Лекция 10

ПЛАН ЛЕКЦИИ

1. Волновая функция.
2. Уравнение Шредингера.
3. Примеры решения квантовых задач:

- движение свободной частицы;
- частица в одномерной глубокой потенциальной яме.

Из лекции 9:

Новая теория - *квантовая (волновая) механика* - 1926 – 1928 г.г. (В. Гейзенберг (немецкий физик), Э.Шредингер (австрийский физик) и П. Дирак (английский физик)).

Квантовая механика описывает законы движения и взаимодействия микрочастиц с учетом их волновых свойств.

Эрвин ШРЕДИНГЕР (*Erwin Rudolf Josef Alexander Schrödinger*)

Эрвин ШРЕДИНГЕР (1887-1961) — австрийский физик-теоретик, один из создателей квантовой механики, иностранный член-корреспондент (1928) и иностранный почетный член (1934) АН СССР. Разработал (1926) волновую механику, сформулировал ее основное уравнение (уравнение Шредингера). Труды по кристаллографии, математической физике, теории относительности, биофизике. Нобелевская премия (1933, совместно с П.Дираком).

ВОЛНОВАЯ ФУНКЦИЯ.

Квантовая механика - более общая физическая теория, чем *классическая механика*. Однако, при выполнении условий, когда волновыми свойствами частицы можно пренебречь, выводы квантовой механики должны совпадать с результатами классической механики. Принцип соответствия: *любая более общая физическая теория не должна исключать предыдущую, а должна включать ее как предельный частный случай*.

В основе квантовой механики лежит ряд постулатов.

Первый постулат: Состояние частицы в квантовой механике описывается заданием волновой функции, являющейся функцией пространственных координат и времени.

Обозначение: $\Psi(x, y, z, t)$ (пси).

Название: *волновая функция*, **пси-функция**.

Волновая функция содержит полную информацию о движении микрочастицы.

Второй постулат: Волновая функция имеет ***вероятностный*** смысл.

ВОЛНОВАЯ ФУНКЦИЯ.

В 1926г. немецкий физик М.Борн так сформулировал вероятностный смысл волновой функции в квантовой механике:

Квадрат модуля волновой функции $\Psi(x, y, z, t)$ имеет смысл плотности вероятности w, т.е. определяет вероятность нахождения частицы в момент времени t в окрестностях точки с координатами x, y, z.

$$w \sim \left|\Psi(x, y, z, t)\right|^2$$

Таким образом, физический смысл имеет не сама пси - функция, а квадрат ее модуля $\left|\Psi\right|^2$.

Почему физический смысл имеет квадрат пси-функции, а не сама функция?

Волновая функция в общем случае является комплексной функцией, то есть содержит действительную и мнимую части. Вероятность не может принимать мнимые значения.

СМЫСЛ И СВОЙСТВА ВОЛНОВОЙ ФУНКЦИИ.

Условие нормировки: $$\int_V |\Psi|^2 dV = 1$$

Условие нормировки – это интеграл от выражения $dW = |\Psi|^2 dV$, взятый по всему объему, доступному для движения микрочастицы.

Условие нормировки означает, что частица существует в пространстве с объемом V.

Волновая функция обладает рядом <u>свойств</u> и удовлетворяет <u>ограничительным условиям</u>:

1. <u>Функция должна быть *конечной*</u>. Функция характеризует вероятность обнаружения микрочастицы в элементе объема, следовательно, ее значение не должно быть больше единицы.

СМЫСЛ И СВОЙСТВА ВОЛНОВОЙ ФУНКЦИИ.

2. <u>Функция должна быть *однозначной*</u>. Вероятность не может быть неоднозначной.

3. <u>Функция должна быть *непрерывной*</u>. Вероятность не может изменяться скачком.

Таким образом, из смысла пси–функции вытекает, что квантовая механика имеет статистический характер.

Она не позволяет определить местонахождение частицы в пространстве или траекторию, по которой движется частица.

С помощью пси–функции можно лишь предсказать, с какой вероятностью частица может быть обнаружена в различных точках пространства.

