

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: $\Psi(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}, t)$ (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 .

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

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

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 свойств и удовлетворяет ограничительным условиям:

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

СМЫСЛ И СВОЙСТВА ВОЛНОВОЙ ФУНКЦИИ.

2. Функция должна быть однозначной. Вероятность не может быть неоднозначной.

3. Функция должна быть непрерывной. 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 выводятся, а постулируются.

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:

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

$$\Delta \Psi + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U) \Psi = 0$$

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:

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

СТАЦИОНАРНОЕ УРАВНЕНИЕ ШРЕДИНГЕРА

Уравнение Шредингера для стационарных состояний содержит в качестве параметра полную энергию 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 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 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:

$$E_1, E_2, \dots, E_n, \dots, \\ \psi_1, \psi_2, \dots, \psi_3, \dots.$$

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.

Движение свободной частицы

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 $U(x) = \text{const}$ и ее можно принять равной нулю.

Тогда полная энергия совпадает с ее кинетической энергией.

Вид уравнения Шредингера:

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

Движение свободной частицы

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

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

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

Вывод: частица может иметь любые возможные значения энергии.

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



$$E = \hbar^2 k^2 / 2m$$

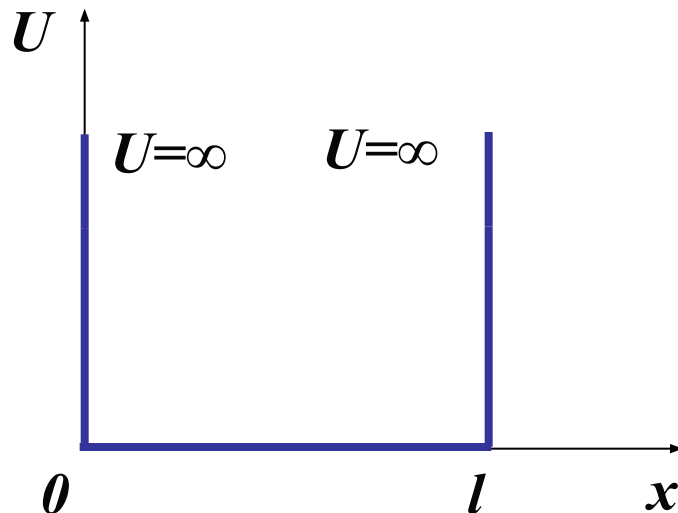
k - волновое число.

Вывод: свободная частица имеет непрерывный спектр энергии.

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 .

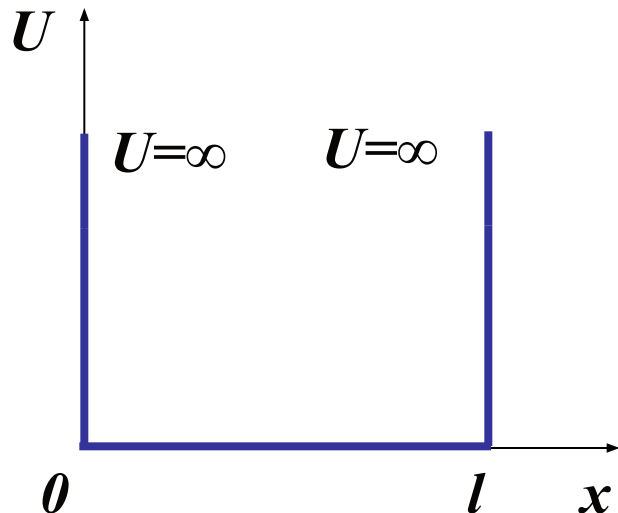
Пусть движение ограничено непроницаемыми для частицы отвесными стенками с координатами $x = 0$ и $x = l$.

Частица в одномерной бесконечно глубокой прямоугольной потенциальной яме.

Вид потенциальной энергии: $U = 0$ при $0 \leq x \leq l$;

$U = \infty$ при $x < 0$ и $x > l$.

Вид уравнения Шредингера:

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


За пределы потенциальной ямы частица попасть не может.

Поэтому вероятность обнаружения частицы вне ямы равна нулю.

