КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА

Лекция №3: Квантовая механика и одномерное движение

А.Г. Семенов

I. ВЕРОЯТНОСТНАЯ ИНТЕРПРЕТАЦИЯ ВОЛНОВОЙ ФУНКЦИИ

На предыдущей лекции нами было получено уравнение Шредингера для частицы на прямой в координатном представлении, которое имеет вид

$$i\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t} = \hat{H}\psi(x,t) = -\frac{\partial_x^2\psi(x,t)}{2m} + V(x)\psi(x,t), \tag{1}$$

где волновая функция является по сути $\psi(x,t) = \langle x|\psi\rangle$ проекцией вектора состояния системы на собственные состояния оператора координаты $\hat{x}|x\rangle = x|x\rangle$ (собственные вектора понимаются в обобщенном смысле). Из этого следует тот факт, что квадрат модуля волновой функции, проинтегрированный по некоторому интервалу, имеет смысл вероятности найти частицу внутри данного интервала при измерении её координаты

$$P(a < x < b) = \int_a^b dx|\psi(x,t)|^2, \tag{2}$$

Таким образом квадрат модуля волновой функции $P(x,t) = |\psi(x,t)|^2$ по сути есть плотность вероятности обнаружить частицу вблизи данной точки. Нормировка волновой функции $\langle\psi|\psi\rangle$=1 означает тот факт, что полная вероятность всегда равна единице

$$\int dx|\psi(x,t)|^2 = 1, \tag{3}$$

и это свойство сохраняется с течением времени. Домножим уравнение Шредингера на комплексно-сопряженную волновую функцию и сложим его с сопряженным. В итоге получим

$$i\frac{\partial(\psi^*(x,t)\psi(x,t))}{\partial t} = -\frac{\psi^*(x,t)(\partial_x^2\psi(x,t))}{2m} + \frac{(\partial_x^2\psi^*(x,t))\psi(x,t)}{2m}. \tag{4}$$

Данное уравнение может быть переписано как уравнение непрерывности

$$\frac{\partial P(x,t)}{\partial t} = \partial_x J(x,t) \tag{5}$$

где плотность потока вероятности дается выражением

$$J(x,t) = \frac{i}{2m}\left(\psi^*(x,t)(\partial_x\psi(x,t)) - (\partial_x\psi^*(x,t))\psi(x,t)\right). \tag{6}$$

Это подкрепляет нашу интерпретацию волновой функции как амплитуды вероятности. Как мы говорили на предыдущих лекциях, Гильбертовым пространством состояний системы является пространство функций $\mathbb{L}^2$ с интегрируемым квадратом модуля. Это означает тот факт, что любое физически осуществимое состояние системы описывается нормируемой волновой функцией.

II. СОБСТВЕННЫЕ СОСТОЯНИЯ ГАМИЛЬТОНИАНА

Уравнение Шредингера по своему смыслу представляет собой динамическое уравнение, или, иными словами, оно описывает то, как волновая функция (вектор состояния системы) эволюционирует с течением времени, если в начальным момент времени он был известен. Среди всевозможных векторов из пространства состояний системы существует выделенный набор состояний, которые эволюционируют тривиальным образом. Это собственные вектора Гамильтониана системы $\hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle$, которые при эволюции умножаются на фазовый множитель $|n\rangle \to |n\rangle e^{-iE_n t}$. Поскольку Гамильтониан является самосопряженным оператором, все его собственные вектора образуют полный базис. Это означает, что любое начальное состояние системы всегда можно разложить по базису из собственных состояний Гамильтониана

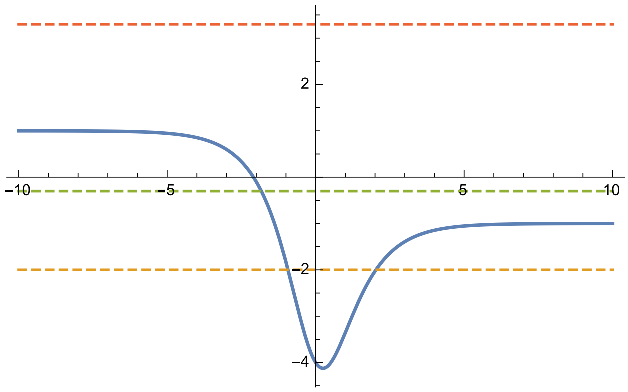
$$|\psi\rangle = \sum_n c_n|n\rangle \tag{7}$$

после чего эволюция выглядит как $c_n \to c_n e^{-iE_n t}$ умножение соответствующих коэффициентов разложения на фазовый множитель.

На этой лекции мы рассматриваем в качестве системы частицу на прямой, для которой уравнение на собственные состояния имеет вид

$$-\frac{\partial_x^2\psi_n(x,t)}{2m} + V(x)\psi_n(x,t) = E_n\psi_n(x,t) \tag{8}$$

Данное уравнение иногда называют стационарным уравнением Шредингера, хотя это не совсем корректно. Несложно заметить, что оно представляет собой линейное дифференциальное уравнение второго порядка. Это означает, что для любого хорошего потенциала $V(x)$ и при любом значении E оно всегда имеет два линейно независимых решения, а общее решение может быть представлено как их произвольная линейная комбинация. Однако этого еще не достаточно для того, чтобы полученное решения являлось собственным состоянием Гамильтониана. Необходимо , чтобы полученное решение лежало в $\mathbb{L}^2$. Это возможно лишь при определенных значениях E_n, которые и являются собственными значениями Гамильтониана. Давайте для примера рассмотрим случай, когда потенциал $V(x)$ отличен от константы лишь в ограниченной области вблизи начала координат (см рисунок). При $x \to \pm\infty$, $V(x) \to V_\pm$. Давайте качественно