ОБЩЕЕ (НЕСТАЦИОНАРНОЕ) УРАВНЕНИЕ ШРЕДИНГЕРА

Основа классической механики - уравнения Ньютона + теория Эйнштейна.

В этих уравнениях используется понятие траектории.

Основу квантовой механики - уравнение, описывающее двойственную природу микрочастиц.

Состояние микрочастицы в квантовой механике задается волновой функцией (амплитудой вероятности), которая является функцией координат и времени.

Волновая функция (точнее, величина $|\Psi|^2$) определяет вероятность пребывания частицы в момент времени t в объеме dV, т.е. в области с координатами x и $x+dx$, y и $y+dy$, z и $z+dz$.

Следовательно, основное уравнение должно быть уравнением относительно волновой функции.

ОБЩЕЕ (НЕСТАЦИОНАРНОЕ) УРАВНЕНИЕ ШРЕДИНГЕРА

Так как уравнение должно учитывать волновые свойства частиц, оно должно быть *волновым* уравнением.

Шредингер - впервые предложил такое уравнение (1926г.)

Релятивистский вариант уравнения был дан Дираком.

Уравнение Шредингера, как и многие основные уравнения физики (например, уравнения Ньютона в классической механике, уравнения Максвелла для электромагнитного поля), не выводится, а постулируется.

Правильность уравнения показывается многочисленными опытами, что придает ему характер закона природы.

ОБЩЕЕ (НЕСТАЦИОНАРНОЕ) УРАВНЕНИЕ ШРЕДИНГЕРА

Уравнение Шредингера (*общее или нестационарное уравнение Шредингера*) имеет вид:

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

Самостоятельно: сравнить с волновым уравнением электромагнитной волны.

где m – масса частицы, i – мнимая единица, Δ - оператор Лапласа

$$\Delta\Psi = \frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\Psi}{\partial z^2},$$

$U(x,y,z,t)$ - потенциальная функция частицы в силовом поле.

Решением уравнения Шредингера является пси-функция.

Вид пси-функции зависит от функции $U(x, y, z, t)$.

Но: определить вид этой функции в каждой конкретной задаче – основная и трудная задача.

Более простой случай - движение частиц в стационарном силовом поле. Это *стационарные* состояния или *состояния с фиксированными значениями энергии*.

СТАЦИОНАРНОЕ УРАВНЕНИЕ ШРЕДИНГЕРА

Стационарные состояния наиболее часто встречаются в приложениях квантовой механики.

Если силовое поле, в котором движется частица, стационарно, то функция U не зависит явно от времени и имеет смысл потенциальной энергии частицы во внешнем поле.

Уравнение Шредингера для стационарных состояний:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi + U\left(x, y, z, \cancel{t}\right)\Psi = i\hbar\cancelto{0}{\frac{\partial\Psi}{\partial t}} \qquad \boxed{\Delta\Psi + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E - U\right)\Psi = 0}$$

E – полная энергия частицы, которая для стационарного поля остается постоянной.

Решение стационарного уравнения находят в виде двух сомножителей, один из которых зависит только от координат, а другой только от времени:

$$\Psi\left(x, y, z, t\right) = \psi\left(x, y, z\right)\cdot exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right)$$

СТАЦИОНАРНОЕ УРАВНЕНИЕ ШРЕДИНГЕРА

Уравнение Шредингера для стационарных состояний содержит в качестве параметра полную энергию $\boldsymbol{E}$ частицы.

Из теории дифференциальных уравнений: подобные уравнения имеют бесчисленное множество решений. Решения, имеющие физический смысл, определяются наложением граничных условий.

Условия для уравнений Шредингера: волновые функции и их первые производные должны быть конечными, однозначными и непрерывными.

Из анализа: решения уравнения Шредингера имеют физический смысл не при любых значениях параметра $\boldsymbol{E}$, а только при определенном их наборе, характерном для конкретной задачи.

Эти значения энергии называются **собственными**.

Решения, которые соответствуют *собственным* значениям энергии, называются **собственными функциями**.

СТАЦИОНАРНОЕ УРАВНЕНИЕ ШРЕДИНГЕРА

Совокупность собственных значений величины называется ее **спектром**.

Собственные значения полной энергии $\boldsymbol{E}$ могут образовывать как непрерывный, так и дискретный ряд.

