Лекция 10. Уравнение Шредингера.

Понятие о волновой функции

Можно ли волны де Бройля истолковывать как волны вероятности?

Вероятность обнаружить частицу в некоторых точках пространства не может быть отрицательна!

М. Борн в 1926 г. предположил, что по волновому закону меняется не сама вероятность, а величина, названная амплитудой вероятности и обозначаемая $\Psi(x, y, z, t)$. Эту величину называют также **волновой функцией (или Ψ-функцией).**

Понятие о волновой функции

Амплитуда вероятности может быть комплексной, и вероятность W пропорциональна квадрату ее модуля:

$$W \sim |\psi(x, y, z, t)|^2$$

где $|\psi|^2 = \psi\psi'$, где $\psi' -$ функция комплексно-сопряженная с ψ.

Квадрат модуля волновой функции (квадрат модуля амплитуды волны де Бройля) определяет вероятность нахождения частицы в момент времени в области с координатами x *и* dx, y *и* dy, z *и* dz.

Комплексно сопряженными числами называются два числа, которые отличаются только знаком мнимой части

Понятие о волновой функции

В квантовой механике состояние частицы описывается принципиально по-новому – с помощью волновой функции, которая является основным носителем информации об их корпускулярных и волновых свойствах.

Вероятность нахождения частицы в объеме V равна:

$$dW = |\psi|^2 dV.$$

Величина $|\Psi|^2 = dW/dV$

(квадрат модуля Ψ-функции) имеет смысл **плотности вероятности**, т.е. определяет вероятность нахождения частицы в единице объема в окрестности точки, имеющей координаты x, y, z

Физический смысл имеет не сама Ψ - функция, а квадрат ее модуля $|\Psi|^2$, которым определяется интенсивность волн де Бройля.

Понятие о волновой функции

Вероятность найти частицу в момент времени t в конечном объеме V, согласно теореме о сложении вероятностей, равна:

$$W = \int_V dW = \int_V |\psi|^2 dV.$$

Если за объем V принять бесконечный объем всего пространства:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi|^2 dV = 1$$ **- условие нормировки вероятностей.**

Условие нормировки говорит об объективном существовании частицы во времени и пространстве.

Понятие о волновой функции

Функция Ψ, характеризующая вероятность обнаружения микрочастицы в элементе объема, должна быть:

- конечной (вероятность не может быть больше единицы);
- однозначной (вероятность не может быть неоднозначной величиной);
- непрерывной (вероятность не может меняться скачком).

Волновая функция удовлетворяет принципу суперпозиции: если система может находиться в различных состояниях, описываемых волновыми функциями Ψ1 , Ψ2 , … Ψn , то она может находиться в состоянии, описываемом линейной комбинацией этих функций:

$$\psi = \sum_n C_n \psi_n ,$$

$Где\ C_n \left(n = 1,\ 2,\ 3...\right) -$ произвольные, комплексные числа.

Понятие о волновой функции

Волновая функция Ψ является основной характеристикой состояния микрообъектов. Например, среднее расстояние < r > электрона от ядра вычисляется по формуле

$$\langle r \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} r|\psi|^2 dV.$$

Уравнение Шредингера

Основное уравнение нерелятивистской квантовой механики сформулировано в 1926 г. Шредингером. Уравнение Шредингера в общем виде

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

где m – масса частицы, i – мнимая единица, ∇ – оператор Лапласа

$\nabla^2\psi = \left(\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}\right)$, $U(x,y,z,t)$ – потенциальная энергия частицы в силовом

поле, в котором она движется, Ψ – искомая волновая функция.

Уравнение Шредингера

Если силовое поле, в котором движется частица, потенциально. В этом случае решение уравнения Шредингера распадается на два сомножителя, один из которых зависит только от координаты, а другой – только от времени:

$$\psi(x, y, z, t) = \psi(x, y, z, t)^{-i\frac{E}{\hbar}t},$$

где E – полная энергия частицы, которая в случае стационарного поля остается постоянной.

Уравнение Шредингера

$$\psi(x,y,z,t)=\psi(x,y,z,t)^{-i\frac{E}{\hbar}t}$$

Уравнение Шредингера в общем виде.