обсудим то, как ведут себя решения стационарного уравнения Шредингера при разных значениях E. Пусть $E > V_- > V_+$. Тогда решения могут вести себя как $e^{\pm ix\sqrt{2m(E-V_\pm)}}$ при $x \to \pm\infty$. Это означает, что ни одна линейная комбинация не может лежать в $\mathbb{L}^2$, а значит собственных векторов Гамильтониана при $E > V_-$ не существует. Тем ни менее, тот факт, что поведение решений на больших расстояния весьма похоже на поведение собственных функций оператора импульса $\langle x|p\rangle$ дает нам указание на то, что у Гамильтониана существуют собственные состояния в оснащенном Гильбертовом пространстве. Оказывается, что обобщенные собственные состояния существеют при любом $E > V_-$. При $V_- > E > V_+$ ситуация совершенно аналогичная, но только на одном из концов мы можем выбрать решение ведущее себя как $e^{x\sqrt{2m(V_- - E)}}$, однако на другом конце мы также не можем составить линейную комбинацию, которая имела бы интегрируемый квадрат. Обобщенные собственные состояния отвечающие $E > V_+$ называются собственными состояниями непрерывного спектра. При $V_+ > E$ поведение на бесконечности имеет вид $e^{\pm x\sqrt{2m(V_\pm - E)}}$, что дает нам потенциальную возможность для существования собственных состояний, лежащих в $\mathbb{L}^2$. Данные состояния называются состояниями дискретного спектра. Заметим, что если они существуют, то для них $E > V_{min}$, где V_{min} - минимальное значение потенциала. И действительно, если $E \leq V_{min}$ то знак второй производной решения не меняется вдоль x, чего не может быть для функции спадающей на обоих концах действительной оси.

III. ЧАСТИЦА В ПОТЕНЦИАЛЬНОЙ ЯМЕ

В качестве следующего примера рассмотрим случай, при котором у Гамильтониана есть только собственные состояния дискретного спектра. Такое возможно только в том случае, когда $V(x) \to +\infty$ при $x \to \pm\infty$ и $V(x)$ ограничен снизу. В этом случае существует дискретный набор E_n, при которых существует решение уравнения

$$-\frac{\partial_x^2 \psi_n(x,t)}{2m} + V(x)\psi_n(x,t) = E_n \psi_n(x,t) \tag{9}$$

принадлежащее $\mathbb{L}^2$. Пронумеруем эти состояния начиная с нуля упорядочив их по E_n. Состояние отвечающее $n = 0$ и отвечающее минимальному собственному состоянию Гамильтониана называется основным состоянием. Состояние $n = 1$ называется первым возбужденным состояние, $n = 2$ - вторым возбужденным и т.д. Давайте обсудим характерные свойства данных состояний. Во-первых, в силу действительности коэффициентов в стационарном уравнении Шредингера мы всегда можем выбрать функции $\psi_n(x)$ действительными. Во-вторых, все собственные состояния невырожденные. Это означает, что каждому E_n соответствует ровно одно решение стационарного уравнения Шредингера, лежащее в $\mathbb{L}^2$. Кроме того справедлива осцилляторная теорема, которая состоит из двух утверждений. Первое утверждение состоит в том, что волновая функция $\psi_n(x)$ состояния номер n имеет ровно n нулей кроме нулей на $x = \pm\infty$. Второе утверждение говорит о том, что между двумя соседними нулями волновой функции ψ_n(x) лежит ровно один ноль волновой функции $\psi_{n+1}(x)$. Доказывать эту теорему мы здесь не будем.

В силу самосопряженности Гамильтониана вся совокупность собственных состояний образует ортонормированный базис в пространстве $\mathbb{L}^2$

$$\int dx \psi_n^*(x)\psi_m(x) = \delta_{mn}. \tag{10}$$

Несложно показать, что основное состояние системы минимизирует следующий функционал в пространстве $\mathbb{L}^2$

$$F[\psi] = \int dx \psi^*(x) \hat{H} \psi(x) = \int dx \left(\frac{1}{2m} |\partial_x \psi(x)|^2 + V(x) |\psi(x)|^2 \right) \tag{11}$$

при фиксированной норме $\int dx |\psi(x)|^2 = 1$.

IV. ГАРМОНИЧЕСКИЙ ОСЦИЛЛЯТОР

В качестве примера выпишем собственные состояния гармонического осциллятора с потенциалом $V(x) = \frac{m\omega^2 x^2}{2}$. В этом случае собственные значения Гамильтониана равны $E_n = \omega \left(n + \frac{1}{2}\right)$, а волновые функции собственных состояний выражаются через полиномы Эрмита

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \left(\frac{m\omega}{\pi} \right)^{1/4} H_n \left(\sqrt{m\omega} x \right) e^{-\frac{m\omega}{2} x^2} \tag{12}$$

которые определены как

$$H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^n e^{-\xi^2}}{d\xi^n}. \tag{13}$$

Известно, что они образуют полную систему функций на пространстве $\mathbb{L}^2_\rho$ с $\rho = e^{-\xi^2}$, причем

$$\int d\xi e^{-\xi^2} H_n(\xi) H_m(\xi) = 2^n n! \sqrt{\pi} \delta_{mn}. \tag{14}$$