Уравнение Шредингера

Лекция 10-12

Постникова Екатерина Ивановна,
доцент кафедры экспериментальной физики

22.11.2015

Уравнение Шредингера

Волновая функция и её статистический смысл

Сравнение дифракции световых волн и микрочастиц.

✓Для света: дифракционная картина – ослабление или усиление света в различных точках пространства. Интенсивность ~ A^2 световой волны.

✓Для частиц: дифракционная картина объясняется неодинаковым распределением потоков микрочастиц в различных направлениях после рассеяния (отражения), т.е. проявляются вероятностные (статистические) закономерности распространения волн де Бройля.

Но по волновому закону меняется не вероятность обнаружить частицу в точке пространства, а амплитуда вероятности, т.к. вероятность не может меняться по гармоническому закону, поскольку она не может быть отрицательной.

В квантовой механике положение частицы в пространстве в данный момент времени определяется *волновой функцией* (пси-функцией) $\psi(x, y, z, t)$ – амплитуда вероятности.

Вероятность dW того, что частица находится в элементарном объёме dV, пропорциональна $|\psi|^2$ и dV :

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

ψ может быть комплексной.

Квадрат модуля волновой функции: $|\psi|^2 = \psi \cdot \psi^*$,

ψ^* - функция комплексно сопряженная с ψ.

Описание состояния микрообъекта с помощью волновой функции имеет статистический (вероятностный) характер.

$|\psi|^2 = \dfrac{dW}{dV}$ – плотность вероятности, т.е. определяет

вероятность нахождения частицы в момент времени t в единичном объёме dV в окрестности точки с координатой (x,y,z).

Физический смысл имеет не ψ– функция, а $|\psi|^2$ – интенсивность волн де Бройля.

Вероятность найти частицу в момент t в конечном объёме V:

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

При интегрировании по бесконечному V вероятность обнаружить частицу равна 1. Из этого следует ***условие нормировки***:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi|^2 \, dV = 1 .$$

Ограничения на ψ– функцию:

1. конечная (т.к. вероятность не может быть > 1),
2. однозначна (вероятность не может быть неоднозначной величиной),
3. непрерывна (вероятность не может изменяться скачком).

Следовательно, ψ– *регулярная*.

ψ– функция удовлетворяет *принципу суперпозиции*:

$\psi = \sum_n C_n \cdot \psi_n$ – если система может находиться в различных состояниях, описываемых волновыми функциями ψ_1, ψ_2… ψ_n, то она может находиться в состоянии ψ, описываемом линейной комбинацией этих функций.

ψ– функция – *основная характеристика* состояния микрообъекта, позволяет вычислять средние значения физических величин, характеризующих данный микрообъект:

$$\langle L \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} L \cdot |\psi|^2 dV ,$$

L – физическая величина, например, энергия или координата.

Временное и стационарное уравнение Шредингера

Т.к. микрообъекты (в соответствии с предположением де Бройля) обладают волновыми свойствами, то уравнение, описывающее их движение в различных силовых полях должно быть *волновым уравнением* подобно уравнению электромагнитной волны.

В 1926 г. Шредингер постулировал ***временное уравнение Шредингера*** для частицы массой *m*, движущейся в поле с потенциальной энергией $U(x,y,z,t)$ со скоростью $\upsilon << c$:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + U(x,y,z,t)\cdot\psi = i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}, \quad (1)$$

– общее уравнение Шредингера

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} -$$ оператор Лапласа,

$$i = \sqrt{-1}$$ – мнимая единица.

***Условия*, накладываемые на ψ– функцию:**

1.ψ– функция регулярная, т.е. конечная, непрерывная, однозначная,

2. $\frac{\partial \psi}{\partial x}; \frac{\partial \psi}{\partial y}; \frac{\partial \psi}{\partial z}$ – непрерывные,

3. $|\psi|^2$ удовлетворяет условию нормировки.

Во многих случаях силовое поле, в котором движется частица, – стационарное, т.е. потенциальная энергия $U(x,y,z)$ не зависит от t. Для этого случая записывается ***стационарное уравнение Шредингера*** (уравнение Шредингера для стационарных состояний).

Решение стационарного уравнения Шредингера можно представить в виде произведения двух функций:

$$\psi(x,y,z,t) = \underbrace{\psi(x,y,z)}_{\textit{функция координат}} \cdot \underbrace{e^{-i\frac{E}{\hbar}t}}_{\textit{функция } t}, \quad (2)$$

$E = const$ – полная энергия частицы для стационарного поля.

Уравнение (2) подставляем в (1):

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

$$\Delta\psi + \frac{2m}{\hbar^2}(E-U)\psi = 0, (3)$$ – ***стационарное уравнение*** **Шредингера.**

Решение этого уравнения имеет бесконечное множество решений, но с учётом условий, накладываемых на ψ – функцию (регулярная, непрерывны первые производные, т.е. на ψ – функцию накладываются граничные условия), отбираются только решения, имеющие физический смысл – *собственные функции*.