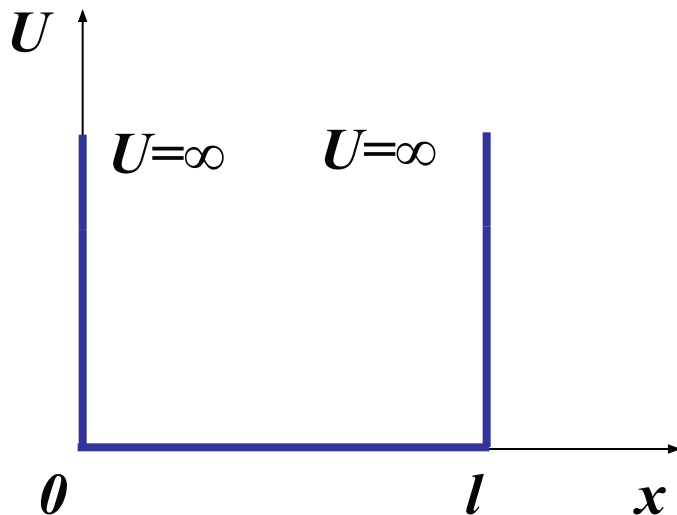
Следовательно, за пределами ямы $\psi = 0$

Частица в одномерной бесконечно глубокой прямоугольной потенциальной яме.

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

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:

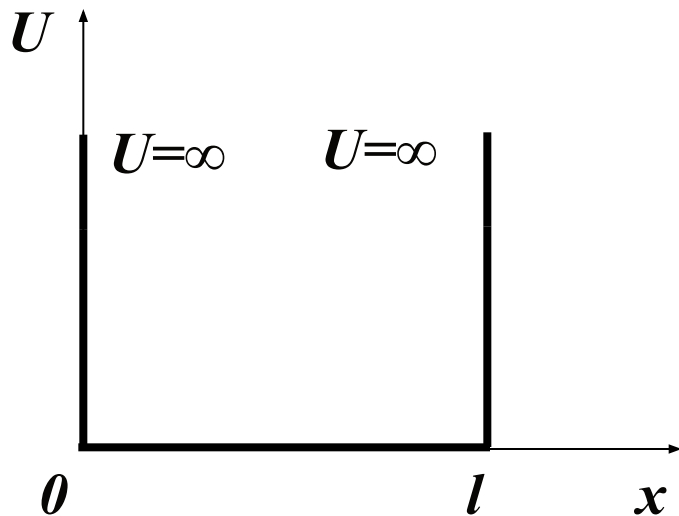
$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E \psi = 0,$$

поскольку в этой области $U = 0$.

Частица в одномерной бесконечно глубокой прямоугольной потенциальной яме.

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

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



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.

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

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

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

Из условия $\psi(0) = 0$ получим:

$$\psi(0) = a \sin \alpha = 0 \quad \Rightarrow \quad \alpha = 0$$

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

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

Это соотношение выполняется при условии:

$$\psi(x) = a \sin(kx + \alpha) \quad kl = \pm n\pi \quad (n = 1, 2, 3, \dots) \quad \Rightarrow \quad k = \pm \frac{n\pi}{l}$$

Исследуем полученные решения.

1. Энергия частицы в потенциальной яме.

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

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

Частица в одномерной бесконечно глубокой прямоугольной потенциальной яме.

