac{1}{a\sqrt{\pi}}\right)^{\frac{1}{2}} e^{-x^2/2a^2}$

$n = 1$ $\quad E_1 = \frac{3}{2}\hbar\omega \quad \psi_1(x) = \left(\frac{1}{2a\sqrt{\pi}}\right)^{\frac{1}{2}} 2\left(\frac{x}{a}\right) e^{-x^2/2a^2}$

$n = 2$ $\quad E_2 = \frac{5}{2}\hbar\omega \quad \psi_2(x) = \left(\frac{1}{8a\sqrt{\pi}}\right)^{\frac{1}{2}} \left[2 - 4\left(\frac{x}{a}\right)^2\right] e^{-x^2/2a^2}$

$n = 3$ $\quad E_3 = \frac{7}{2}\hbar\omega \quad \psi_3(x) = \left(\frac{1}{48a\sqrt{\pi}}\right)^{\frac{1}{2}} \left[12\left(\frac{x}{a}\right) - 8\left(\frac{x}{a}\right)^3\right] e^{-x^2/2a^2}$

# Операторный метод

$$\xi = \frac{x}{\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}}$$

$$\left.\begin{aligned}\hat{a} &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\xi + \frac{\partial}{\partial\xi}\right)\\ \hat{a}^{+} &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\xi - \frac{\partial}{\partial\xi}\right)\end{aligned}\right\} \quad \hat{x} = \frac{\sqrt{\hbar/m\omega}}{\sqrt{2}}(\hat{a}+\hat{a}^{+}) \qquad \hat{p} = -i\frac{\sqrt{\hbar m\omega}}{\sqrt{2}}(\hat{a}-\hat{a}^{+})$$

$$[a, a^{+}] = \frac{1}{2}\left(\frac{-i}{\hbar}\right)[x, p_x] + \frac{1}{2}\left(\frac{i}{\hbar}\right)[p_x, x] = 1$$

$$\hat{H} = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{1}{2}kx^2 = \hbar\omega\left(a^{+}a + \frac{1}{2}\right) \qquad \hat{N} = \hat{a}^{+}a \qquad \boxed{\hat{H} = \hbar\omega(\hat{N} + \frac{1}{2})}$$

$$[\hat{H}\hat{N}] = 0$$

т.е. у ***N*** и ***H*** общие собств. функции

$$\hat{N}\varphi_n = n\varphi_n$$

$$\left[\hat{a}\hat{a}^{+}\right] = 1; \quad \left[\hat{a}\hat{N}\right] = \hat{a}; \quad \left[\hat{a}^{+}\hat{N}\right] = -\hat{a}^{+};$$

$$\hat{N}\hat{a}^{+}\varphi_n = (\hat{a}^{+}\hat{N} - \hat{a}^{+}\hat{N} + \hat{N}\hat{a}^{+})\varphi_n = (\hat{a}^{+}\hat{N} + \left[\hat{N}\hat{a}^{+}\right])\varphi_n = (n+1)\hat{a}^{+}\varphi_n \Rightarrow \boxed{\hat{a}^{+}\varphi_n = \sqrt{n+1}\varphi_{n+1}}$$

- с.знач. ***N*** изменяются на 1: $\hat{a}^{+}$ - повышающий оператор

$$\hat{N}\hat{a}\varphi_n = (\hat{a}\hat{N} - \hat{a}\hat{N} + \hat{N}\hat{a})\varphi_n = (\hat{a}\hat{N} + \left[\hat{N}\hat{a}\right])\varphi_n = (n-1)\hat{a}\varphi_n \Rightarrow \boxed{\hat{a}\varphi_n = \sqrt{n}\varphi_{n-1}}$$

$\hat{a}$ - понижающий

$$\left\langle\varphi_n\middle|\hat{H}\varphi_n\right\rangle = \hbar\omega(n + \frac{1}{2}) \geq 0 \Rightarrow n \geq -\tfrac{1}{2} \Rightarrow \hat{a}\varphi_0 = 0$$