Собственные функции существуют лишь при определённых значениях полной энергии *E*, называемых *собственными значениями энергии*. Совокупность собственных значений *E* образуют *энергетический спектр* частицы.

Если потенциальная энергия *U* – монотонная функция и $U \rightarrow 0$ на бесконечности, то в области $E < 0$ собственные значения энергии образуют *дискретный спектр*.

Отыскание собственных значений энергии *E* и собственных ψ– функций составляет основную задачу квантовой механики.

Движение свободной частицы

Частица движется в отсутствие внешних полей, т.е. $U = 0$, $E = E_к$ (полная энергия частицы равна кинетической энергии).

Уравнение Шредингера для одномерного случая движения вдоль оси x:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \underbrace{\frac{2m}{\hbar^2}E}_{k^2}\psi = 0$$ – дифференциальное уравнение плоской волны.

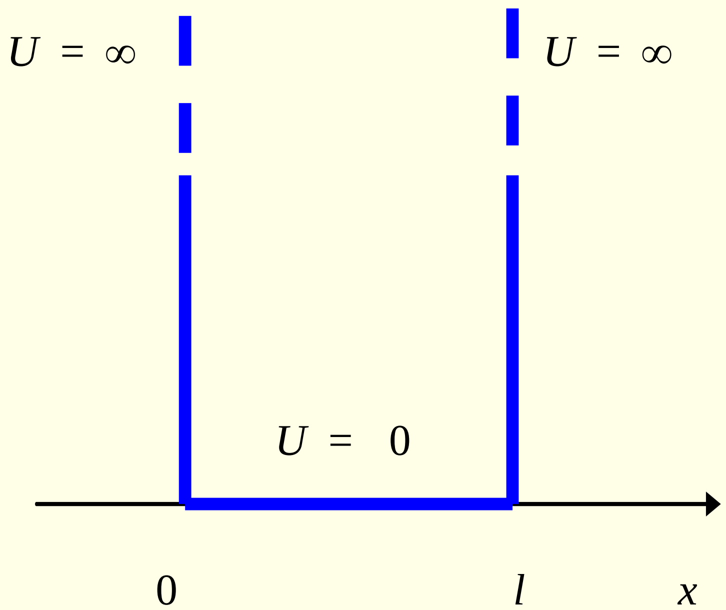
Свободная частица описывается плоской монохроматической волной де Бройля.

Все положения свободной частицы в пространстве равновероятны, т.к. вероятность обнаружить частицу в любой точке пространства

$$|\psi|^2 = \psi \cdot \psi^* = |A|^2 = const \ .$$

$E = \dfrac{\hbar^2 k^2}{2m}$ – собственные значения энергии, как для обычной нерелятивистской частицы, т.е. энергетический спектр свободной частицы – ***непрерывный***.

Частица в одномерной прямоугольной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками



Частица движется вдоль оси x.

Энергия отсчитывается от дна ямы.

Яма описывается потенциальной энергией

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

l – ширина ямы.

Уравнение Шредингера для стационарного состояния в одномерном случае:

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

Из граничных условий следует:

1. бесконечно высокие стенки → частица не проникает за пределы ямы → $\psi_{вне\ ямы} = 0,$

2. на границе ямы ($x = 0$, $x = l$) непрерывная функция ψ обращается в нуль: $\psi(0) = \psi(l) = 0,$

3. в яме $U = 0 \Rightarrow \dfrac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \underbrace{\dfrac{2m}{\hbar^2}}_{k^2} E\psi = 0. \Rightarrow$

Дифференциальное уравнение гармонического осциллятора:

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

Общее решение дифференциального уравнения:

$$\left.\begin{array}{r} \psi(x) = A\sin kx + B\cos kx, \\ \text{условие на границе: } \psi(0) = 0. \end{array}\right\} \Rightarrow B = 0. \Rightarrow$$

$$\left.\begin{array}{r} \psi(x) = A\sin kx, \\ \text{условие на границе: } \psi(l) = 0. \end{array}\right\} \Rightarrow \psi(l) = A\sin kl = 0 \Rightarrow$$

$$\left.\begin{aligned} &kl = n\pi \Rightarrow k = \frac{n\pi}{l}, \quad k^2 = \frac{n^2\pi^2}{l^2}. \\ &E = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \Rightarrow k^2 = \frac{2m}{\hbar^2}E. \end{aligned}\right\} E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ml^2}, n = 1, 2, 3 \ldots,$$

т.е. уравнение Шредингера удовлетворяется только при собственных значениях $E_n = E_n(n)$.