В первом случае говорят о *непрерывном* или *сплошном спектре*, во втором – о *дискретном спектре*.

В случае дискретного спектра собственные значения и собственные функции можно пронумеровать:

$$E_1, \quad E_2, \quad \ldots, \quad E_n, \quad \ldots,$$

$$\psi_1, \quad \psi_2, \ldots, \quad \psi_3, \ldots .$$

Таким образом, квантование энергии получается из основных положений квантовой механики без каких-либо дополнительных предположений.

ПРИМЕРЫ РЕШЕНИЯ КВАНТОВЫХ ЗАДАЧ

Рассмотрим простейшие стационарные задачи квантовой механики.

<u>Движение свободной частицы</u>

Свободная частица – частица, движущаяся в отсутствие внешних полей.

Рассмотрим одномерный случай. Пусть частица движется вдоль оси ***x***.

На свободную частицу силы не действуют, потенциальная энергия частицы $U(x) = const$ и ее можно принять равной нулю.

Тогда полная энергия совпадает с ее кинетической энергией.

Вид уравнения Шредингера:

$$\Delta\psi + \frac{2m}{\hbar^2}(E - \cancelto{0}{U})\psi = 0 \quad \Rightarrow \quad \boxed{\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2}E\psi = 0}$$

Движение свободной частицы

$$\boxed{\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+\frac{2m}{\hbar^2}E\psi=0}$$

Введем обозначение $k^2=\frac{2m}{\hbar^2}E$

С учетом обозначения: $$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+k^2\psi=0$$

Это стандартное однородное дифференциальное уравнение второго порядка.

Уравнение известно из теории гармонических колебаний.

Решение: $$\psi(x)=a\sin(kx+\alpha)$$

Движение свободной частицы

$$\boxed{\frac{\partial^2\psi}{\partial \boldsymbol{x}^2} + \boldsymbol{k}^2\psi = 0}$$

Решение удовлетворяет ограничительным условиям для пси–функции при любых ***k*** и ***x***: *конечность, однозначность, непрерывность***.**

Вывод: частица может иметь любые возможные значения энергии.

$$\boldsymbol{k}^2 = \frac{\boldsymbol{2m}}{\hbar^2}\boldsymbol{E} \quad \Longrightarrow \quad \boldsymbol{E} = \hbar^2\boldsymbol{k}^2 / \boldsymbol{2m}$$

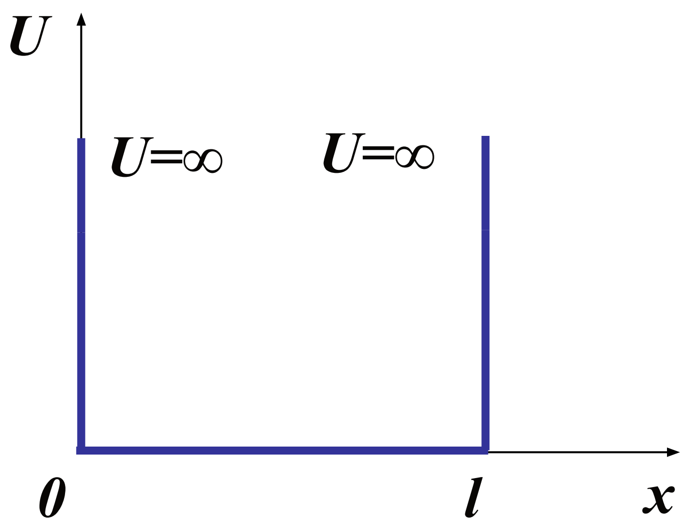
k - волновое число.

<u>Вывод</u>: свободная частица имеет <u>непрерывный спектр энергии</u>.

Частица в одномерной бесконечно глубокой прямоугольной потенциальной яме.

Задача: найти собственные значения энергии и соответствующие им собственные функции для частицы, находящейся в бесконечно глубокой одномерной потенциальной яме.

> *Потенциальная яма* - область пространства, в которой потенциальная энергия частицы достигает локального минимума.



Одномерный случай: частица движется только вдоль оси x.