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

получим:

$$-\frac{\hbar}{2m}\nabla^2\psi+U\ \psi=i\hbar\frac{\partial^2\psi}{\partial t^2},$$

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

уравнение Шредингера для стационарных состояний:

Оператор - значок для обозначения операции, преобразования одной функции в другую.

Уравнение Шредингера

Уравнение Шредингера можно записать в виде $\boxed{\hat{H}\psi = E\psi.}$

$\hat{H}$ – **оператор Гамильтона**, равный сумме операторов $-\dfrac{\hbar}{2m}\nabla^2 + U = \hat{H}.$

Гамильтониан является оператором энергии Е.

В квантовой механике другим переменным также и динамическим сопоставляются операторы. Соответственно рассматривают операторы координат, импульса, момента импульса и т.д.

Движение свободной частицы

Свободная частица – частица, движущаяся в отсутствие внешних полей. Т.к. на свободную частицу (пусть она движется вдоль оси x) силы не действуют, то потенциальная энергия частицы $U(x) = const$ и ее можно принять равной нулю.

В таком случае уравнение Шредингера для стационарных состояний примет вид:

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

частным решением этого уравнения является функция:

$$\Psi(x) = Ae^{ikx}, \quad где \quad A = const, \quad и \;\; k = const,$$

с собственным значением энергии: $$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}.$$

Движение свободной частицы

Функция $\Psi(x) = Ae^{ikx} = Ae^{\frac{i}{\hbar}\sqrt{2mEx}}$ представляет собой только координатную часть волновой функции Ψ(x,t). Зависящую от времени волновую функцию можно представить в виде:

$$\Psi(x,t) = Ae^{-i\omega t + ikx} = Ae^{-\frac{i}{\hbar}(Et - p_x x)}$$

где $\omega = \frac{E}{\hbar}, k = \frac{p_x}{\hbar}$ эта функция представляет собой плоскую монохроматическую волну де Бройля.

Следовательно зависимость энергии от импульса $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{p_x^2}{2m}$

Энергетический спектр является непрерывным.

Таким образом, свободная частица описывается плоской монохроматической волной де Бройля.

Движение свободной частицы

Таким образом, свободная частица описывается плоской монохроматической волной де Бройля. Этому способствует не зависящая от времени **плотность вероятности** обнаружения частицы в данной точке пространства:

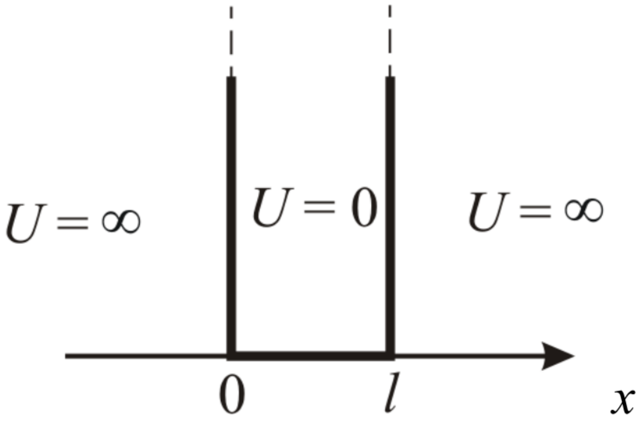
$$|\Psi|^2 = \Psi\Psi' = |A|^2$$

т.е. все положения свободной частицы являются равновероятностными.

Частица в одномерной прямоугольной яме.

Частица в одномерной прямоугольной яме.

Вывод на практическом занятии!



В пределах ямы (0 ≤ x ≤ l) уравнение Шредингера

$$\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}+\frac{2m}{\hbar^2}=0, \quad \text{или} \quad \frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}+k^2\Psi=0,$$

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

Ссобственные значения энергии $$E_n=\frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ml^2}, \quad \text{где } n=1,2,3...$$

волновой функции $$\Psi_n(x)=\sqrt{\frac{2}{l}}\sin\left(\frac{n\pi}{l}x\right).$$

Гармонический осциллятор в квантовой механике

Гармоническим осциллятором называют частицу, совершающую одномерное движение под действием квазиупругой силы $F = kx.$

Потенциальная энергия частицы

$$U = \frac{kx^2}{2}, \quad U = \frac{m\omega^2 x^2}{2}, \quad \text{где} \quad \omega = \sqrt{\frac{k}{m}}.$$

