

Уравнение Шрёдингера



Презентацию составили
студенты II курса Института химии:

Чесноков Дмитрий
Рыбаков Кирилл

Саратов 2015



Э́рвин Ру́дольф Йо́зеф Алекса́ндр Шре́дингер (нем. Erwin Rudolf Josef Alexander Schrödinger; МФА: [ˈɛrvɪːn ˈʃrøːdɪŋɐ]; 12 августа 1887, Вена — 4 января 1961, там же) — австрийский физик-теоретик, один из создателей квантовой механики. Лауреат Нобелевской премии по физике (1933). Член ряда академий наук мира, в том числе иностранный член Академии наук СССР (1934).

Erwin Schrödinger

Шрёдингеру принадлежит ряд фундаментальных результатов в области квантовой теории, которые легли в основу волновой механики: он сформулировал волновые уравнения (стационарное и зависящее от времени уравнения Шрёдингера), показал тождественность развитого им формализма и матричной механики, разработал волномеханическую теорию возмущений, получил решения ряда конкретных задач. Шрёдингер предложил оригинальную трактовку физического смысла волновой функции; в последующие годы неоднократно подвергал критике общепринятую копенгагенскую интерпретацию квантовой механики (парадокс «кота Шрёдингера» и др.)



Молодой Шрёдингер

- Кроме того, он является автором множества работ в различных областях физики: статистической механике и термодинамике, физике диэлектриков, теории цвета, электродинамике, общей теории относительности и космологии; он предпринял несколько попыток построения единой теории поля. В книге «Что такое жизнь?» Шрёдингер обратился к проблемам генетики, взглянув на феномен жизни с точки зрения физики. Он уделял большое внимание философским аспектам науки, античным и восточным философским концепциям, вопросам этики и религии.
- Биографы и современники не раз отмечали разносторонность интересов Шрёдингера, его глубокие познания в философии и истории. Он владел шестью иностранными языками (помимо «гимназических» древнегреческого и латыни, знал английский, французский, испанский и итальянский), читал классические произведения в оригинале и занимался их переводом, писал стихи (в 1949 году был выпущен сборник), увлекался скульптурой.



Памятная табличка на здании Академической гимназии

Согласно фольклору, столь распространенному среди физиков, случилось это так: в 1926 Эрвин Шрёдингер выступал на научном семинаре в Цюрихском университете. Он рассказывал о странных новых идеях, витающих в воздухе, о том, что объекты микромира часто ведут себя скорее как волны, нежели как частицы. Тут слова попросил пожилой преподаватель и сказал: «Шрёдингер, вы что, не видите, что всё это чушь? Или мы тут все не знаем, что волны — они на то и волны, чтобы описываться волновыми уравнениями?» Шрёдингер воспринял это как личную обиду и задался целью разработать волновое уравнение для описания частиц в рамках квантовой механики — и с блеском справился с этой задачей.



Фридрих Хазенёрль оказал большое влияние на формирование Шрёдингера как учёного

Шрёдингер применил к понятию волн вероятности классическое дифференциальное уравнение волновой функции и получил знаменитое уравнение, носящее его имя. Подобно тому как обычное уравнение волновой функции описывает распространение, например, ряби по поверхности воды, уравнение Шрёдингера описывает распространение волны вероятности нахождения частицы в заданной точке пространства. Пики этой волны (точки максимальной вероятности) показывают, в каком месте пространства скорее всего окажется частица. Хотя уравнение Шрёдингера относится к области высшей математики, оно очень важно для понимания современной физики.

- Уравнение Шрёдингера — уравнение, описывающее изменение в пространстве (в общем случае, в конфигурационном пространстве) и во времени чистого состояния, задаваемого волновой функцией, в гамильтоновых квантовых системах. Играет в квантовой механике такую же важную роль, как уравнение второго закона Ньютона в классической механике. Установлено Эрвином Шрёдингером в 1925 году, опубликовано в 1926 году.



Шрёдингер в год получения
Нобелевской премии

- Уравнение Шрёдингера предназначено для частиц без спина, движущихся со скоростями много меньшими скорости света.