Пусть движение ограничено непроницаемыми для частицы отвесными стенками с координатами $x = 0$ и $x = l$.

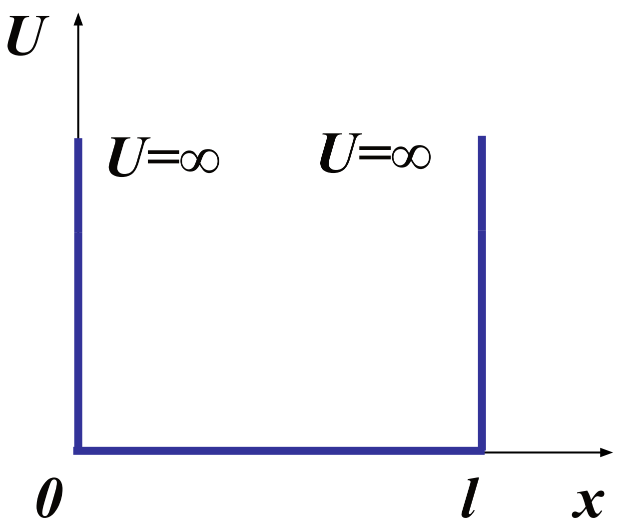
Частица в одномерной бесконечно глубокой прямоугольной потенциальной яме.

Вид потенциальной энергии: $\boldsymbol{U = 0}$ при $0 \le \boldsymbol{x} \le \boldsymbol{l}$ **;**

$\boldsymbol{U} = \infty$ при $\boldsymbol{x} < 0$ и $\boldsymbol{x} > \boldsymbol{l}$.

Вид уравнения Шредингера:

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



За пределы потенциальной ямы частица попасть не может.

Поэтому вероятность обнаружения частицы вне ямы равна нулю.

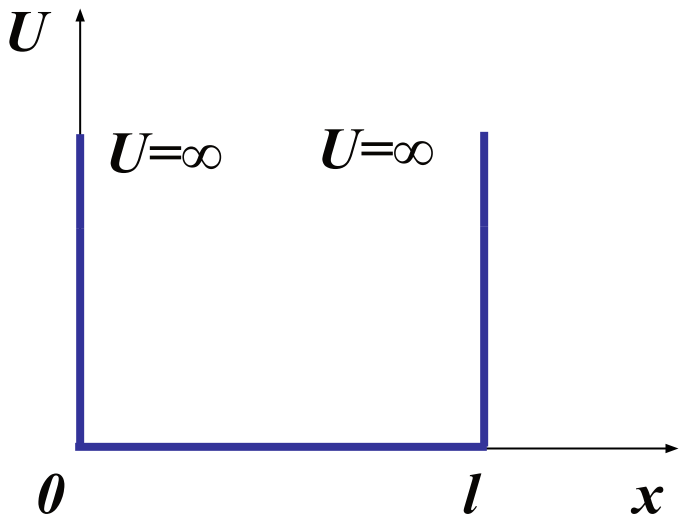
Следовательно, за пределами ямы $\psi = \boldsymbol{0}$

Частица в одномерной бесконечно глубокой прямоугольной потенциальной яме.

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

Функция ψ должна быть непрерывной, следовательно, она должна быть равна нулю и на границах ямы:

$$\psi(0)=\psi(l)=0$$



В области $x > 0$ и $x < l$ уравнение Шредингера имеет вид:

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+\frac{2m}{\hbar^2}E\psi=0,$$

поскольку в этой области $U = 0$.

Частица в одномерной бесконечно глубокой прямоугольной потенциальной яме.