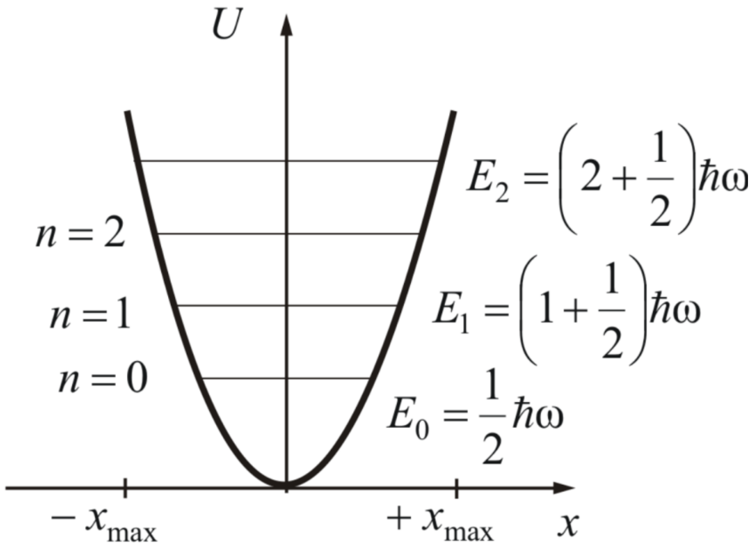
Гармонический осциллятор в квантовой механике описывается уравнением Шредингера:

$$\boxed{\frac{d^2\Psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E - \frac{m\omega^2 x^2}{2}\right)\Psi = 0}$$

Гармонический осциллятор в квантовой механике

Значения полной энергии осциллятора:

$$E_n = \left(n + 1/2\right)\, \hbar\omega, \qquad n = 0,\ 1,\ 2\ldots$$



число n – **главное квантовое число**, определяет энергетические уровни.

Для гармонического осциллятора $\Delta E_n = \hbar\omega$ не зависит от n

Минимальная энергия $E_0 = \dfrac{1}{2}\hbar\omega$ называется нулевой энергией, т.е. при T_0 = колебания атомов К в кристаллической решетке не прекращаются.

Потенциальная яма (ящик) - ограниченная область пространства где потенциальная энергия частицы меньше, чем вне её.

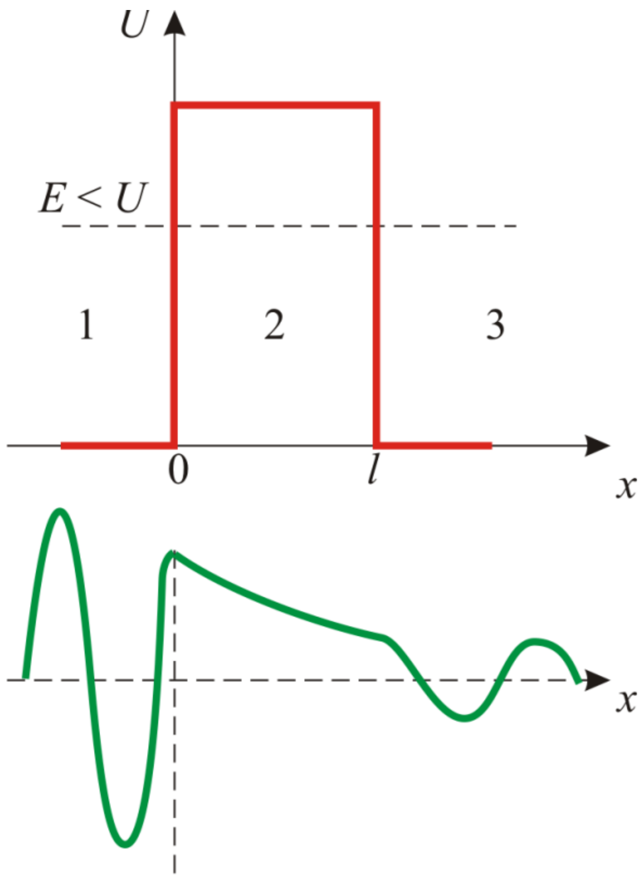
Туннельный эффект

Рассмотрим простейший потенциальный барьер прямоугольной формы для одномерного (по оси x) движения частицы.