Т.о. E_n принимает *дискретные значения – квантуется*. Квантованные значения E_n называются *уровнями энергии*.

n – главное квантовое число определяет энергию уровня.

$$\left.\begin{aligned}\psi(x) &= A\sin kx,\\ k &= \frac{n\pi}{l}.\end{aligned}\right\}\ \psi_n(x) = A\sin\frac{n\pi}{l}x,$$

Условие нормировки: $\int\limits_{-\infty}^{\infty}|\psi|^2\,dV = 1,$

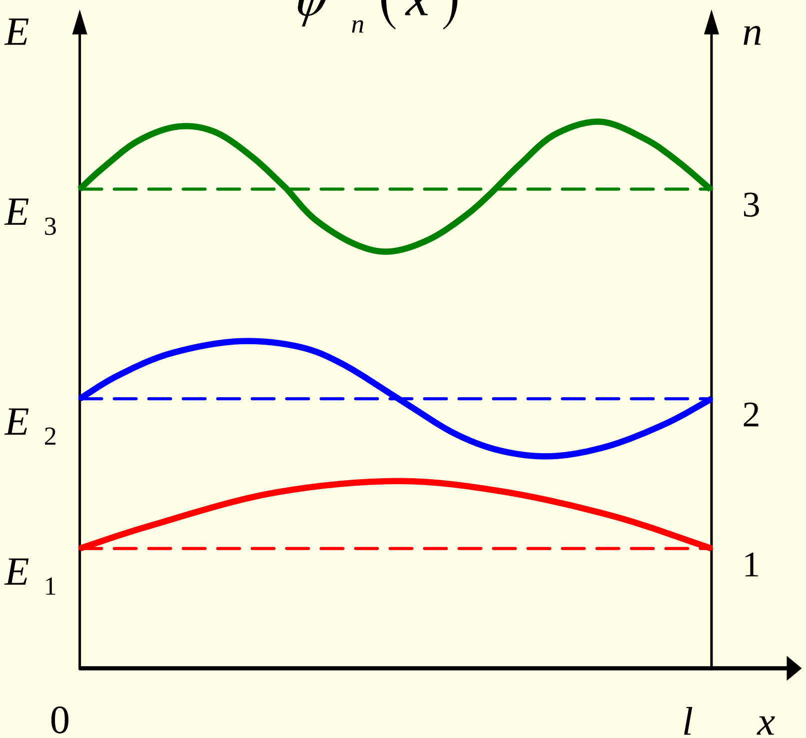
В одномерном случае: $\int\limits_{-\infty}^{\infty}|\psi|^2\,dx = 1.$

$$A^2\int\limits_0^l \sin^2\left(\frac{n\pi}{l}x\right)dx = 1 \quad\Rightarrow\quad A = \sqrt{\frac{2}{l}} \Rightarrow$$

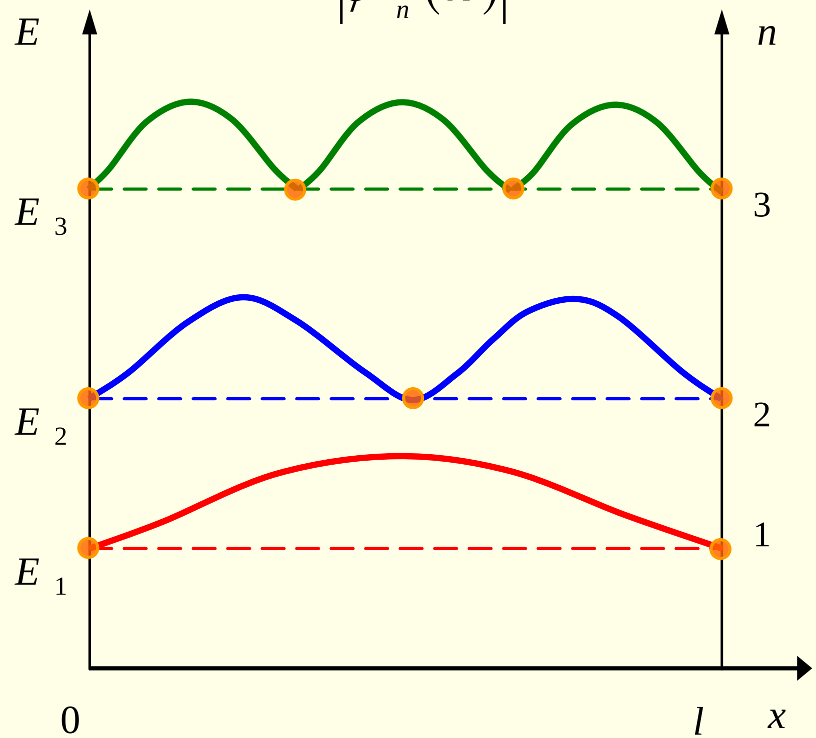
$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{l}}\sin\frac{n\pi}{l}x$$

Плотность вероятности обнаружить частицу.

