Конспект лекций по курсу общей физики. **Часть III**

"Оптика. Квантовые представления о свете.

Атомная физика и физика ядра"

Лекция № 10

7. ЭЛЕМЕНТЫ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ (продолжение)

7.5. Волновое уравнение Шредингера (1926г)

Обратимся теперь к рассмотрению теории, сыгравшей крайне важную роль в развитии квантовой физики. Основой этой теории является уравнение Шредингера, сформированное автором в 1926г. к этому времени возникла важнейшая проблема в отыскании такого уравнения, которое явилось бы тем же, чем являются уравнения движения Ньютона для классической механики. Какие проблемы должно решить подобное уравнение? Каким оно должно быть?

1. ***Уравнение должно быть волновым уравнением, чтобы объяснить наблюдаемые на опыте волновые свойства частиц, например, объяснить эксперименты по дифракции микрочастиц.***
2. ***Из него следует: дискретность энергии, наличие стационарных состояний квантовой системы.***
3. ***Проверкой справедливости этого уравнения было бы согласие его предсказаний с результатами опыта.***
4. ***Дать представление как работает волновая теория, т.е. как с ее помощью выполняются расчеты реальных явлений.***

Теория уравнения Шредингера основана на нескольких допущениях, вот главные из них:

1. Частицы не рождаются и не исчезают: в любом физическом процессе число частиц данного типа остается постоянным.
2. Скорость частиц мала; лишь в этом случае возможно нерелятивистское приближение.

Известно, что распространение волн (волновой процесс) описывается уравнением вида

$$\frac{\partial^2 S}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 S}{\partial y^2}+\frac{\partial^2 S}{\partial z^2}=\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2 S}{\partial t^2}, \qquad (14)$$

где S – некоторая физическая величина (напряженность электрического, магнитного полей, давление и т.д.), распространяющаяся в пространстве со скоростью c – фазовой скоростью волны.

Решением волнового уравнения является волновая функция

$$S(r,t)=S_0^{'}(r)\,e^{2\pi i(\nu t-\kappa r)}=S_0(r)\,e^{i\omega t},$$

где $S_0(r)=S_0^{'}(r)\cdot e^{-2\pi i\kappa r}$ комплексная амплитуда, $i=\sqrt{-1}$ - мнимая единица.

Если подставить волновую функцию в волновое уравнение, получим уравнение для амплитуды

$$\frac{\partial^2 S_0}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 S_0}{\partial y^2}+\frac{\partial^2 S_0}{\partial z^2}+\frac{4\pi\nu^2}{c^2}S_0=0.$$

Или, используя соотношение $\lambda = cT = c\frac{1}{\nu}$, запишем

$$\nabla^2 S_0 + \frac{4\pi^2}{\lambda^2} S_0 = 0$$

$$(\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$ - оператор Лапласа).

Шредингер предположил, что поведение микрочастиц, с учетом их волновой природы, должно описываться аналогичным уравнением.

Для волн де Бройля справедливы соотношения

$$E = h\nu \text{ и } p = \frac{h}{\lambda}.$$

При скорости движения частицы $\upsilon << c$ полная энергия Е частицы равна сумме кинетической энергии T и потенциальной U:

$$E = T + U = \frac{m\upsilon^2}{2} + U.$$

Скорость частицы

$$\upsilon = \sqrt{\frac{2(E-U)}{m}}.$$

Длина волны де Бройля

$$\lambda = \frac{h}{m\upsilon},$$

$$\lambda^2 = \frac{h^2}{2m(E-U)}.$$

Подставляя значение λ^2 в волновое уравнение, получим

$$\nabla^2 \psi_0(r) + \frac{8\pi^2 m}{h^2}(E-U)\,\psi_0(r) = 0 \qquad (15)$$

Это выражение носит название стационарного уравнения Шредингера, т.е. не зависящего от времени.

Уравнение Шредингера не имеет строгого вывода, оно постулируется, как и уравнения движения Ньютона. Справедливость уравнения Шредингера доказывается тем, что предсказания квантовой механики относительно результатов опытов в атомной и ядерной физике выполняются.

