Лекция 33

Волновая функция. Уравнение Шрёдингера

Учебники:

1.*Трофимова Т.И.* Курс физики : учеб. пособ. для вузов / Т. И. Трофимова. - М.: Академия, 2007.- с. 403-416.

Борисенко А.В.

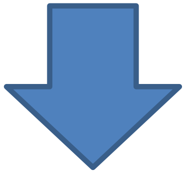
В чём принципиальное отличие классической физики от квантовой?

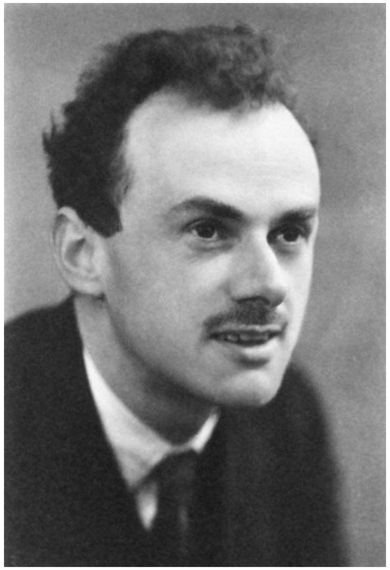
Классическая физика опирается на законы, позволяющие **точно предсказать** движение м.т.*
Она исходит из **детерминизма**, признающего
строгую закономерность
и причинную обусловленность
всех явлений природы.

Квантовая физика (физика микрочастиц)
представляет собой **возможность**
реализации **корпускулярных свойств и волновых**.
Поэтому **точно** предсказать
траекторию движения **невозможно**.

*материальная точка

Экспериментальные данные свидетельствуют о том, что **движение микрочастиц** всё же можно описать, но только языком **вероятности** (теории вероятности).





Дирак Поль (1902 - 1984)

Квантовая физика базируется **не** на **детерминистской* основе**, а на основе **стохастического (вероятностного)** описания природы.

*Детерминизм – учение о причинной обусловленности и закономерности всех явлений материального и духовного мира.

Вероятность нахождения частицы в той или иной области можно рассчитать, используя **плотность распределения вероятностей** (**вероятность, отнесённая к единице объёма**).

Как её рассчитать?

через функцию состояния Ψ (*r*, *t*) = Ψ (*x*, *y*, *z*, *t*) (**пси-функция** или **волновая функция**).

Пси-функция является **компле́ксной** и **не имеет явного физического смысла**!

$$\Psi^*(r,t)\cdot\Psi(r,t)=\left|\Psi(r,t)\right|^2=f(r,t), \quad (1)$$

где **Ψ*(*r*, *t*)** – функция, **компле́ксно** сопряжённая по отношению к **Ψ(*r*, *t*)**.

КОМПЛЁКСНЫЕ ЧИСЛА

Компле́ксное число – это двумерное число.

$$\boxed{z = a + ib}$$

- ***a*** и ***b*** – действительные числа,
- *i* – **мнимая единица**.

$$\boxed{i^2 = -1}$$

- Число ***a*** называется действительной частью ***Rez*** комплексного числа ***z***,
- Число ***b*** называется мнимой частью ***Imz*** комплексного числа ***z***.

a+*ib* – это **единое число**, а не сложение.

Свойства волновой функции:

1. Пси-функция должна быть **непрерывной**, **конечной** и **однозначной** во всём рассматриваемом пространстве.

2. Непрерывными должны быть все производные от пси-функции.

3. Пси-функция должна удовлетворять **условию нормировки**

$$\boxed{\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi|^2 dV = 1}$$

Вероятность найти частицу в момент времени t в конечном объёме равна

$$P = \int_V |\Psi|^2 \, dV$$

ПРИНЦИП СУПЕРПОЗИЦИИ

Если квантовая система может находиться в состояниях, описываемых волновыми функциями $\Psi_1(r, t)$, $\Psi_2(r, t)$, …, $\Psi_n(r, t)$, то физически допустима и суперпозиция этих состояний, описываемая волновой функцией

$$\Psi(r,t) = c_1\Psi_1(r,t) + c_2\Psi_2(r,t) + \ldots + c_n\Psi_n(r,t)$$

c_1, c_2, …, c_n – **компле́ксные коэффициенты**.