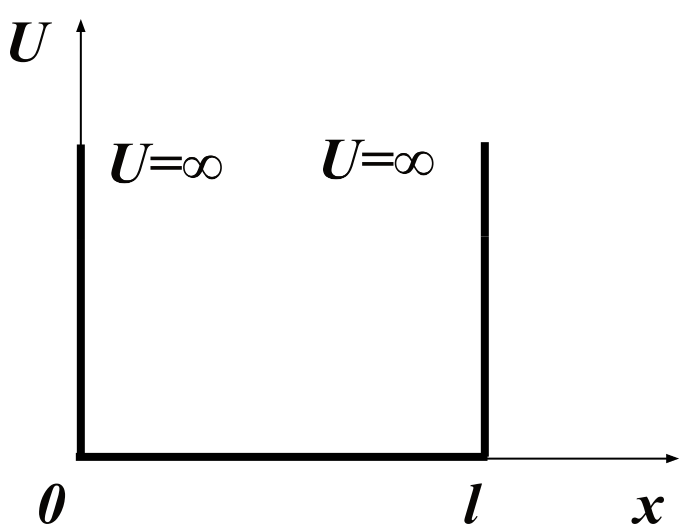
$$\boxed{\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+\frac{2m}{\hbar^2}(E-U)\psi=0}$$

$$\boxed{\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+\frac{2m}{\hbar^2}E\psi=0}$$

Решение - как в предыдущей задаче.

$$k^2=\frac{2m}{\hbar^2}E$$

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+k^2\psi=0$$



Это уравнение колебаний. Решение:

$$\psi(x)=a\sin(kx+\alpha)$$

a, ***k*** и α- константы.

Определим α и ***k*** из граничных условий:

$$\psi(0)=\psi(l)=0$$

Частица в одномерной бесконечно глубокой прямоугольной потенциальной яме.

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

$$\boxed{\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+\frac{2m}{\hbar^2}E\psi=0}$$

$$\boxed{\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+k^2\psi=0}$$

$$\psi(x)=a\sin(kx+\alpha)$$

Из условия $\psi(0)=0$ получим:

$$\psi(0)=a\sin\alpha=0 \Longrightarrow \alpha=0$$

Второе граничное условие - $\psi(l)=0$:

$$\psi(l)=a\sin kl=0$$

Это соотношение выполняется при условии:

$$kl=\pm n\pi \quad (n=1,2,3,\ldots). \Longrightarrow k=\pm\frac{n\pi}{l}$$

Исследуем полученные решения.

$$k^2=\frac{2m}{\hbar^2}E \Longrightarrow E=\frac{k^2\hbar^2}{2m}$$

1. ***Энергия*** частицы в потенциальной яме.

$$E=\frac{\pi^2\hbar^2}{2ml^2}n^2, \quad (n=1,\ 2,\ 3,\ \ldots)$$

Частица в одномерной бесконечно глубокой прямоугольной потенциальной яме.

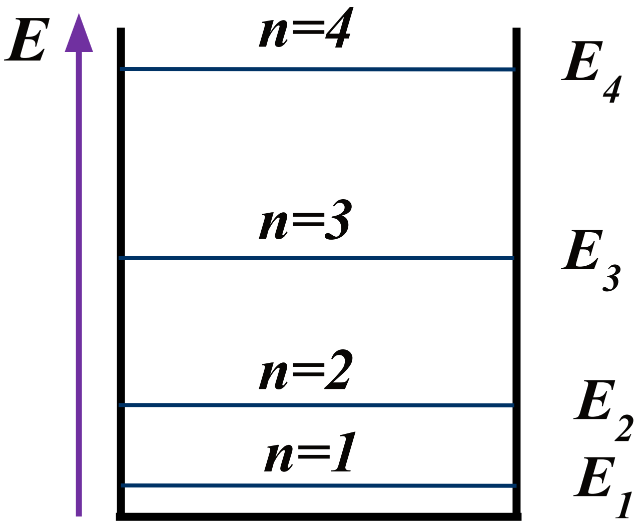
$$E = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ml^2} n^2, \qquad n = 1,\ 2,\ 3,\ \ldots$$

Таким образом, стационарное уравнение Шредингера удовлетворяется только при собственных значениях энергии, зависящих от целого числа n.

Следовательно, энергия E_n частицы принимает лишь *дискретные значения*, т.е. *квантуется*.

Частица в одномерной бесконечно глубокой прямоугольной потенциальной яме.

Квантованные значения энергии $\boldsymbol{E_n}$ - это *уровни энергии*, а число $\boldsymbol{n}$, определяющее энергетические уровни частицы, - *главное квантовое число*.



Универсальный принцип природы: всякий объект стремится к состоянию с минимальной энергией.