Мы уже говорили о физическом смысле ψ функции. Для того, чтобы решение уравнения Шредингера описывало реальное поведение частиц, необходимо, исходя из физического смысла волновых функций, наложить на них следующие аналитические ограничения.

1. Волновые функции должны быть ***однозначными*** функциями координат и времени. В противном случае получим бессмыслицу: для одной и той же точки пространства будет две или больше вероятностей нахождения частицы.

2. Волновые функции должны быть ***непрерывными***. Волновая функция – это аналог траектории в классической физике. Состояние квантовой системы во времени и пространстве должно изменяться непрерывно.

3. Волновые функции должны быть всюду ***конечными*** и удовлетворять ***граничным условиям***. Это следует из требования конечности вероятности нахождения частицы в данной точке пространства.

Уравнение Шредингера имеет ряд особенностей. В соответствии с теорией дифференциальных уравнений, в зависимости от вида функции *U* будет иметь решение, удовлетворяющее указанным аналитическим ограничениям, либо при любых значениях *E*, либо при некоторых дискретных значениях *E*, либо в одной области при любых значениях *E*, а в других – при дискретных.

Те дискретные значения параметра *E*, при которых уравнение имеет решение, называются ***собственными значениями***. Возможные значения энергии *E* образуют ***энергетический спектр***.

Функция $\psi(r)$, являющаяся решением уравнения при данном значении параметра *E*, называется ***собственной функцией***.

Из указанных особенностей уравнения Шредингера вытекают следующие следствия:

а. если частица движется в свободном пространстве, ее энергетический спектр непрерывный;

б. если же положение частицы в пространстве ограничено, например, электрон движется в атоме, то спектр дискретен, т.е. движение электрона квантуется.

Ознакомимся с методами квантовой механики.

7.6. Электрон в потенциальном «ящике»

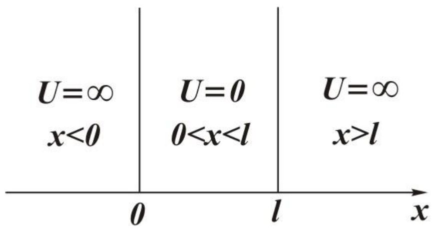

Рис.14

Применим уравнение Шредингера к решению искусственной задачи, но отражающей свойства реальной системы.

На рисунке 14 построена зависимость потенциальной энергии электрона *U* от его положения на оси *x*. Это грубое приближение к задаче об электроне в атоме. Существенным здесь является ограничение движения малой областью значений *x* от *o* до *l*. Здесь потенциальная энергия частицы постоянна и равна нулю. На границах области (*o,l*) потенциальная энергия скачком возрастает до бесконечности. Частица (электрон) не выходит за пределы области (*o,l*), находится как бы в ящике с идеально отражающими стенками. Вероятность нахождения электрона в областях $x<0$ и $x>l$ равна нулю, так что $\psi=0$ в этих областях. Поэтому ***граничные условия*** для нашего решения уравнения Шредингера таковы:

$$\psi(0)=\psi(l)=0. \qquad (16)$$

Внутри ящика частица движется свободно, но выйти за пределы его не может.

Запишем уравнение Шредингера для одномерного случая, учтем, что *U*=0 внутри ящика

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+\frac{8\pi^2 m}{h^2}E\cdot\psi=0. \tag{17}$$

Решением этого уравнения будет волновая функция

$$\psi_n = A\sin\frac{\pi n x}{l}, \tag{18}$$

где n=1,2,3,… и т.д., A – нормирующий множитель.

Это и есть собственные функции нашего уравнения. Последнее будет справедливо, если значение энергии E будут не произвольные, а вполне определенные. Эти значения нетрудно найти, если решение подставить в уравнение (17)

$$\psi_n'' = -A\frac{\pi^2 n^2}{l^2}\sin\frac{\pi n x}{l}$$

и

$$-A\frac{\pi^2 n^2}{l^2}\sin\frac{\pi n x}{l}+\frac{8\pi^2 m}{h^2}E_n\cdot A\sin\frac{\pi n x}{l}=0.$$

Откуда

$$E_n=\frac{h^2}{8ml^2}n^2 \tag{19}$$

Веденное выше число h называется ***квантовым числом***. Значения E_n называются ***уровнями энергии***.