$\varphi_0$ - основное состояние! Все функции ниже = 0

$$\hat{N}\varphi_0 = \hat{a}^{\dagger}\hat{a}\varphi_0 = 0 = 0\varphi_0 \Rightarrow \boxed{E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2}) \quad (n = 0, 1, 2, \ldots)}$$

$$\hat{a}\varphi_0 = 0 \Rightarrow \left(\xi + \frac{\partial}{\partial\xi}\right)\varphi_0 = 0 \Rightarrow \varphi_0 = A_0 e^{-\xi^2/2}$$

$$\varphi_n = \frac{1}{\sqrt{n!}}(\hat{a}^{\dagger})^n\varphi_0 \qquad \left(\xi - \frac{\partial}{\partial\xi}\right)^n e^{-\xi^2/2} = \mathscr{H}_n(\xi)e^{-\xi^2/2}$$

$$\Rightarrow$$

$$\boxed{\begin{aligned}\varphi_n &= A_n\mathscr{H}_n(\xi)e^{-\xi^2/2}\\ E_n &= \hbar\omega(n + \tfrac{1}{2})\end{aligned}}$$

# Вычисление средних операторным методом

$$\hat{x} = \frac{\sqrt{\hbar / m\omega}}{\sqrt{2}}(\hat{a} + \hat{a}^+) \qquad \hat{p} = -i\frac{\sqrt{\hbar m\omega}}{\sqrt{2}}(\hat{a} - \hat{a}^+) \qquad \langle \varphi_m | \varphi_n \rangle = \delta_{mn}$$

$$\langle x \rangle = \langle \varphi_n | x | \varphi_n \rangle = \frac{\sqrt{\hbar / m\omega}}{\sqrt{2}} \langle \varphi_n | (\hat{a} + \hat{a}^+) | \varphi_n \rangle \sim (\langle \varphi_n | \varphi_{n-1} \rangle + \langle \varphi_n | \varphi_{n+1} \rangle) = 0$$

**Аналогично:** $\langle p \rangle = \langle \varphi_n | p | \varphi_n \rangle \sim \langle \varphi_n | (\hat{a} - \hat{a}^+) | \varphi_n \rangle \sim (\langle \varphi_n | \varphi_{n-1} \rangle - \langle \varphi_n | \varphi_{n+1} \rangle) = 0$

$$\langle x^2 \rangle = \langle \varphi_n | x^2 | \varphi_n \rangle = \frac{\hbar / m\omega}{2} \langle \varphi_n | (\hat{a} + \hat{a}^+)^2 | \varphi_n \rangle = \frac{\hbar / m\omega}{2} \langle \varphi_n | (\hat{a}\hat{a}^+ + \hat{a}^+\hat{a}) | \varphi_n \rangle = \frac{\hbar}{m\omega}(n + \frac{1}{2})$$

$$\langle p^2 \rangle = \langle \varphi_n | p^2 | \varphi_n \rangle = -\frac{\hbar m\omega}{2} \langle \varphi_n | (\hat{a} - \hat{a}^+)^2 | \varphi_n \rangle = \frac{\hbar m\omega}{2} \langle \varphi_n | (\hat{a}\hat{a}^+ + \hat{a}^+\hat{a}) | \varphi_n \rangle = \hbar m\omega(n + \frac{1}{2})$$

$$\boxed{\Delta x \Delta p = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2} \sqrt{\langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2} = \hbar(n + \frac{1}{2})}$$