Для потенциального барьера прямоугольной формы высоты U и ширины l можно записать:

$$U(x) = \begin{cases} 0, x < 0, & 1 \ \textit{обл.} \\ U, 0 < x < 1, & 2 \ \textit{обл.} \\ 0, \ x > 1, & 3 \ \textit{обл.} \end{cases}$$

классическая частица, обладая энергией E, либо беспрепятственно пройдет над барьером при E > U, либо отразится от него (E < U) и будет двигаться в обратную сторону, т.е. она не может проникнуть через барьер.



Вид волновой функции Ψ для разных областей

Туннельный эффект

Для микрочастиц, при E < U, имеется отличная от нуля вероятность, что частица отразится от барьера и будет двигаться в обратную сторону. При E > U имеется также отличная от нуля вероятность, что частица окажется в области x > l, т.е. проникнет сквозь барьер.

Уравнение Шредингера для состояний каждой из выделенных областей имеет вид:

$$\left| \begin{array}{ll} \dfrac{d^2\Psi}{dx^2} + \dfrac{2m}{\hbar^2} E\Psi = 0 & (1),(3) \\ \dfrac{d^2\Psi}{dx^2} - \dfrac{2m}{\hbar^2} (U_0 - E)\Psi = 0 & (2) \end{array} \right.$$

Общее решение этих дифференциальных уравнений:

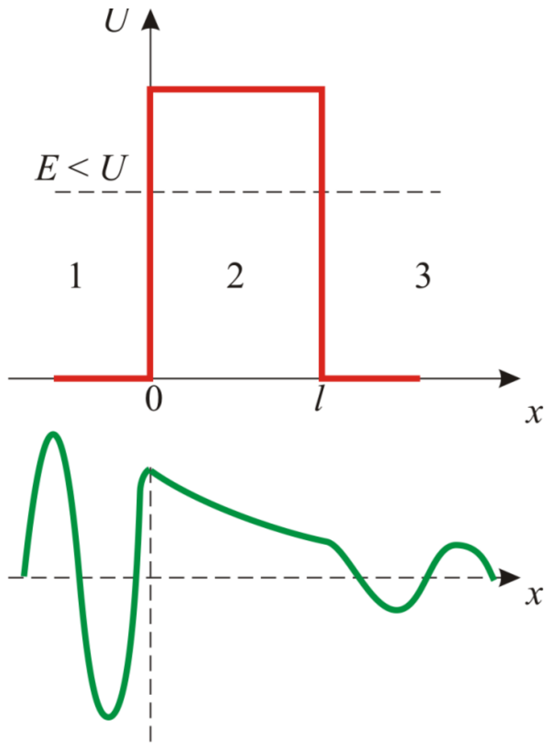
$$\Psi_1(x) = A_1 e^{ikx} + B_1 e^{-ikx} \quad \textit{для обл.}1, \qquad \Psi_3(x) = A_3 e^{ik(x-l)} + B_3 e^{-ik(x-l)} \quad \textit{для обл.}3,$$

$$\Psi 2(x) = A_2 e^{-\eta x} + B_2 e^{\eta x} \quad \textit{для обл.}2,$$

где $\eta = \dfrac{1}{\hbar}\sqrt{2m(U_0 - E)} > 0$

Туннельный эффект

Постоянные A1, B1, A2, B2, A3, B3 находят из условия непрерывности волновой функции и ее производной на границах барьера.



Из рисунка следует, что волновая функция не равна нулю и внутри барьера, а в области 3, если барьер не очень широк, будет опять иметь вид волн де Бройля с тем же импульсом, т.е. с той же частотой, но с меньшей амплитудой.