Суперпозиция состояний (4) определяется не только **модулями комплексных коэффициентов**, но и фазами и описывает **интерференцию состояний.**

Если $\mathbf{\Psi_1(\mathit{r}, \mathit{t})}$, $\mathbf{\Psi_2(\mathit{r}, \mathit{t})}$, **…**, $\mathbf{\Psi_n(\mathit{r}, \mathit{t})}$, характеризуют альтернативные (взаимно исключающие) состояния, то $|c_1|^2$, $|c_2|^2$, …, $|c_n|^2$ являются **вероятностями** этих состояний. Поскольку **сумма всех вероятностей** должна быть равна **единице, то**

$$|c_1|^2 + |c_2|^2 + \ldots + |c_n|^2 = 1. \quad (5)$$

Любое **среднее значение физической величины** $\boldsymbol{y}$, характеризующее **микрообъект**, может быть вычислено как

$$\langle y \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} y|\Psi|^2\, dV. \quad (6)$$

СМЫСЛ ПСИ-ФУНКЦИИ

1. С её помощью можно предсказать, с какой вероятностью частица может быть обнаружена в различных точках пространства.

2. Является **основным носителем информации** о **корпускулярных** и **волновых свойствах** частиц.

1926 год. Уравнение Шрёдингера

Играет в квантовой механике такую же важную роль, как уравнение второго закона Ньютона в классической механике или уравнения Максвелла для электромагнитных волн.

Шрёдингер Эрвин (1887 - 1961)

Уравнение Шрёдингера предназначено для

- частиц **без спина**,
- движущихся со скоростями **много меньшими скорости света**.

Уравнение Шрёдингера не выводится, а постулируется методом аналогии с классической оптикой, на основе обобщения экспериментальных данных.

Волновая функция микрочастицы **$\Psi(r, t)$** является решением следующего уравнения:

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

m – масса частицы;

Δ – оператор Лапласа;

i – мнимая единица,

***U* (*x*, *y*, *z*, *t*)** – потенциальная функция частицы в силовом поле, в котором она движется;

Ψ(x, y, z, t) – волновая функция.

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

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

- **оператор Лапласа** в декартовой системе координат.

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

Это **дифференциальное уравнение (ДУ)**
в частных производных.

Вид зависимости потенциальной энергии,
граничные и начальные условия
определяют вид **пси-функции**,
что является **достаточным условием**
для описания движения микрочастиц

Стационарные состояния – состояния с фиксированными значениями энергии.

В этом случае функция ***U*(*x*, *y*, *z*) не зависит явно от времени и имеет вид потенциальной энергии**.

Решение уравнения Шредингера (пси-функция) может быть представлено как

$$\Psi(x,y,z,t)=\psi(x,y,z)\cdot e^{-\frac{i}{h}Et}$$

E – **полная энергия частицы**, постоянная в случае стационарного поля.

Подставив (8) в (7), получим

$$-\frac{\hbar}{2m}e^{-\frac{i}{h}Et}\Delta\psi+U\psi e^{-\frac{i}{h}Et}=i\hbar\left(-\frac{i}{h}E\right)\psi e^{-\frac{i}{h}Et}\Rightarrow$$

$$\boxed{\Delta\psi+\frac{2m}{\hbar}\left(E-U\right)\psi=0}$$

Уравнение Шредингера для стационарных состояний.

- Если **движение частицы происходит в ограниченной области пространства**, то стационарное уравнение Шредингера имеет решения только при определённых дискретных значениях E_n (энергия имеет **дискретный спектр**).

Частица, локализованная в конечной области пространства, находится в связанном состоянии. Движение такой частицы называется **финитным** (ограниченным).

Каждому значению E_n соответствует своя **волновая функция $\psi_n(x,y,z)$**, и знание полного набора этих функций позволяет вычислить все наблюдаемые характеристики микрочастицы.