$\psi_n(x)$



$\left|\psi_n(x)\right|^2$



– в точках частица не может находиться.

Из выражения

$$E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ml^2}$$

следует, что ***энергетический интервал между двумя соседними уровнями*** равен

$$\Delta E_n = E_{n+1} - E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{ml^2} n$$

Например, для электрона при размерах ямы $l = 10^{-10}$ м (свободные электроны в металле)

$$\Delta E_n \approx 10^{-35}\, n \text{ Дж} \approx 10^{-16}\, n \text{ Эв},$$

т.е. энергетические уровни расположены столь тесно, что спектр можно считать практически непрерывным.

Если размеры ямы соизмеримы с размерами стенки (l $\approx 10^{-10}$ м), то для электрона

$$\Delta E_n \approx 10^{-17}\, n \text{ Дж} \approx 10^{-2}\, n \text{ Эв},$$

т.е. получаются явно дискретные значения энергии (линейчатый спектр).

Т.о., ***применение уравнения Шредингера*** к частице в «потенциальной яме» с бесконечно высокими “стенками” ***приводит к квантованным значениям энергии***, в то время как классическая механика на энергию этой частицы лишних ограничений не накладывает.

Кроме того, ***квантово-механическое рассмотрение этой задачи*** приводит к выводу, что ***частица в потенциальной яме*** с бесконечно высокими «стенками» ***не может иметь энергию, меньшую, чем минимальная энергия равная***

$$E = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ml^2}$$

Наличие отличной от нуля минимальной энергии не случайно и вытекает ***из соотношения неопределенностей.***

Гармонический осциллятор

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

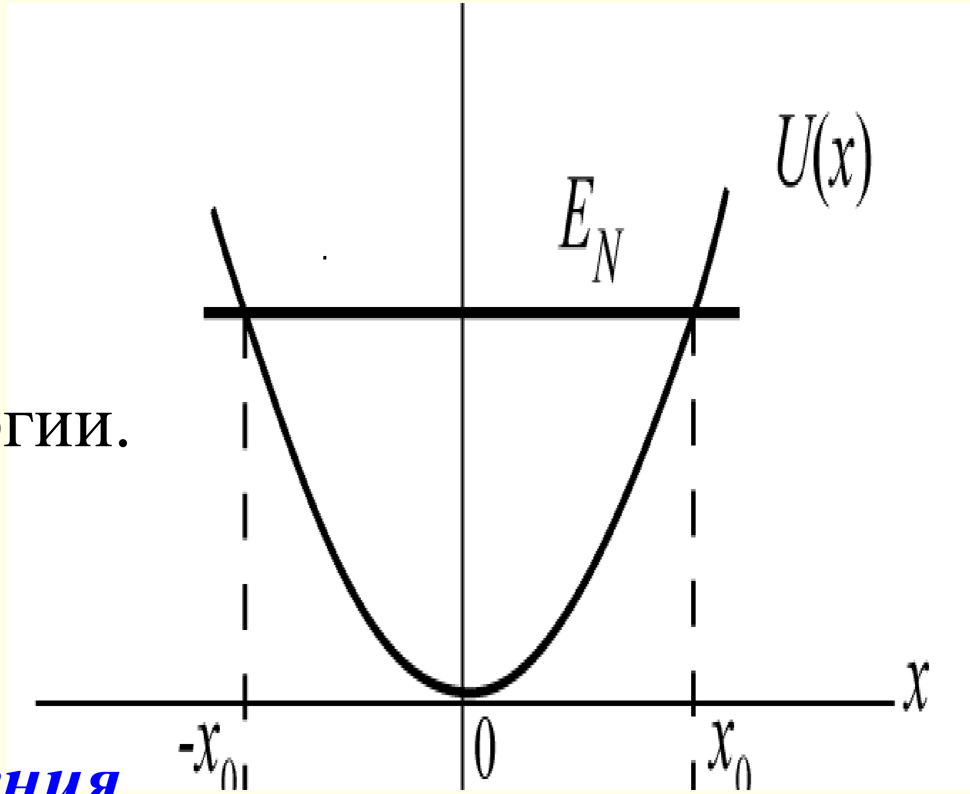
Потенциальная энергия частицы $U = kx^2/2$

или

$$U = \frac{m\omega^2 x^2}{2},$$

где $\omega = \sqrt{k/m}$

График потенциальной энергии частицы:



В точках с координатами $-x_0$ и $+x_0$, полная энергия равна потенциальной энергии.