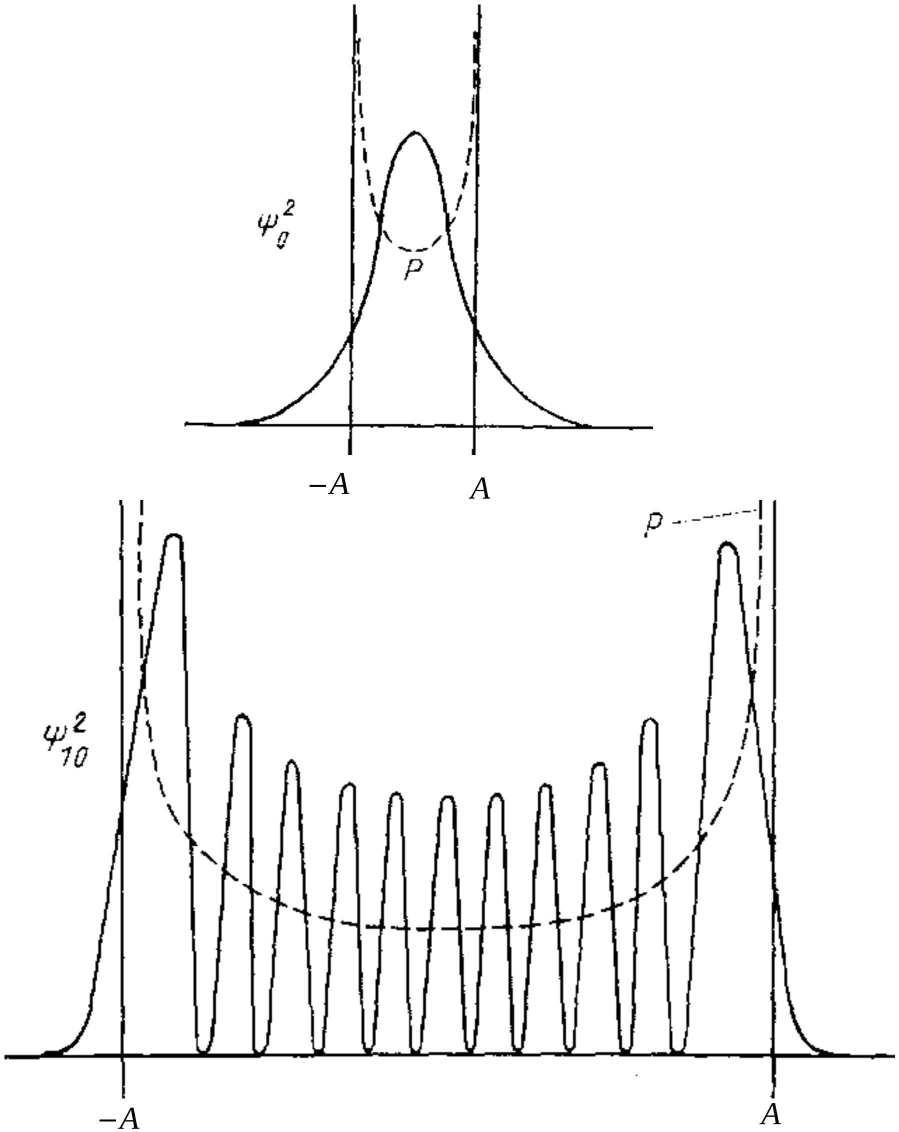
**В основном состоянии** $\Delta x \Delta p = \frac{1}{2}\hbar$ **min!**

**Найдем среднюю кинетическую и потенциальную энергии**

$$\boxed{\langle T \rangle = \frac{\langle p^2 \rangle}{2m} = \frac{\hbar\omega}{2}(n + \frac{1}{2}) = \frac{\langle E \rangle}{2}} \qquad \boxed{\langle U \rangle = \frac{m\omega^2 \langle x^2 \rangle}{2} = \frac{\hbar\omega}{2}(n + \frac{1}{2}) = \frac{\langle E \rangle}{2}}$$

# Гармонический осциллятор

## Принцип соответствия




$$\rho_{\text{квант}}(x) = \left|\varphi_n(x)\right|^2$$

$$dP_{\text{класс}}(x, x+dx) = \frac{dt}{T} = \frac{dx}{\dot{x}T}$$

$$x = A\cos\omega t$$

$$\dot{x} = -A\omega\sin\omega t$$

$$\frac{dP}{dx} = \rho_{\text{класс}}(x) = \frac{1}{2\pi\sqrt{A^2 - x^2}}$$

**При больших n квантовая плотность вероятности соответствует классической**

# Нестационарные состояния гармонического осциллятора

Суперпозиция двух состояний гармонического осциллятора

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2}}\varphi_n(x)\exp(-\frac{i}{\hbar}E_n t) + \frac{1}{\sqrt{2}}\varphi_m(x)\exp(-\frac{i}{\hbar}E_m t)$$

$$|\psi(x,t)|^2 = \frac{1}{2}|\varphi_n(x)|^2 + \frac{1}{2}|\varphi_m(x)|^2 + \varphi_n(x)\varphi_m(x)\cos(\omega_{nm}t)$$

Плотность вероятности осциллирует с разностной частотой $\omega_{nm} = \left|\frac{E_n - E_m}{\hbar}\right|$

$$\langle x\rangle = \int_{-\infty}^{\infty}\left\{x\frac{1}{2}|\varphi_n(x)|^2 + x\frac{1}{2}|\varphi_m(x)|^2 + \varphi_n(x)x\varphi_m(x)\cos(\omega_{nm}t)\right\}dx =$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty}\varphi_n^*(x)x\varphi_m(x)\cos(\omega_{nm}t)dx = \langle\varphi_n|x|\varphi_m\rangle \sim \langle\varphi_n|\hat{a}+\hat{a}^+|\varphi_m\rangle \neq 0 \text{ при } m = n\pm 1$$