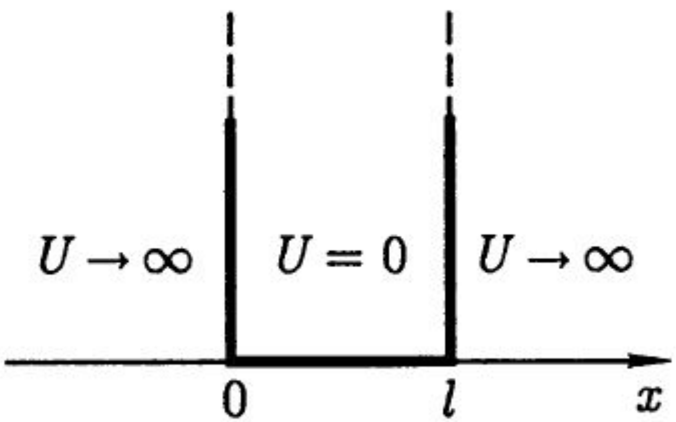
- В тех случаях, когда **движение квантовой частицы происходит в неограниченной области пространства**, E имеет непрерывный спектр (отсутствует n). Частица в этом случае находится в несвязанном состоянии. Движение частицы в этом случае называется **инфинитным** (неограниченным).

ЧАСТИЦА В ОДНОМЕРНОЙ БЕСКОНЕЧНО ГЛУБОКОЙ ПОТЕНЦИАЛЬНОЙ ЯМЕ

В этом случае **потенциальная энергия *U*** взаимодействия поля с частицей **минимальна**.

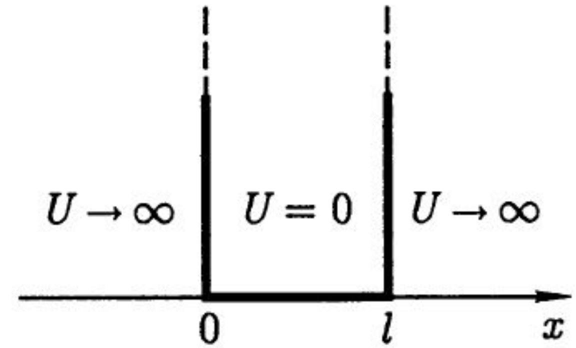
Частица массой ***m*** может передвигаться **только** вдоль какой-либо декартовой оси ***x***.

Потенциальная яма представляет собой интервал от 0 до l (ширина ямы) в пределах которого **$U(x)=0$**. В этой области пространства на частицу не действуют силы.



На границах «ямы» потенциальная энергия скачком возрастает до бесконечности.

$$U(x)=\begin{cases}\infty,\ x<0,\\ 0,\ 0\le x\le l,\\ \infty,\ x>l,\end{cases}$$



Запишем **уравнение Шредингера** в виде

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

Раз частица не проникает за пределы стенки, то **вероятность её обнаружения равна нулю** (**<u>на границах «ямы» тоже</u>**).

Граничные условия будут иметь вид

$$\begin{cases}\psi\left(x=0\right)=0;\\ \psi\left(x=l\right)=0.\end{cases}$$

Внутри «ямы» **уравнение Шредингера** будет таким:

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

Общее решение данного ДУ:

$$k^2=\frac{2mE}{\hbar^2}.$$

$$\psi\left(x\right)=A\sin kx+B\cos kx;$$

С учётом ГУ $\boldsymbol{\psi(0)=0}$, то $\boldsymbol{B(0)=0}$.

$$\psi\left(x\right)=A\sin kx.$$

$\psi(l) = A\sin kl = 0$ выполняется **только** при $kl = \pi n$,
n – целые числа.

$$k = \frac{n\pi}{l}. \qquad\qquad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}.$$

Следовательно

$$E_n = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ml^2}n^2 \qquad (n = 1, 2, 3, \ldots).$$

Энергия E_n частицы в потенциальной яме с бесконечно высокими стенками **принимает лишь определённые дискретные значения, т.е. квантуется**.

Введём следующие обозначения:

- E_n – уровни энергии;
- n – главное квантовое число. Определяет энергетические уровни частиц.

