

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.

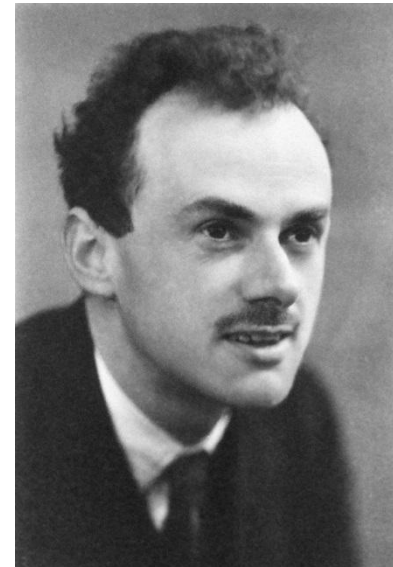
Квантовая физика (физика микрочастиц) представляет собой **возможность** реализации **корпускулярных свойств и волновых**.
Поэтому **точно предсказать траекторию движения невозможно**.

*материальная точка

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



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



Дирак
Поль
(1902 - 1984)

***Детерминизм** – учение о причинной обусловленности и закономерности всех явлений материального и духовного мира. 3

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** $\Psi(r, t) = \Psi(x, y, z, t)$
(**пси-функция** или **волновая функция**).

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

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

где $\Psi^*(r, t)$ – функция,
комплексно сопряжённая по отношению к $\Psi(r, t)$.

КОМПЛЕКСНЫЕ ЧИСЛА

Комплексное число – это двумерное число.

$$z = a + ib$$

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

$$i^2 = -1$$

- Число a называется действительной частью **Re z** комплексного числа z ,
- Число b называется мнимой частью **Im z** 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**

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

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

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

c_1, c_2, \dots, c_n — **комплексные коэффициенты.**

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

Если $\Psi_1(r, t)$, $\Psi_2(r, t)$, ..., $\Psi_n(r, t)$, 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

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

Любое **среднее значение физической величины 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:

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

m – масса частицы;

Δ – оператор Лапласа;

i – мнимая единица,

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

$\Psi(x, y, z, t)$ – 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.

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

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

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

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



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.

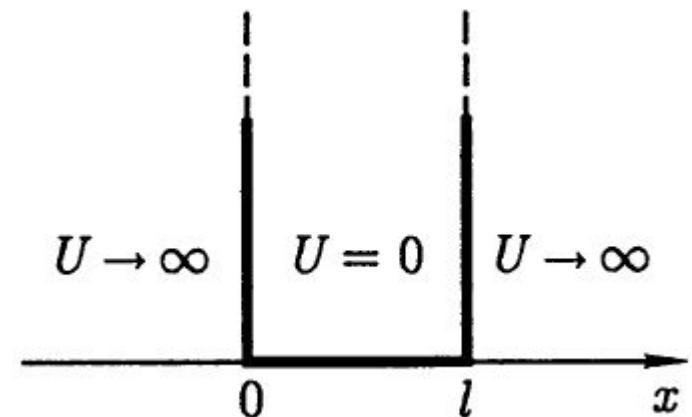
- В тех случаях, когда движение квантовой частицы происходит в неограниченной области пространства, E имеет непрерывный спектр (отсутствует n). Частица в этом случае находится в несвязанном состоянии. Движение частицы в этом случае называется **инфинитным** (неограниченным).

ЧАСТИЦА В ОДНОМЕРНОЙ БЕСКОНЕЧНО ГЛУБОКОЙ ПОТЕНЦИАЛЬНОЙ ЯМЕ

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

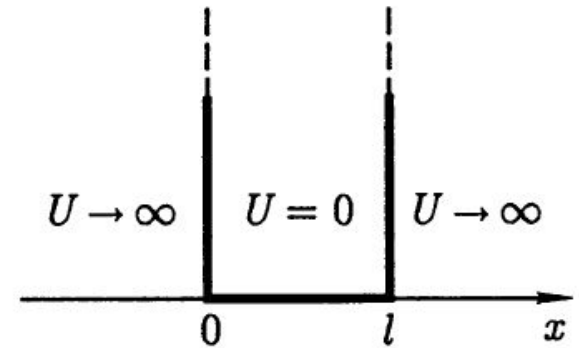
Частица массой **m** может передвигаться **ТОЛЬКО** вдоль какой-либо декартовой оси **x** .

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.

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



Запишем **уравнение Шредингера** в виде

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

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

Граничные условия будут иметь вид

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

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

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

Общее решение данного ДУ:

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

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

С учётом ГУ $\psi(0)=0$, то $B(0)=0$.