Поэтому ***с классической точки зрения частица не может выйти за пределы области*** $-x_0$ ***и*** $+x_0$

Гармонический осциллятор в квантовой механике - ***квантовый осциллятор*** - описывается уравнением Шредингера:

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

Значения ***полной энергии*** осциллятора

$$E_n = (n + 1/2)\hbar\omega$$

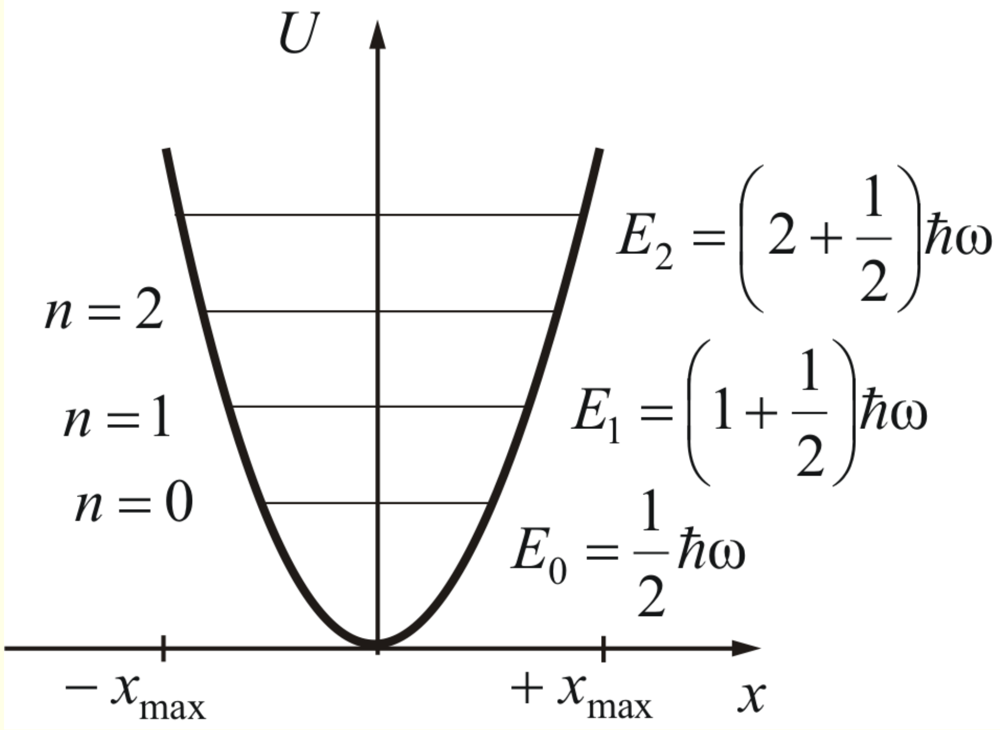
где n = 0, 1, 2…

$\Delta E_n = \hbar\omega$

и не зависит от ***n.***

Минимальная энергия

$$E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$$



называется нулевой энергией, т.е. при Т = 0К колебания атомов в кристаллической решетке не прекращаются. Это означает что частица не может находиться на дне потенциальной ямы.

В квантовой механике вычисляется вероятность различных переходов квантовой системы из одного состояния в другое. Для гармонического осциллятора возможны лишь переходы между соседними уровнями.

Условия, накладываемые на изменения квантовых чисел при переходах системы из одного состояния в другое, называются правилами отбора:

$$\Delta n = \pm 1$$

Таким образом, энергия гармонического осциллятора изменяется только порциями, т.е. квантуется