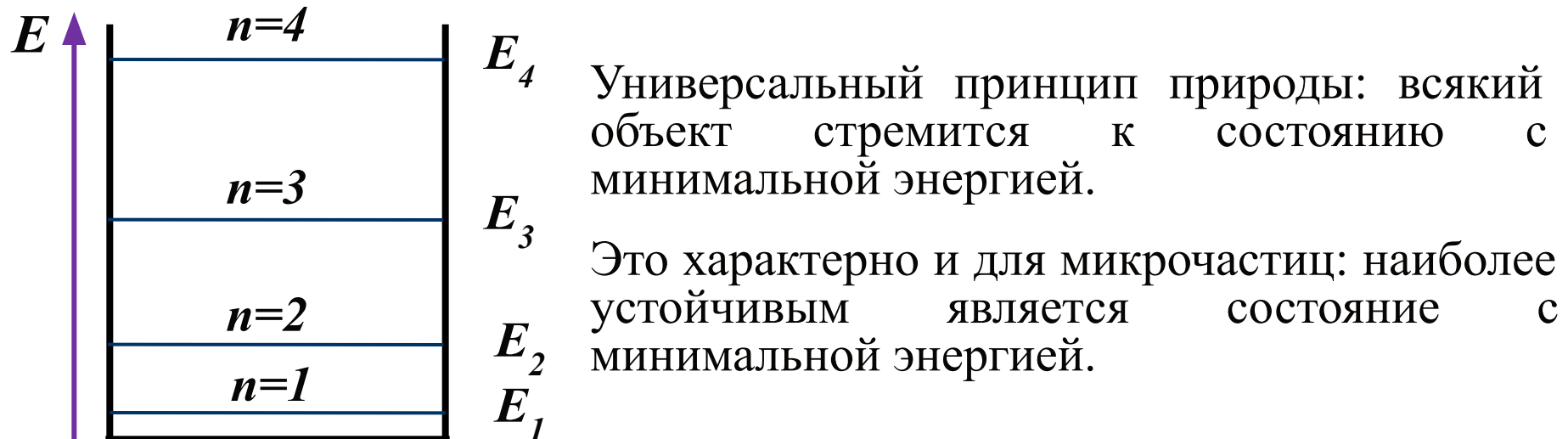
$$E = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ml^2} n^2, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

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 E_n - это *уровни энергии*, а число n , определяющее энергетические уровни частицы, - *главное квантовое число*.



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 $k = \pm \frac{n\pi}{l}$

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

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

$$a^2 \int_0^l \sin^2\left(\frac{n\pi x}{l}\right) dx = 1 \quad \text{(Задача одномерная, интеграл по объему заменен на интеграл по координате } x \text{).}$$

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

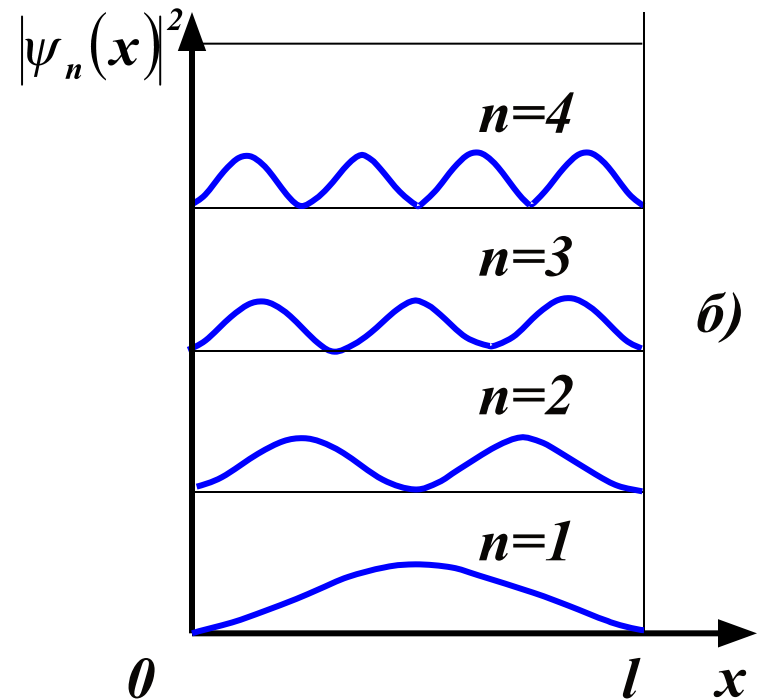
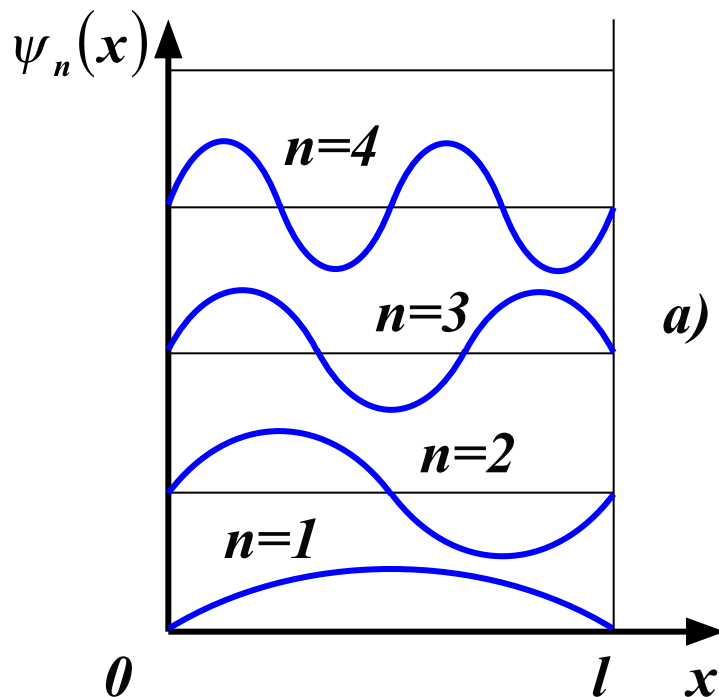
$$\text{Окончательно: } \psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{l}} \sin\left(\frac{n\pi}{l} x\right) \quad (n = 1, 2, 3, \dots)$$