Итак, уравнение Шредингера при указанных граничных условиях будет удовлетворено только при дискретном ряде значений энергии частицы, т.е. энергия частицы квантуется.

Если электрон поместить в ящик длиной l=1*см*

$$E_n=\frac{\left(6{,}63\cdot10^{-34}\right)^2}{8\cdot9{,}1\cdot10^{-31}\cdot10^{-4}}\cdot n^2=3{,}4\cdot10^{-15}\cdot n^2 эВ$$

Разность энергий между соседними уровнями ($\Delta n=1$)

$$\Delta E_n=\frac{h^2}{8ml^2}(n^2+2n+1-n^2)\approx 2n\frac{h^2}{8ml^2}=6{,}8n10^{-15}эВ$$

Настолько мала, что их отличить нельзя, практически это сплошной энергетический спектр. Таким образом ***микрочастица в макроящике может обладать произвольными значениями энергии.***

Здесь квантовая механика не расходиться с классической, которая не требует дискретности уровней энергии.

Если электрон находится в ящике «атомных размеров», т.е. l~ 10^{-10} *м*, то

$$E_n=34n^2 эВ \text{ и } \Delta \mathrm{E_n}=68n\ эВ.$$

Эксперимент легко фиксирует эту достаточно большую величину. В этом случае будет наблюдаться ***дискретный спектр энергии частиц.***

Воспользуемся условием нормировки, которое в данном случае запишется следующим образом:

$$A^2\int_o^l \sin^2\frac{\pi\ n\ x}{l}d\ \ x=1 \qquad (20)$$

На концах промежутка интегрирования подынтегральная функция обращается в нуль. Поэтому значение интеграла можно получить, умножив среднее значение $\sin^2\frac{\pi n x}{l}$ (равное, как известно,1/2) на длину промежутка *l*.

Имеем $\frac{1}{2}A^2 l=1$ и $A=\sqrt{\frac{2}{l}}$,

т.е. нормирующий множитель у всех функций одинаков.

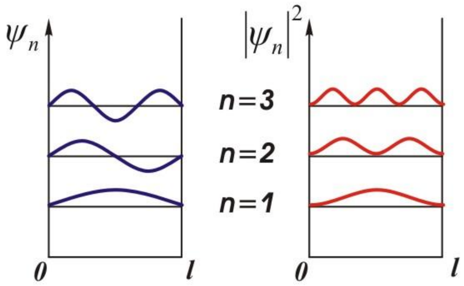

Рис.15

Нормированные собственные функции равны

$$\psi_n=\sqrt{\frac{2}{l}}\sin\frac{\pi n x}{l} \quad (n=1,2,3,\ldots)(21)$$

График собственных функций ψ для различных *n* и график квадрата модуля собственных функций приведены на рисунке 15.

По физическому смыслу квадрат модуля собственной функции – это плотность вероятности найти частицу в том или ином месте ящика при различных значениях ее энергии. Как видно из рисунка, в низшем (основном) энергетическом состоянии (квантовое число n=1) с наибольшей вероятностью можно встретить частицу в середине ящика, вероятность найти ее у стенок равна нулю. В состоянии с n=2 частица не будет обнаружена в середине ящика, но одинаково часто бывает как в левой, так и в правой половине ящика. Такое положение частицы несовместимо с представлением о ***траекториях***.

Очевидно, чем больше энергия частицы, тем ближе друг к другу располагаются максимумы кривой $|\psi_n|^2$. При $n\to\infty$ кривая будет близка к прямой, параллельной оси *x*. Такие частицы будут вести себя подобно макрочастицам.

Следует отметить: согласно соотношению

$$E_n=\frac{h^2}{8ml^2}n^2$$

Кинетическая энергия в основном (низшем) энергетическом состоянии **не равна нулю**. Это общий результат квантовой механики, справедливый для всех ее задач и полностью чуждый классической механике.