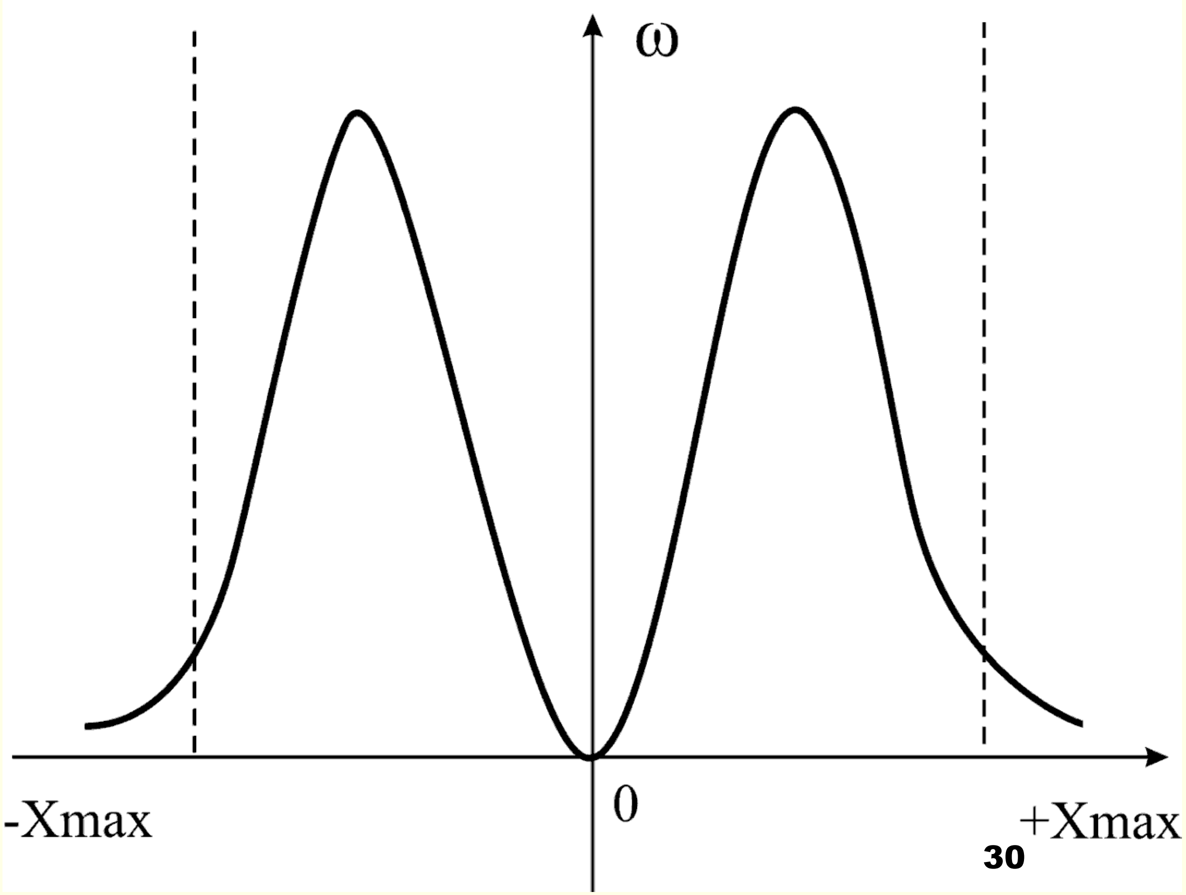
$$E_n = n\hbar\omega$$

Причем ***минимальная порция энергии*** $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$

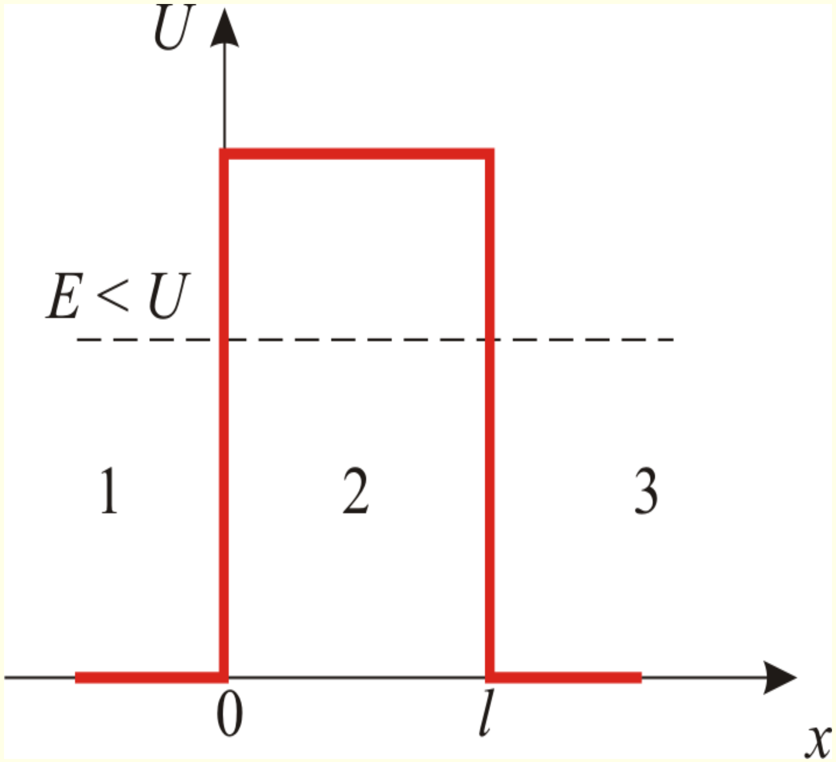
(тепловое излучение - энергия излучается квантами).

Кроме того например, при $n = 2$ в середине сосуда частицы быть не может. Это совершенно непонятно с классической точки зрения. ***Квантуется не только энергия, но и координата частицы!***

Квантово – механический расчет показывает, что частицу можно обнаружить и за пределами ямы, т.е. в области с координатами **$-x_0$** и **$+x_0$** , в то время как с классической точки зрения она не может выйти за пределы этой ямы.