Это характерно и для микрочастиц: наиболее устойчивым является состояние с минимальной энергией.

Стационарное состояние с минимальной энергией - ***основное состояние*** *(основной уровень)*. Все остальные стационарные состояния (уровни) - ***возбужденные***.

Частица в одномерной бесконечно глубокой прямоугольной потенциальной яме.

2. Определим ***собственные*** значения функции $\psi(x)$.

Подставим в уравнение $\psi(x) = a\,sin(kx)$ значение $k = \pm\dfrac{n\pi}{l}$

$$\psi_n(x) = a\,sin(n\pi x / l)$$

Коэффициент a определим из условия нормировки ($\int_V |\Psi|^2 dV = 1$):

$$a^2 \int_0^l sin^2\left(\frac{n\pi x}{l}\right)dx = 1$$

(Задача одномерная, интеграл по объему заменен на интеграл по координате x).

Результат интегрирования: $\dfrac{a^2 l}{2} = 1.$ Отсюда $a = \sqrt{2/l}$.

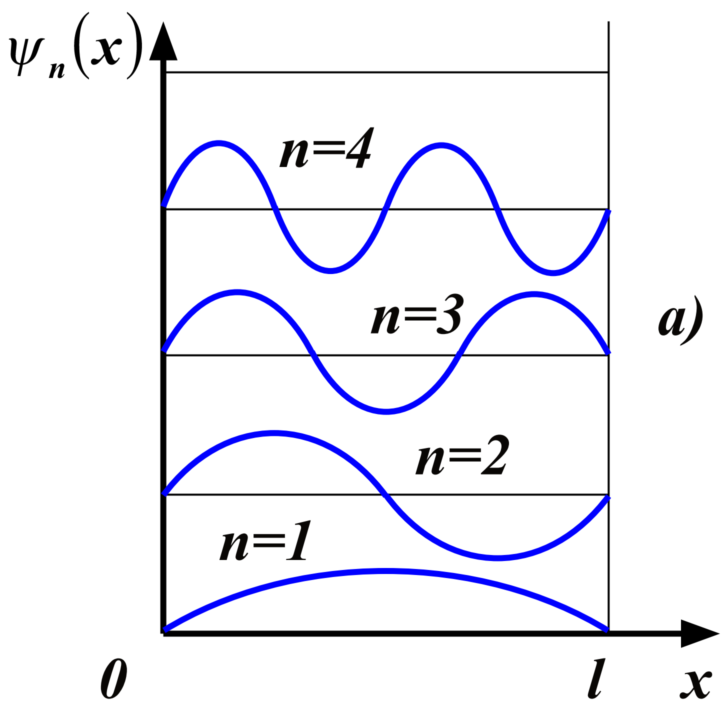
Окончательно: $\psi_n(x) = \sqrt{\dfrac{2}{l}}\,sin\left(\dfrac{n\pi}{l}x\right)$ (n = 1, 2, 3, …)

Частица в одномерной бесконечно глубокой прямоугольной потенциальной яме.

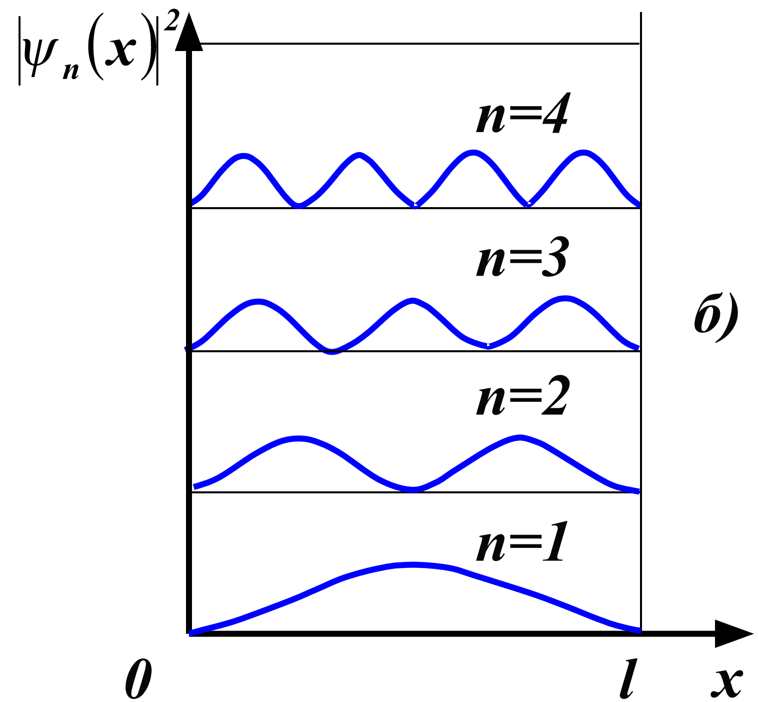
$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{l}}\, sin\left(\frac{n\pi}{l}x\right) \qquad (n = 1,\ 2,\ 3,\ \ldots)$$