Уравнение Шредингера не выводится, а постулируется.

- Правильность этого уравнения подтверждается согласием с опытом получаемых с его помощью результатов, что, в свою очередь, придает ему характер закона природы.
- Наиболее общая форма уравнения Шрёдингера — это форма, включающая зависимость от времени :

Зависимое от времени уравнение *(общий случай)*

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

где \hat{H} — гамильтониан.

- Пример нерелятивистского уравнения Шрёдингера в координатном представлении для точечной частицы массы m , движущейся в потенциальном поле с потенциалом $V(\vec{r}, t)$:

Зависящее от времени уравнение Шрёдингера

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}, t) \right] \Psi(\vec{r}, t)$$

Формулировка

- Общий случай:

В квантовой физике вводится комплекснозначная функция Ψ , описывающая чистое состояние объекта, которая называется волновой функцией. В наиболее распространенной копенгагенской интерпретации эта функция связана с вероятностью обнаружения объекта в одном из чистых состояний (квадрат модуля волновой функции представляет собой плотность вероятности). Поведение гамильтоновой системы в чистом состоянии полностью описывается с помощью волновой функции.

- Отказавшись от описания движения частицы с помощью траекторий, получаемых из законов динамики, и определив вместо этого волновую функцию, необходимо ввести в рассмотрение уравнение, эквивалентное законам Ньютона и дающее возможность нахождения Ψ в частных физических задачах. Таким уравнением является уравнение Шрёдингера.

Пусть волновая функция задана в n -мерном конфигурационном пространстве, тогда в каждой точке с координатами $r(x_1, x_2, x_3, \dots, x_n)$, в определенный момент времени t она будет иметь вид

$\Psi(r, t)$. В таком случае уравнение Шрёдингера запишется в виде:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi(\vec{r}, t) + E_p(\vec{r}, t) \Psi(\vec{r}, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}, t), \quad (1)$$

$$\hbar = \frac{h}{2\pi}$$

где \hbar — постоянная Планка; m — масса частицы, $E_p(r, t)$ — внешняя по отношению к частице потенциальная энергия в точке

$r(x_1, x_2, x_3, \dots, x_n)$ в момент времени t , Δ — оператор Лапласа (или лапласиан), эквивалентной системе координат $\Delta \equiv \nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_3^2} + \dots + \frac{\partial^2}{\partial x_n^2}$.

Случай трёхмерного пространства

В трёхмерном случае пси-функция является функцией трёх координат и $\Delta\Psi$ в декартовой системе координат заменяется выражением

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

тогда уравнение Шрёдингера примет вид:

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

где $E_p(x, y, z)$ - потенциальная энергия в точке (x, y, z)

Стационарное уравнение Шрёдингера

Форма уравнения Шрёдингера показывает, что относительно времени его решение должно быть простым, поскольку время входит в это уравнение лишь через первую производную в правой части. Действительно, частное решение для специального случая, когда E_p не является функцией времени, можно записать в виде:

$$\Psi(\vec{r}, t) = \psi(\vec{r})e^{-iEt/\hbar}, \quad (2)$$

→

где функция $\psi(\vec{r})$ удовлетворяет уравнению:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(\vec{r}) + E_p(\vec{r})\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}), \quad (3)$$