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

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

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

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

Следовательно

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

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 $k = \frac{n\pi}{l}$, найдем

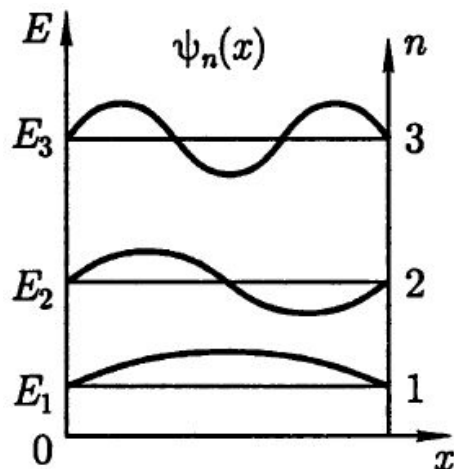
$$\psi_n(x) = A \sin\left(\frac{n\pi}{l}x\right)$$

Постоянную интегрирования A найдём из условия нормировки

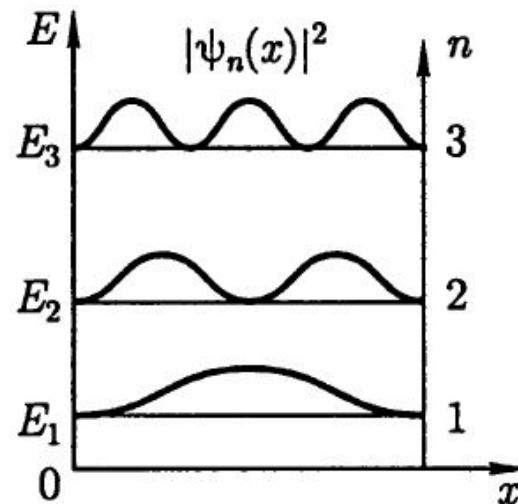
$$A^2 \int_0^l \sin^2\left(\frac{n\pi}{l}x\right) dx = 1 \quad \Rightarrow \quad A = \sqrt{\frac{2}{l}}$$

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

Графики функций ψ_n

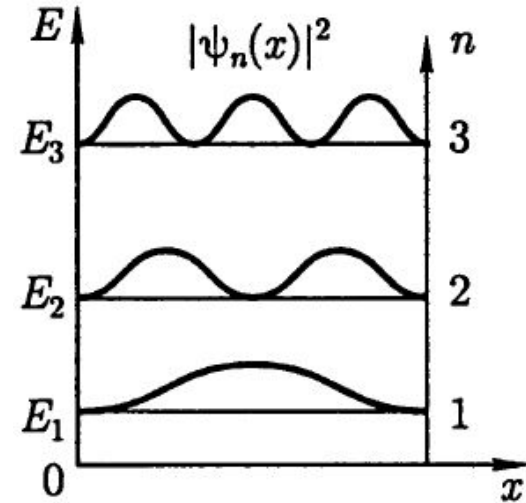


Плотность вероятности
обнаружения частицы
на различных расстояниях
от границ «ямы»



- 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.



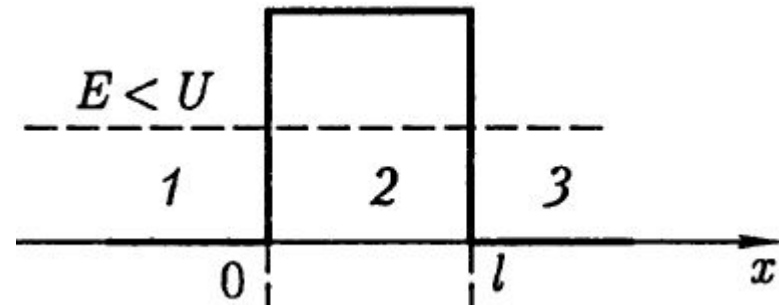
- В квантовом состоянии с $n=2$ частица **не может находиться в середине ямы**, но одинаково часто может пребывать в её левой и правой частях.
- При $n=3$ наиболее **вероятно обнаружить частицу в центрах каждой третьей части потенциальной ямы**, и близка к нулю вероятность обнаружения частицы вблизи 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

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



- **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

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

D_0 – 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

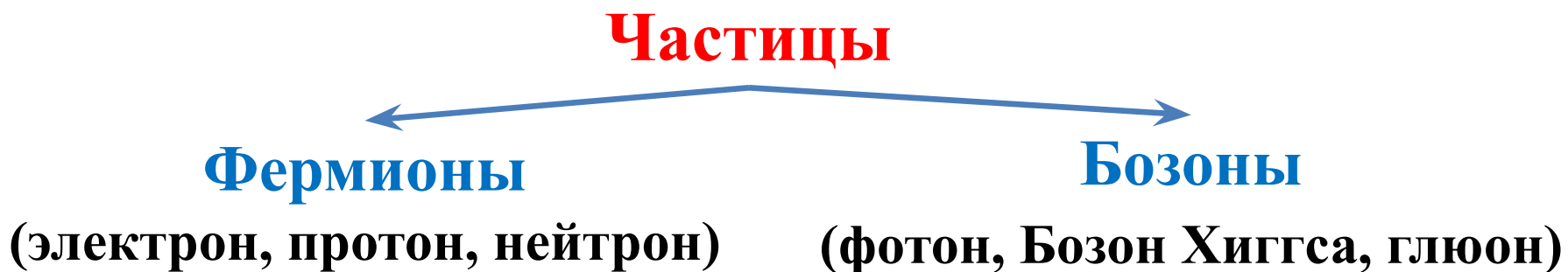
Тождественные частицы — совокупность квантовых частиц, обладающих одинаковыми физическими свойствами.

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**.



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** –

n (главное),

l (орбитальное),

m_l (магнитное),

m_s (магнитное спиновое).

Благодаря принципу Паули,
даже при температуре $T=0$ К
энергия фермионов отлична 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»!