Частица в одномерной бесконечно глубокой прямоугольной потенциальной яме.

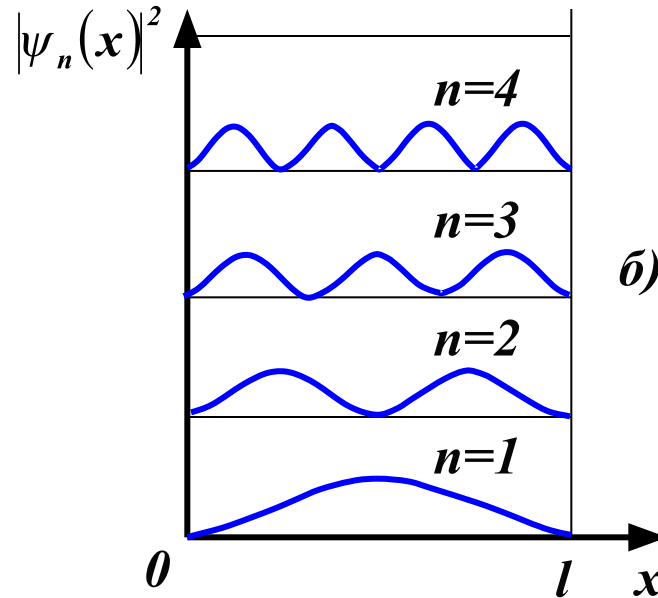
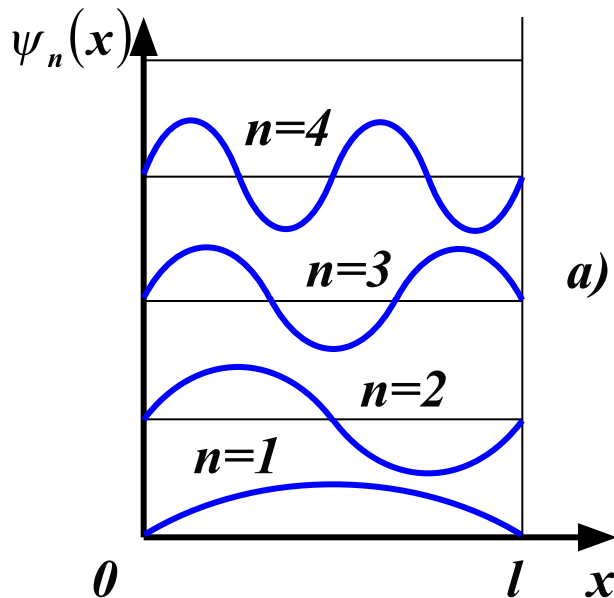
$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{l}} \sin\left(\frac{n\pi}{l}x\right) \quad (n = 1, 2, 3, \dots)$$

Графики собственных функций - рисунок а).

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



Частица в одномерной бесконечно глубокой прямоугольной потенциальной яме.



Пример: в состоянии с $n = 2$ 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.