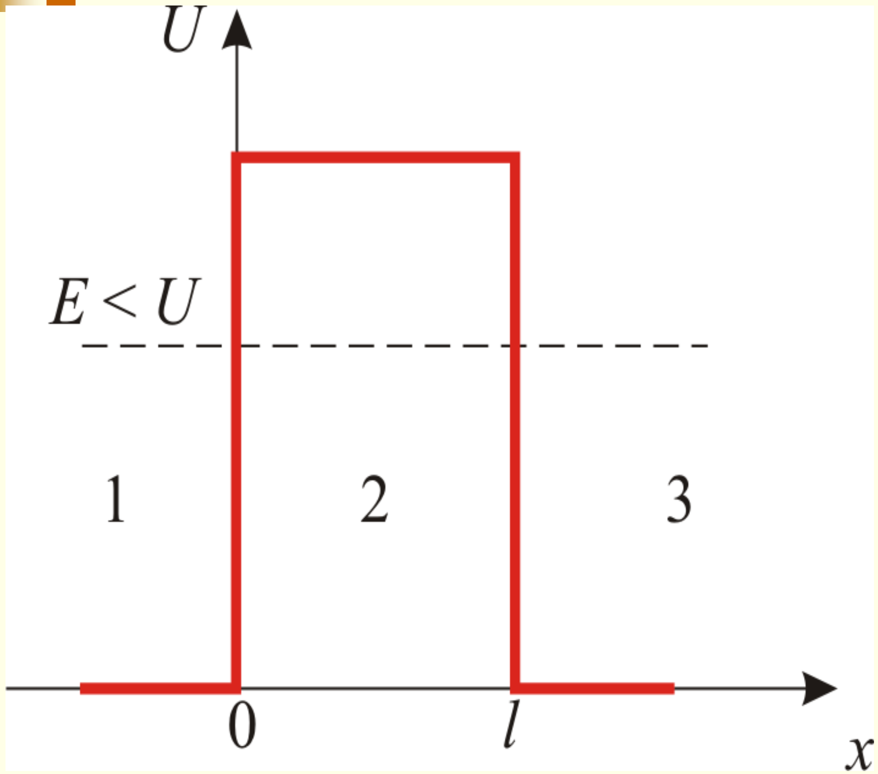
Прохождение частиц сквозь потенциальный барьер. Туннельный эффект



Рассмотрим простейший потенциальный барьер прямоугольной формы высоты *U* и шириной *l* для одномерного (по оси *x*) движения частицы.

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

При данных условиях задачи ***классическая частица,*** обладая энергией E: ***либо беспрепятственно пройдет под барьером, либо отразится от него*** ($E < U$) и будет двигаться в обратную сторону, т.е. она не может проникнуть через барьер.



Для микрочастицы, даже при ***E > U***, ***имеется отличная от нуля возможность, 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.

Такой вывод следует непосредственно из решения уравнения Шредингера, описывающего движение микрочастицы при данных условиях задачи.

Уравнение Шредингера для состояний для каждой их выделенных областей имеет вид:

$$\frac{\partial^2 \Psi_{1,3}}{\partial x^2} + k^2 \Psi_{1,3} = 0 \qquad \left(\textit{для}\ 1,3\ \textit{обл}.\ k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \right)$$

$$\frac{\partial^2 \Psi_{2}}{\partial x^2} + q^2 \Psi_{2} = 0 \qquad \left(\textit{для}\ 2\ \textit{обл}.\ q^2 = \frac{2m(E-U)}{\hbar^2} \right)$$

Здесь ***q = iβ*** *– мнимое число,* $\beta = \frac{\sqrt{2m(U-E)}}{\hbar}.$

Общее решение этих дифф. уравнений:

$$\Psi_1(x) = A_1 e^{ikx} + B_1 e^{-ikx} \qquad (1)$$

$$\Psi_2(x) = A_2 e^{ikx} + B_2 e^{-ikx} \qquad (2)$$

$$\Psi_3(x) = A_3 e^{ikx} + B_3 e^{-ikx} \qquad (3)$$

Учитывая значение **q** и то, что $A_1 = 1$, $B_3 = 0$, получим ***решение уравнения Шредингера*** для ***трех областей*** в следующем виде:

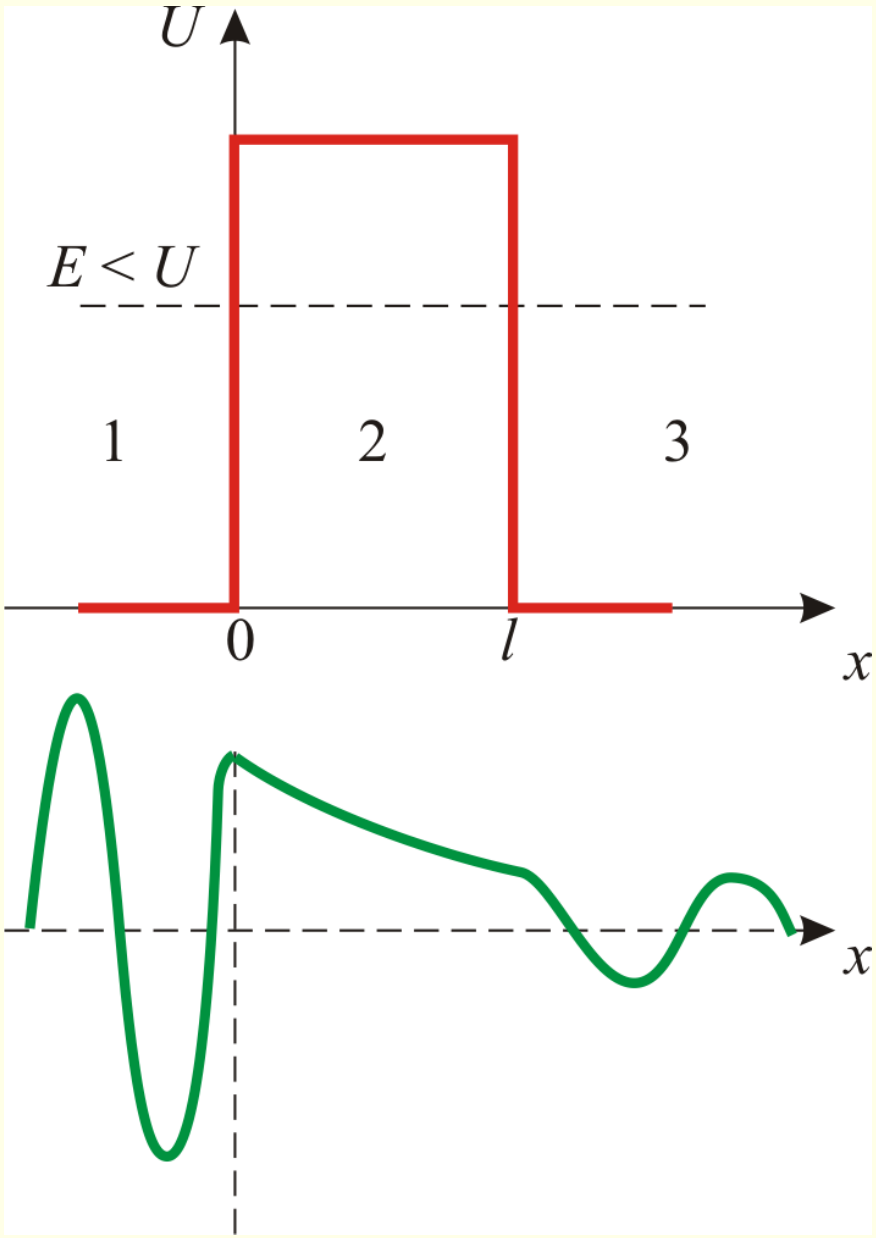
$$\Psi_1(x) = A_1 e^{ikx} + B_1 e^{-ikx} \quad (1)$$

$$\Psi_2(x) = A_2 e^{-\beta x} + B_2 e^{\beta x} \quad (2)$$

$$\Psi_3(x) = A_3 e^{ikx} \quad (3)$$

В области 2 функция уже не соответствует плоским волнам, распространяющимся в обе стороны, поскольку показатели степени не мнимые а действительные

Качественный анализ функций $\Psi_1(x)$, $\Psi_2(x)$, $\Psi_3(x)$



- В области ***1*** **плоская волна де Бройля.**
- ***Волновая функция не равна нулю и внутри барьера***, хотя уже не соответствует плоским волнам де Бройля
- 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.**

Таким образом, ***квантовая механика*** приводит к принципиально новому квантовому явлению - ***туннельному эффекту***,

в результате которого микрообъект может пройти через барьер.

Коэффициент прозрачности для барьера прямоугольной формы:

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

для барьера произвольной формы:

$$D = D_0 exp\left(-\frac{2}{\hbar}\int_{x_1}^{x_2}\sqrt{2m(U - E)}l\,\mathrm{d}x \right)$$

Прохождение частицы сквозь ,барьер ***можно пояснить соотношением неопределенностей.***

С классической точки зрения прохождение частицы сквозь потенциальный барьер при ***E < U невозможно***, так как частица, находясь в области барьера, должна была бы обладать отрицательной кинетической энергией.

Туннельный эффект является ***специфическим квантовым эффектом.***

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).

Конец лекции