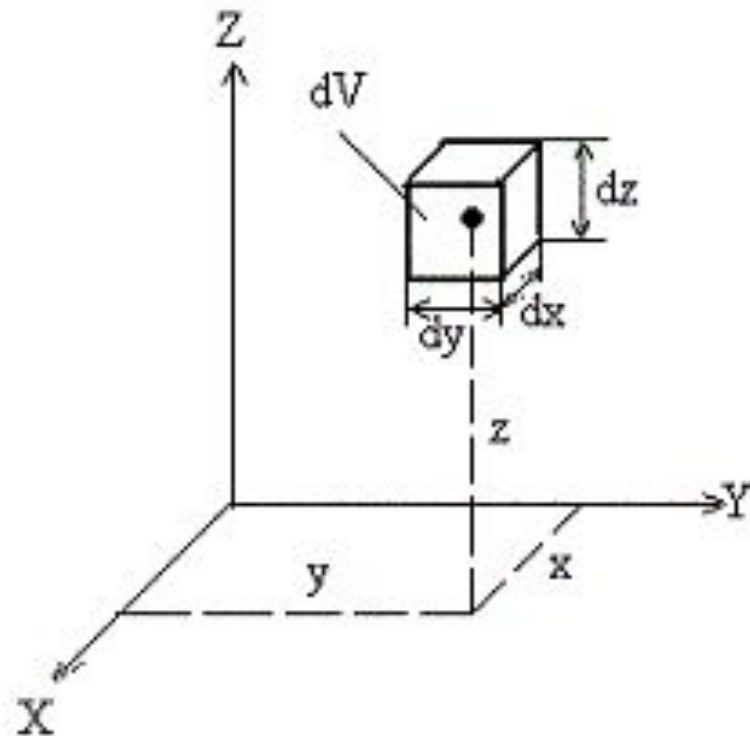
которое получается из уравнения Шрёдингера (1) при подстановке в него указанной выше формулы для Ψ (2). Заметим, что это уравнение вообще не содержит времени; в связи с этим оно называется стационарным уравнением Шрёдингера (уравнение Шрёдингера, не содержащее времени).

Выражение (2) является лишь частным решением зависящего от времени уравнения Шрёдингера (1), общее решение представляет собой линейную комбинацию всех частных решений вида $(\vec{2})$. Зависимость функции $\Psi(r, t)$ от времени проста, но зависимость её от координаты не всегда имеет элементарный вид, так как уравнение $(\vec{3})$ при одном выборе вида потенциальной функции $E_p(r)$ совершенно отличается от того же уравнения при другом выборе этой функции. В действительности, уравнение (3) может быть решено аналитически лишь для небольшого числа частных типов функции $E_p(r)$

Важное значение имеет интерпретация величины E в уравнении (2). Она производится следующим путём: временная зависимость функции $\Psi(r, t)$ в уравнении (2) имеет экспоненциальный характер, причём коэффициент при t в показателе экспоненты выбран так, что правая часть уравнения (3) содержит просто постоянный множитель E . В левой же части уравнения (3) функция Ψ умножается на потенциальную энергию $E_p(r)$. Следовательно, из соображений размерности вытекает, что величина E должна иметь размерность энергии. Единственной величиной с размерностью энергии, которая постоянна в механике, является полная (сохраняющаяся) энергия системы; таким образом, можно предполагать, что E представляет собой полную энергию. Согласно физической интерпретации уравнения Шрёдингера, E действительно является полной энергией частицы при движении, описываемом функцией $\Psi(r, t)$.

Для чего применяется уравнение Шрёдингера?

- Как уже отмечалось, это основное уравнение квантовой механики. Если его записать и решить (что вообще не простая задача) для конкретной микрочастицы, то мы получим значение пси-функции в любой точке пространства, в котором движется частица. Что это дает? Квадрат модуля пси-функции $|\psi|^2$ характеризует вероятность обнаружения частицы в той или иной области пространства. Возьмем некоторую точку в пространстве с координатами x, y, z (рис).



Какова вероятность обнаружить частицу в этой точке? Ответ: эта вероятность равна нулю! (точка не имеет размеров, попасть в точку частица просто физически не может). Значит, вопрос поставлен некорректно. Поставим его иначе: какова вероятность обнаружить частицу в малой области пространства объемом $dV = dx dy dz$ с центром в выбранной точке?

Ответ: $dP = \psi^2(x, y, z) dV$, (4)

где dP – элементарная вероятность обнаружить частицу в элементарном объеме dV . Уравнение (4) справедливо для действительной пси-функции (она может быть и комплексной, в этом случае в уравнение (4) надо подставлять квадрат модуля пси-функции). Если область пространства имеет конечный объем V , то вероятность P обнаружить частицу в этом объеме находится интегрированием выражения (4) по объему V :

$$P = \int_V \psi^2(x, y, z) dV \quad (5)$$

Напомним, что вероятностное описание движения микрочастиц – основная идея квантовой механики. Таким образом, с помощью уравнения Шрёдингера решается основная задача квантовой механики: описание движения исследуемого объекта, в данном случае квантово-механической частицы.