Подставив в $\psi(x) = A\sin(kx)$ значение $k = \dfrac{n\pi}{l}$, найдем

$$\psi_n(x) = A\sin\left(\frac{n\pi}{l}x\right)$$

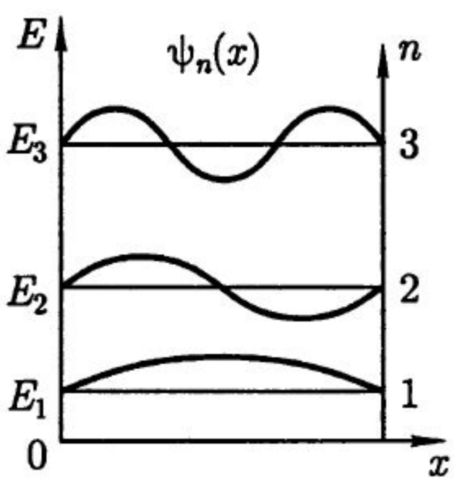
Постоянную интегрирования *A* найдём из **условия нормировки**

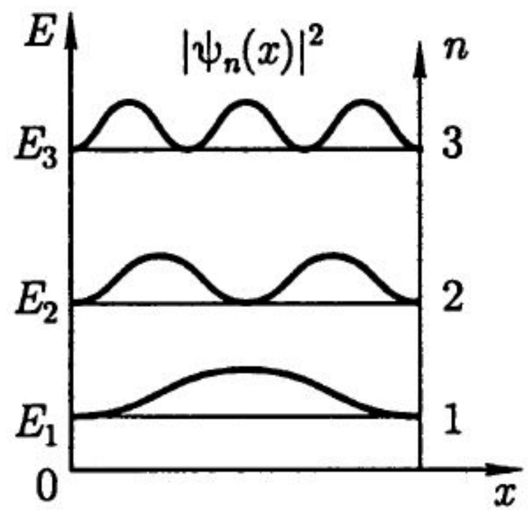
$$A^2\int_0^l \sin^2\left(\frac{n\pi}{l}x\right)dx = 1 \quad \Rightarrow \quad A = \sqrt{\frac{2}{l}}$$

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

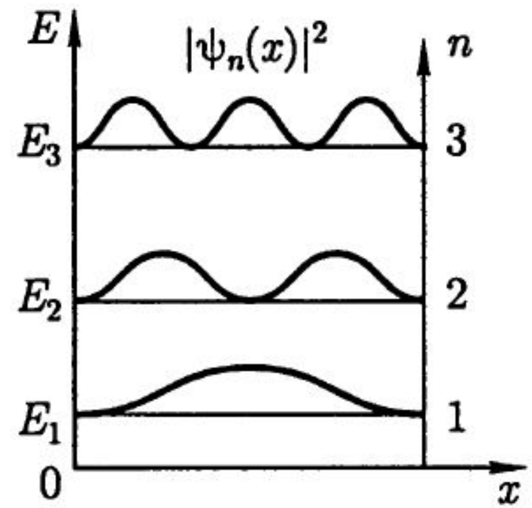
Графики функций ψ_n

Плотность вероятности обнаружения частицы на различных расстояниях от границ «ямы»





- Квантовое состояние с **n=0** означает, что **частица отсутствует**.



- Квантовое состояние с **n=1** означает, что **наиболее вероятное нахождение частицы вблизи центра потенциальной ямы** и менее вероятно вблизи краёв.

- В квантовом состоянии с **n=2** частица **не может находиться в середине ямы**, но одинаково часто может пребывать в её левой и правой частях.

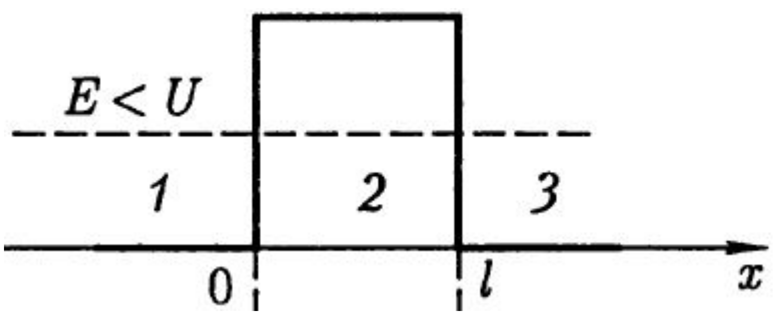
- При **n=3** наиболее **вероятно обнаружить частицу в центрах каждой третей части потенциальной ямы**, и близка к нулю вероятность обнаружения частицы вблизи границ этих частей.