***Правило отбора*** **для дипольных переходов (d=e<x> ) :**
**возможны переходы только между соседними уровнями**

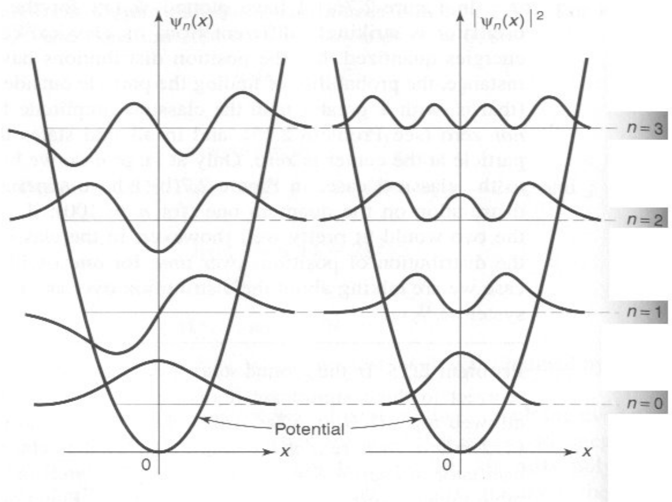
$$\boxed{\Delta n = \pm 1}$$

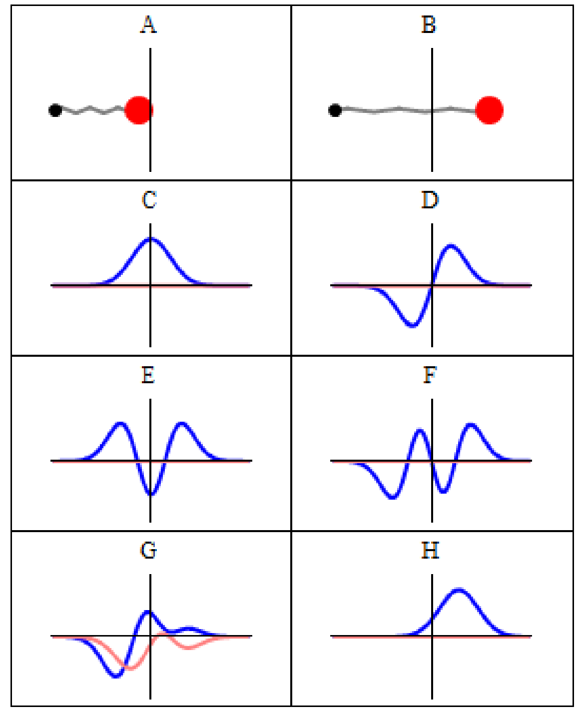
$$\boxed{\omega_{nm} = \omega}$$

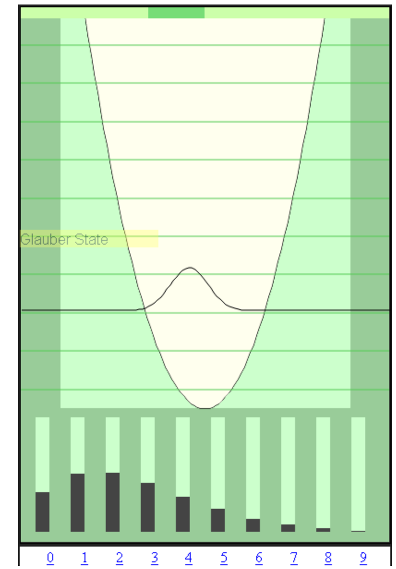
**В спектре гармонического осциллятора только одна частота -** $\boxed{\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}}$

# Гармонический осциллятор

## Нестационарные состояния




$$\psi(x,t) = \sum_n C_n \varphi_n(x) \mathrm{e}^{-i\frac{E_n}{\hbar}t}$$

**Нестационарные состояния получаются в результате суммирования (суперпозиции) стационарных состояний с некоторыми коэффициентами. Квадраты коэффициентов равны вероятности соответствующих состояний. Если вероятности подчиняются распределению Пуассона, то реализуется *Глауберовское когерентное состояние* квантового осциллятора - состояние, при котором произведение неопределённостей координаты и импульса принимает минимально возможное значение. В этом состоянии волновой пакет не расплывается, и его центр движется по классической траектории.**