Отметим еще ряд важных обстоятельств. Уравнение Шрёдингера является дифференциальным уравнением второго порядка. Следовательно, в процессе его решения появятся две произвольные постоянные. Как их найти? Для этого используют так называемые граничные условия: из конкретного содержания физической задачи должно быть известно значение пси-функции на границах области движения микрочастицы. Кроме того, используется так называемое условие нормировки, которому должна удовлетворять пси-функция:

$$\int_V \psi^2(x,y,z)dV = 1$$

Смысл этого условия прост: вероятность обнаружить частицу хоть где-нибудь внутри области ее движения есть достоверное событие, вероятность которого равна единице.

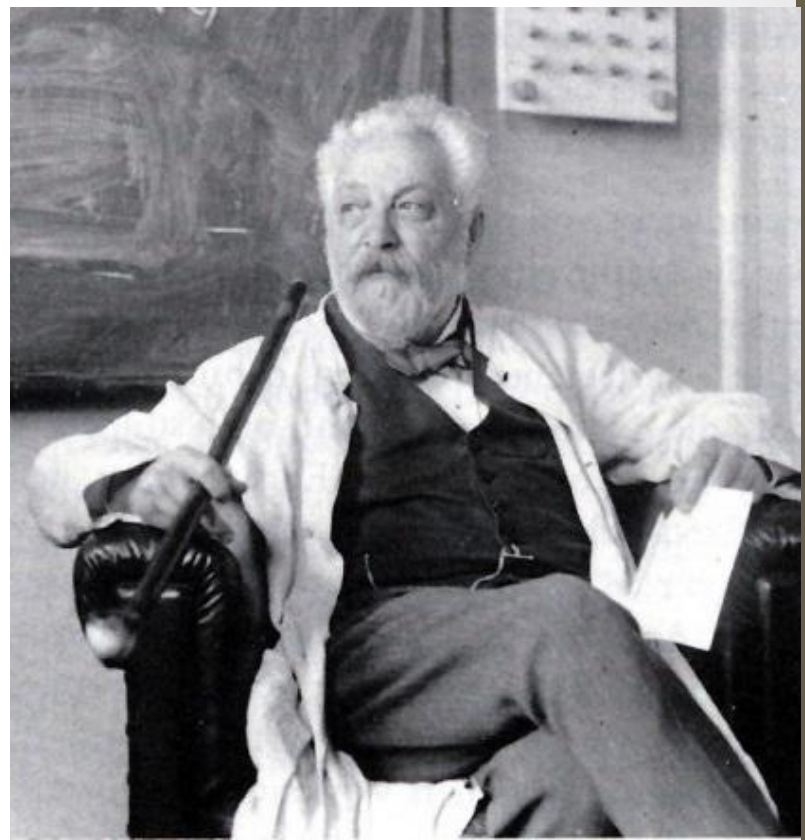
Именно граничные условия наполняют решение уравнения Шрёдингера физическим смыслом. Без этих условий решение уравнения есть чисто математическая задача, лишенная физического смысла. В следующем разделе на конкретном примере рассмотрено применение граничных условий и условия нормировки при решении уравнения Шрёдингера.

Когда Шрёдингер впервые опубликовал свои результаты, в мире теоретической физики разразилась буря. Дело в том, что практически в то же время появилась работа современника Шрёдингера — Вернера Гейзенберга (см. Принцип неопределенности Гейзенберга), в которой автор выдвинул концепцию «матричной механики», где те же задачи квантовой механики решались в другой, более сложной с математической точки зрения матричной форме.



Вернер Гейзенберг, создатель матричной механики

Переполох был вызван тем, что ученые попросту испугались, не противоречат ли друг другу два в равной мере убедительных подхода к описанию микромира. Волнения были напрасны. Сам Шрёдингер в том же году доказал полную эквивалентность двух теорий — то есть из волнового уравнения следует матричное, и наоборот; результаты же получаются идентичными. Сегодня используется в основном версия Шрёдингера (иногда его теорию называют «волновой механикой»), так как его уравнение менее громоздкое и его легче преподавать.