Графики собственных функций - рисунок а).

Рисунок б) - плотность вероятности $|\psi_n(x)|^2$ обнаружения частицы на различных расстояниях от стенок ямы.

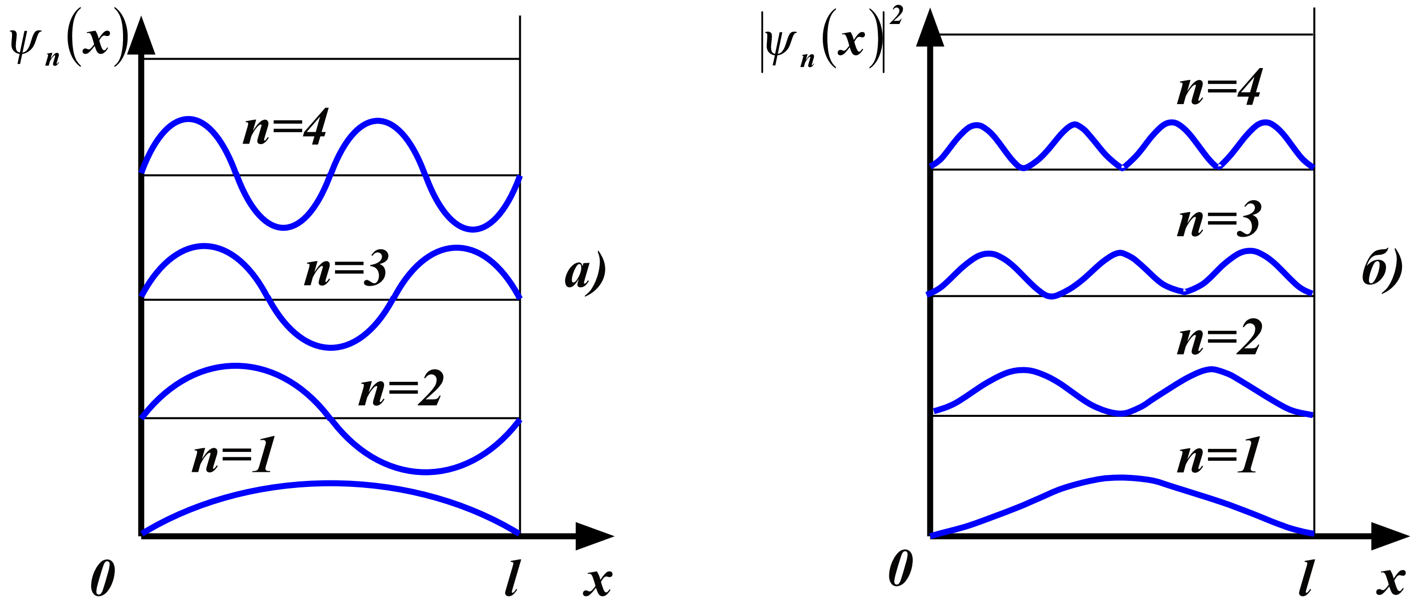


а)



б)

Частица в одномерной бесконечно глубокой прямоугольной потенциальной яме.



Пример: в состоянии с $\boldsymbol{n}$ = 2 частица не может быть обнаружена в середине ямы и вместе с тем одинаково часто бывает как в левой, так и в правой половинах ямы.

Такое представление частицы несовместимо с представлением о траекториях.