ТУННЕЛЬНЫЙ ЭФФЕКТ. ПРОХОЖДЕНИЕ ЧАСТИЦЫ СКВОЗЬ ПОТЕНЦИАЛЬНЫЙ БАРЬЕР

Потенциальный барьер конечной ширины – область пространства, в пределах которого потенциальная энергия взаимодействия частицы с внешним полем наибольшая.

Для **ПБ** прямоугольной формы **высотой *U*** и **шириной *l*** можем записать

$$U(x) = \begin{cases} 0, & x < 0 \quad (\text{для области } 1), \\ U, & 0 \le x \le l, \quad (\text{для области } 2), \\ 0, & x > l, \quad (\text{для области } 3). \end{cases}$$



- **Макрочастица** беспрепятственно пройдёт над барьером (при ***E>U***), либо отразится от него (при ***E<U***).

- **Микрочастица**, даже при ***E>U***, имеет отличную от нуля вероятность того, что она отразится от барьера. При ***E<U*** имеется также отличная от нуля вероятность, что частица окажется в области $x>l$, т.е. **проникнет сквозь барьер**.

Вероятность прохождения частицы через **ПБ** (**коэффициент прозрачности *D* потенциального барьера**) определяется как

$$D = D_0 e^{-\frac{2}{\hbar}\sqrt{2m(U-E)}\,l}$$

D₀ – постоянный множитель, который можно приравнять единице;
U – высота потенциального барьера;
E – энергия частицы;
l – ширина барьера.

ИНТЕРПРЕТАЦИЯ ТУННЕЛЬНОГО ЭФФЕКТА

Туннельный эффект – явление чисто квантовое. Оно вытекает из принципа неопределённости Гейзенберга.

- Неопределённость координаты x обуславливает неопределённость потенциальной энергии.
- Неопределённость проекции импульса p_x приводит к неопределённости кинетической энергии.
- Следовательно, в области потенциального барьера частица не имеет точных значений ни потенциальной, ни кинетической энергий.
- Следовательно, существует вероятность того, что значение кинетической энергии частицы превысит ПБ и она сможет его преодолеть.

Переходим от одной частицы к ансамблю частиц

Тождественные частицы – совокупность квантовых частиц, обладающих одинаковыми физическими свойствами.

Принцип тождественности.

Состояния системы частиц, отличающиеся перестановкой тождественных частиц местами, нельзя различить ни в каком эксперименте, и такие состояния должны рассматриваться как одно физическое состояние.

Спин частицы – наличие **собственного момента импульса частицы.**

Спин следует рассматривать как **фундаментальное свойство микрочастиц** подобно **массе** и **электрическому заряду**.

Частицы

Фермионы

(электрон, протон, нейтрон)

Бозоны

(фотон, Бозон Хиггса, глюон)

Спиновое квантовое число

полуцелое

целое

Сложная частица (например, атомное ядро), составленная из **чётного числа фермионов** является **бозоном**, а составленная из нечётного числа фермионов – **фермионом**.

Принцип Паули. Во взаимодействующей системе **фермионов** (тождественных частиц) не может быть двух и более частиц, находящихся в одном и том же состоянии.

Одинаковое состояние характеризуется **одинаковым набором квантовых чисел** –

$\boldsymbol{n}$ **(главное)**,

$\boldsymbol{l}$ **(орбитальное)**,

$\boldsymbol{m_l}$ **(магнитное)**,

$\boldsymbol{m_s}$ **(магнитное спиновое)**.

Благодаря принципу Паули,
даже при температуре ***T*=0 К**
энергия фермионов отличной от нуля,
так как их **квантовые состояния** должны быть **разными!**

При абсолютном нуле температур,
атомы (и **электроны** в них)
участвуют в движениях (не тепловых!),
подчиняющимся **законам квантовой механики**!

Фермионы – **«индивидуалисты»**,
Бозоны – «коллективисты»!