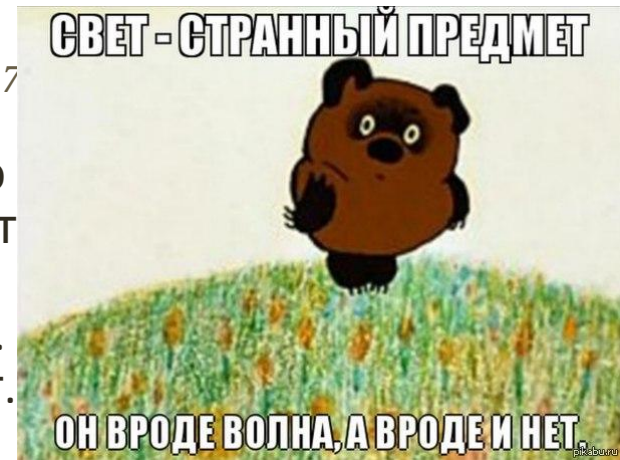


Франц Экснер, научный руководитель Шрёдингера

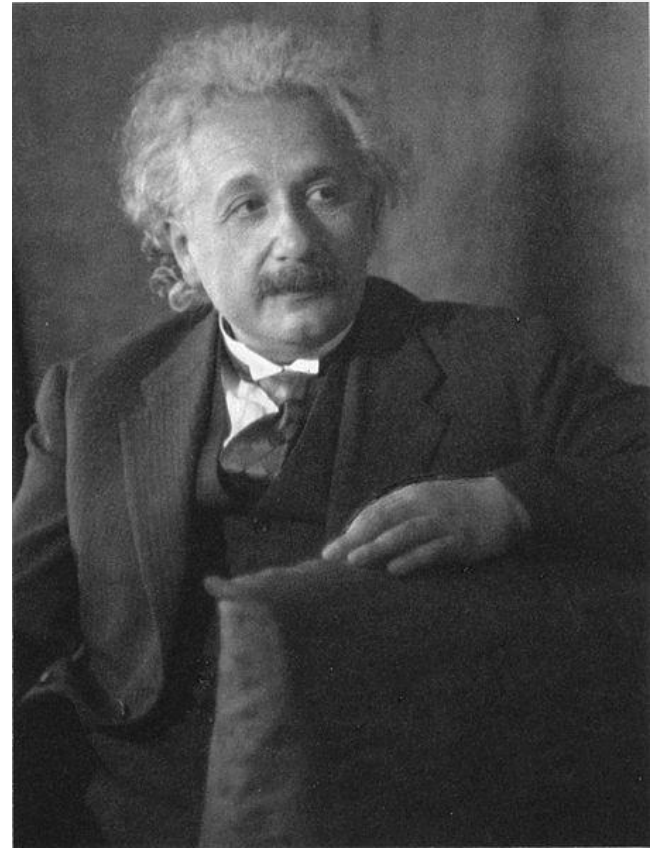
Я намеревался преподавать теоретическую физику, приняв в качестве образца превосходные лекции моего любимого учителя Фрица Хазенёрля, погибшего на войне. В остальном же предполагал заниматься философией. В то время я углубился в изучение трудов Спинозы, Шопенгауэра, Рихарда Земона и Рихарда Авенариуса... Ничего из этой затеи не получилось. Я был вынужден остаться при теоретической физике и, к моему удивлению, из этого иногда кое-что выходило.

