Уравнение Шредингера

Уравнение Шредингера

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

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.

$U(x,y,z,t)$ - потенциальная энергия частицы в силовом поле.

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.

Уравнение Шредингера

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

- уравнение Шредингера для стационарных состояний **(стационарное уравнение Шредингера)**

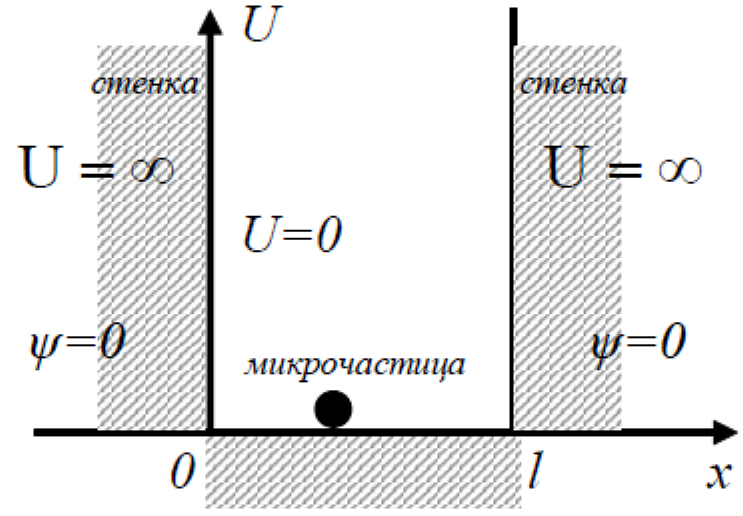
Общее решение уравнения Шредингера:

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

Задача 1. Найти энергетические уровни и нормированные волновые функции стационарных состояний частицы в бесконечно глубокой потенциальной яме шириной l.

- Решение:

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



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

$$U(x)=0$$

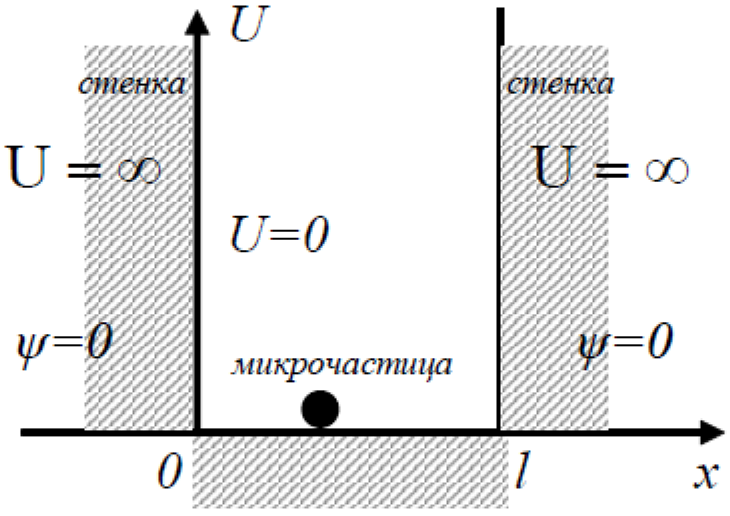
$$\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x)+E\psi(x)=0$$

$$k=\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}E}$$

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

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x)+k^2\psi(x)=0$$

Задача 1. Найти энергетические уровни и нормированные волновые функции стационарных состояний частицы в бесконечно глубокой потенциальной яме шириной l.



- Решение:

$$k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}E}$$

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x) + k^2\psi(x) = 0$$

$$\psi(x) = \alpha\cos kx + \beta\sin kx$$

Граничные условия:

$$\psi(0) = 0 \Rightarrow \alpha\cos 0 = \alpha = 0$$

$$\psi(l) = 0 \Rightarrow \beta\sin kl = 0$$

$$\Rightarrow \sin kl = 0$$

$$kl = \pi n$$

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

$$\psi(x) = \beta\sin\left(\frac{\pi n x}{l}\right)$$

Задача 1. Найти энергетические уровни и нормированные волновые функции стационарных состояний частицы в бесконечно глубокой потенциальной яме шириной l.

- <u>Решение:</u> Условие нормировки: $\int_0^l |\psi(x)|^2 dx = 1$

$$\int_0^l \beta^2 \sin^2\left(\frac{\pi n x}{l}\right) dx = \beta^2 \int_0^l \frac{1}{2}\left(1 - \cos\left(\frac{2\pi n x}{l}\right)\right) dx$$

$$= \beta^2 \left(\frac{1}{2}x - \frac{l}{2\pi n}\sin\left(\frac{2\pi n x}{l}\right)\right)\Bigg|_0^l = \beta^2\left(\frac{l}{2} - \frac{l}{2\pi n}\sin(2\pi n)\right)$$