Туннельный эффект

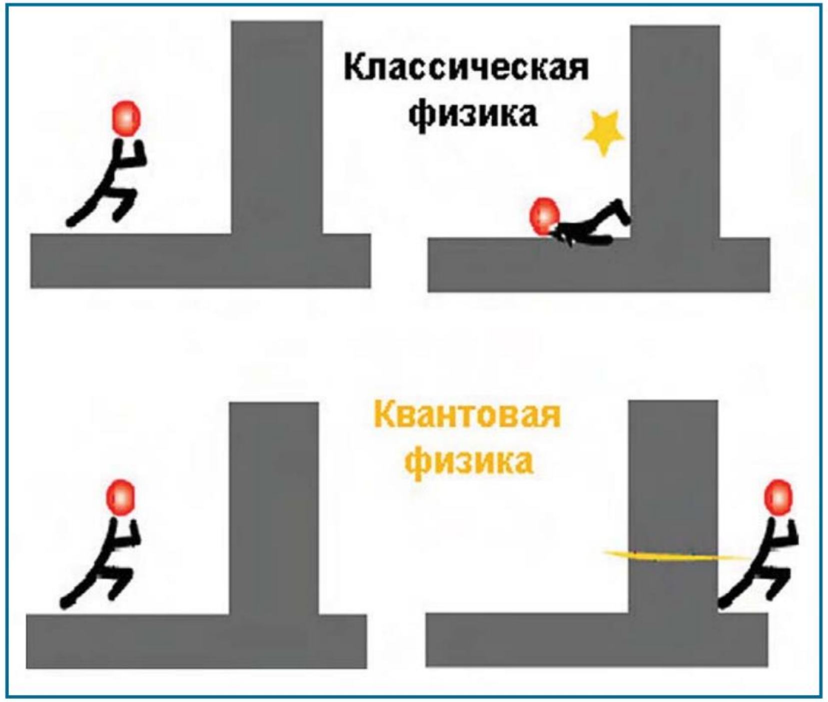
Туннельный эффект, **туннелирование** — преодоление микрочастицей потенциального барьера в случае, когда её полная энергия (остающаяся при туннелировании неизменной) меньше высоты барьера.

Коэффициент прозрачности для барьера прямоугольной формы

$$D = D_0 \exp\left(-\frac{2}{\hbar}\sqrt{2m(U-E)}\,l\right).$$

Для барьера произвольной формы

$$D = D_0 \exp\left(-\frac{2}{\hbar}\int\limits_{x_1}^{x_2}\sqrt{2m(U-E)}\,dx\right).$$



Туннельный эффект

Прохождение частицы сквозь барьер можно пояснить соотношением неопределенностей.

В связи с имеющейся неопределенностью в значении импульса и кинетической энергии частиц в области 2, возможно либо ее отражение, либо прохождение в область 3.

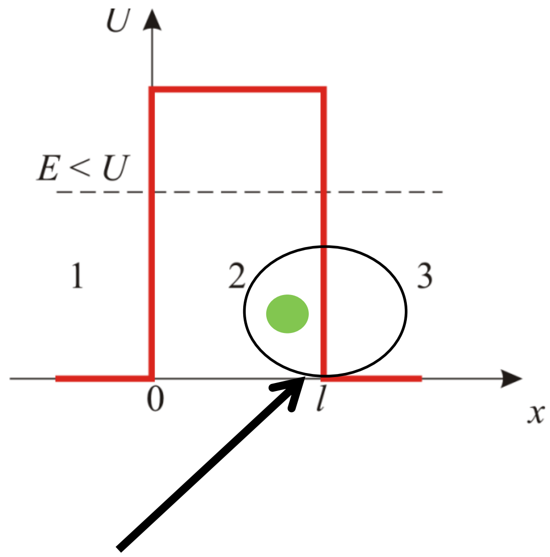
Неопределенность импульса на отрезке $\Delta x = l$ составляет $\Delta p > \dfrac{\hbar}{l}$.

Коэффициент прозрачности для барьера прямоугольной формы

$$D = D_0 \exp\left(-\frac{2}{\hbar}\sqrt{2m(U-E)}l \right).$$

Для барьера произвольной формы

$$D = D_0 \exp\left(-\frac{2}{\hbar}\int_{x_1}^{x_2}\sqrt{2m(U-E)}dx \right).$$



Вероятность нахождения частицы в пределах области

Туннельный эффект

Основы теории туннельных переходов заложены работами советских ученых Л.И. Мандельштама и М.А. Леонтовича в 1928 г. Туннельное прохождение сквозь потенциальный барьер лежит в основе многих явлений физики твердого тела (например явления в контактном слое на границе двух полупроводников), атомной и ядерной физики (например α-распад, протекание термоядерных реакций).

<u>В квантовой физике ничто не является стопроцентно определенным, а есть лишь вероятность тех или иных событий или результатов.</u>