— Э. Шрёдингер. *Мой взгляд на мир*. — М.: Либроком, 2009. — С. 7

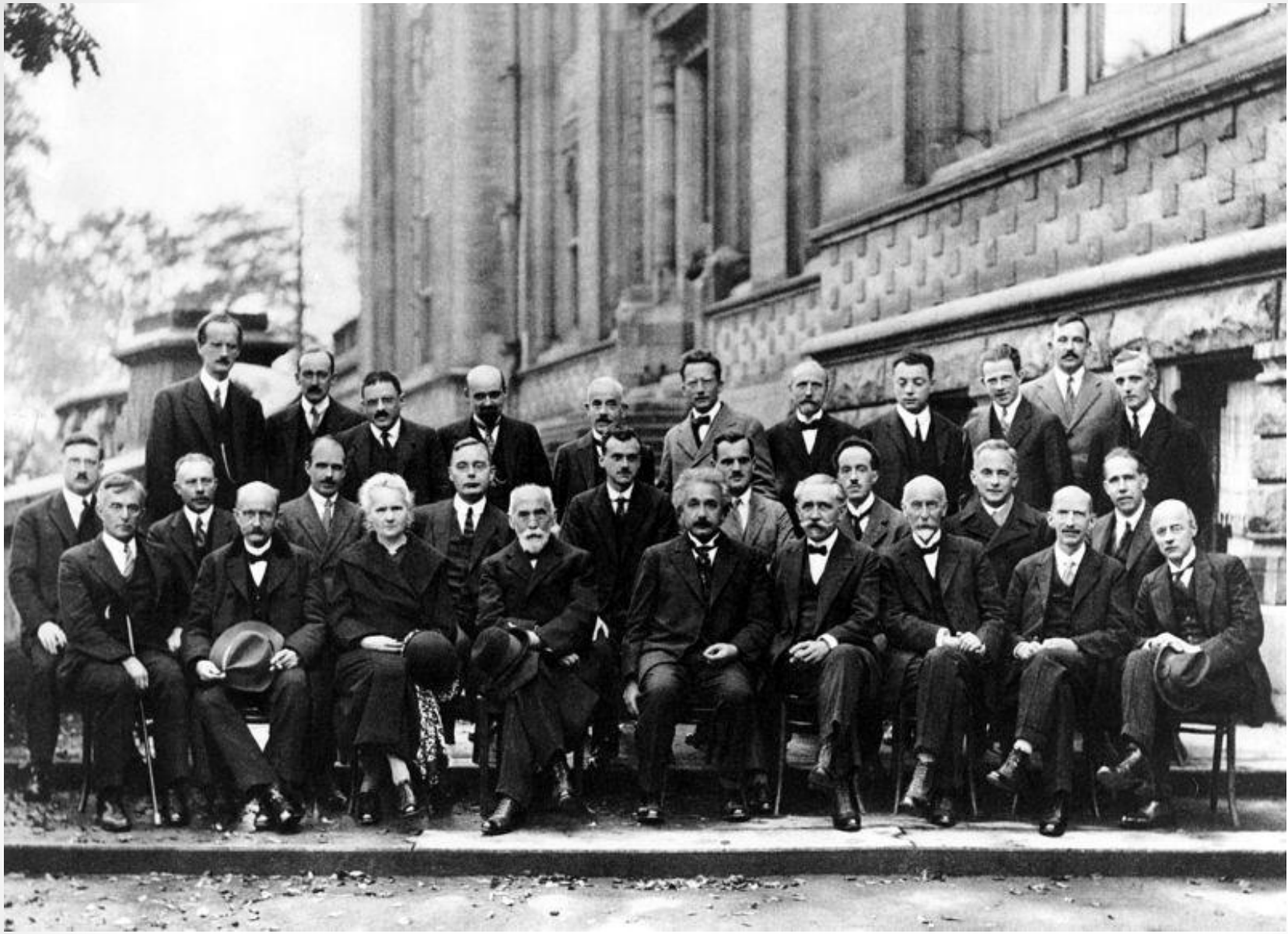
- Однако представить себе и принять, что нечто вроде электрона ведёт себя как волна, не так-то просто. В повседневной жизни мы сталкиваемся либо с частицей, либо с волной. Мяч — это частица, звук — это волна, и всё тут. В мире квантовой механики всё не так однозначно. На самом деле — и эксперименты это вскоре показали — в квантовом мире сущности отличаются от привычных нам объектов и обладают другими свойствами. Свет, который мы привыкли считать волной, иногда ведёт себя как частица (которая называется фотон), а частицы вроде электрона и протона могут вести себя как волны.



Эту проблему обычно называют двойственной или дуальной корпускулярно-волновой природой квантовых частиц, причем свойственна она, судя по всему, всем объектам субатомного мира. Мы должны понять, что в микромире наши обыденные интуитивные представления о том, какие формы может принимать материя и как она себя может вести, просто неприменимы. Сам факт, что мы используем волновое уравнение для описания движения того, что привыкли считать частицами, — яркое тому доказательство. Как уже отмечалось ранее, в этом нет особого противоречия. Ведь у нас нет никаких веских оснований полагать, будто то, что мы наблюдаем в макром мире, должно с точностью воспроизводиться на уровне микромира. И тем не менее дуальная природа элементарных частиц остается одним из самых непонятных и тревожащих аспектов квантовой механики для многих людей.



Альберт Эйнштейн был другом и постоянным корреспондентом Шрёдингера



- Участники Сольвеевского конгресса 1927 года, на котором обсуждались проблемы интерпретации квантовой механики. Шрёдингер стоит посередине в заднем ряду

Дискуссия между Бором и Шрёдингером началась уже на вокзале в Копенгагене и продолжалась ежедневно с раннего утра до поздней ночи. Шрёдингер остановился в доме Бора, так что уже по чисто внешним обстоятельствам в споре не могло быть никакого перерыва... Через несколько дней Шрёдингер заболел, вероятно, из-за крайнего перенапряжения; жар и простуда заставили его лечь в постель. Фрау Бор ухаживала за ним, приносила чай и сладости, но Нильс Бор сидел на краешке кровати и внушал Шрёдингеру: «Вы всё-таки должны понять, что...»... К подлинному взаимопониманию и нельзя было тогда прийти, поскольку ни одна из сторон не могла предложить полной и цельной интерпретации квантовой механики.

— В. Гейзенберг. Часть и целое. — М.: Наука, 1989. — С. 201—203.

Награды и членства

- Премия Хайтингера (1920)
- Медаль Маттеуччи (1927)
- Медаль Макса Планка (1937)
- Орден «За заслуги перед Федеративной Республикой Германия»
- Премия Эрвина Шрёдингера (1956)
- Австрийский почётный знак «За науку и искусство» (1957)
- Член Австрийской академии наук, Прусской академии наук (1929), Академии наук СССР (1934, член-корреспондент с 1928), Лондонского королевского общества (1949), Папской академии наук (1937), Ирландской королевской академии (1940), Испанской королевской академии наук



Бюст Шрёдингера, установленный во дворе аркады главного здания Венского университета (Скульптор: Фердинанд Вельц, 1984)



ПАМЯТЬ

Портрет Шрёдингера на австрийской тысячешиллинговой банкноте (Художник: Роберт Калина, 1983)

- Имя Шрёдингера носит один из кратеров на Луне, лунная долина (Vallis Schrödinger) и астероид (13092 Schrödinger).
- В физике его имя носит квантовый парадокс «Кот Шрёдингера».
- В 1983 году в Австрии были выпущены банкноты достоинством в 1000 шиллингов с портретом Шрёдингера. Они находились в обращении до перехода страны на евро.
- Имя Шрёдингера носят одна из венских площадей (Schrödingerplatz), здание центральной естественнонаучной библиотеки Берлинского университета (Erwin-Schrödinger-Zentrum), основанный в 1993 году венский Институт математической физики (Erwin-Schrödinger-Institut für Mathematische Physik).
- В 1956 году Австрийская академия наук учредила премию имени Эрвина Шрёдингера (Erwin Schrödinger-Preis), первым лауреатом которой стал он сам. Всемирная ассоциация теоретической и вычислительной химии (World Association of Theoretical and Computational Chemists) вручает медаль Шрёдингера «выдающемуся химику-вычислителю, который ранее не удостоивался этой награды»

Последние годы жизни он провёл в основном в тирольской деревне Альпбах. Шрёдингер скончался в результате обострения туберкулёза в одной из венских больниц 4 января 1961 года и был похоронен в Альпбахе.



Могила Шрёдингера в Альпбахе

Спасибо за
внимание!