$$= \frac{\beta^2 l}{2} = 1$$

$$\Rightarrow \beta = \sqrt{\frac{2}{l}}$$

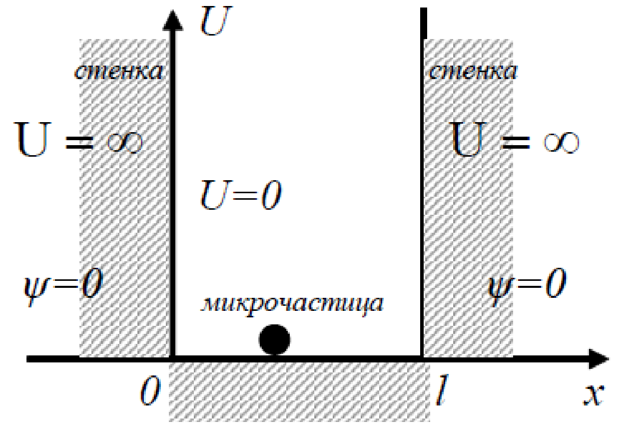
$$\boxed{\psi(x) = \sqrt{\frac{2}{l}} \sin\frac{\pi n x}{l}}$$

- нормированная волновая функция

$$k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}E} = \frac{\pi n}{l}$$

$$\boxed{\Rightarrow E_n = \frac{\pi^2 n^2 \hbar^2}{2 m l^2}}$$

Задача 2. В условиях первой задачи найти относительное расстояние между соседними уровнями.



- Решение:

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

$$\frac{\Delta E_n}{E_n} - ?$$

$$\Delta E_n = E_{n+1} - E_n$$

$$\Delta E_n = \frac{\pi^2\hbar^2(n+1)^2}{2ml^2} - \frac{\pi^2\hbar^2 n^2}{2ml^2} = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ml^2}\left((n+1)^2 - n^2\right) = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ml^2}(2n+1)$$

$$\frac{\Delta E_n}{E_n} = \frac{\pi^2\hbar^2(2n+1)}{2ml^2}\cdot\frac{2ml^2}{\pi^2\hbar^2 n^2} = \frac{(2n+1)}{n^2} \sim \frac{1}{n}$$

Задача 3. В задаче 1 сделать графики собственных волновых функций и плотности вероятности, соответствующих уровням энергии n=1,2,3.

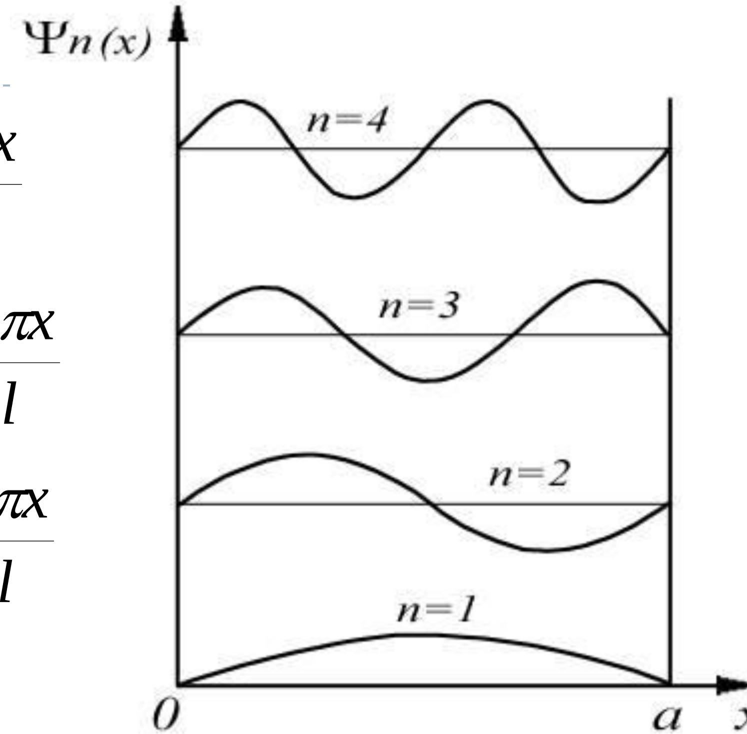
- Решение:

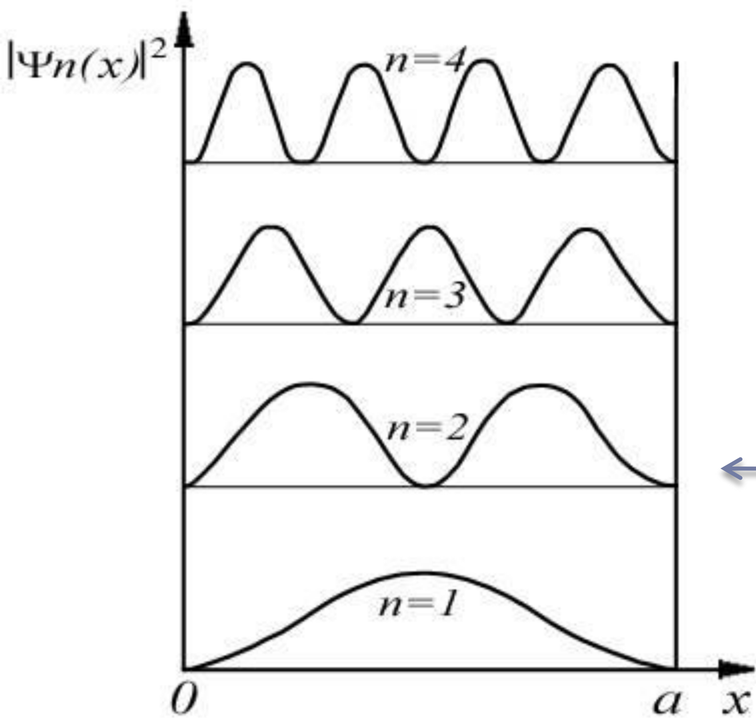
$$\boxed{\psi_n(x)=\sqrt{\frac{2}{l}}\sin\frac{\pi n x}{l}}$$

$$\psi_1(x)=\sqrt{\frac{2}{l}}\sin\frac{\pi x}{l}$$

$$\psi_2(x)=\sqrt{\frac{2}{l}}\sin\frac{2\pi x}{l}$$

$$\psi_3(x)=\sqrt{\frac{2}{l}}\sin\frac{3\pi x}{l}$$





Плотность вероятности нахождения частицы в потенциальной яме.

Задача 4. Оценить с помощью соотношения неопределенностей минимальную кинетическую энергию электрона, локализованного в области размером *l*=0.20 нм.

- Решение: $\Delta x \cdot \Delta p \geq \hbar$

$$\Delta x = l \qquad \Rightarrow \Delta p \geq \frac{\hbar}{l}$$

$$T_{\min} = \frac{\Delta p^2}{2m_e} = \frac{\hbar^2}{2m_e l^2}$$

$$T_{\min} = \frac{\left(1.05 \cdot 10^{-34}\right)^2}{2 \cdot 9.1 \cdot 10^{-31}\left(0.2 \cdot 10^{-9}\right)^2} = 1.51 \cdot 10^{-19}\, Дж = 0.94 эВ$$

Задача 5. Написать уравнение Шредингера для электрона, находящегося в водородоподобном атоме.

- Решение:

Потенциальная энергия электрона в атоме: $U = -\dfrac{qe}{4\pi\varepsilon_0 r}$,

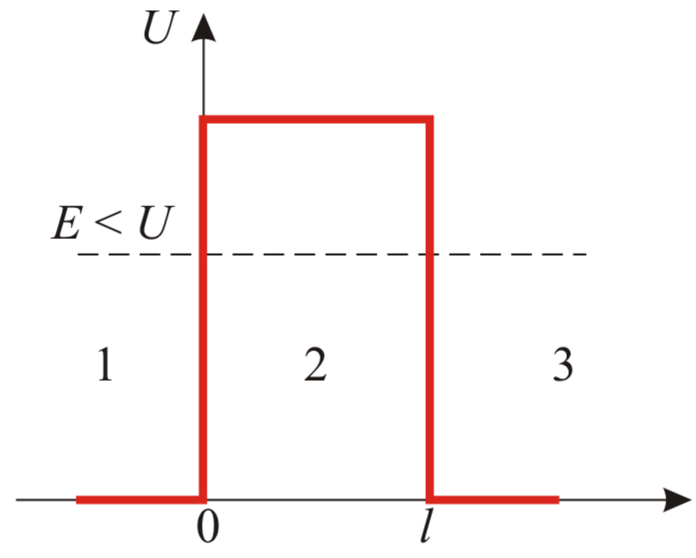
$q=Ze$ – заряд ядра.

Тогда уравнение Шредингера: $\Delta\psi(r) + \dfrac{2m}{\hbar^2}(E-U)\psi(r) = 0$

$$\Delta\psi(r) + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E + \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\right)\psi(r) = 0$$

Задача 6. Прямоугольный потенциальный барьер имеет ширину l=0.1нм. При какой разности энергий (U-E) вероятность прохождения электрона через барьер равна 0.99?

- <u>Решение:</u> Вероятность прохождения электрона через барьер – коэффициент прозрачности:



$$D = \frac{|A_3|^2}{|A_0|^2} = e^{-\frac{2}{\hbar}\sqrt{2m(U-E)}l}$$

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

$$\Rightarrow (U-E) = \frac{\hbar^2(\ln D)^2}{8ml^2}$$

$$(U-E) = \frac{(1.05\cdot 10^{-34})^2(\ln 0.99)^2}{8\cdot 9.1\cdot 10^{-31}\cdot(10^{-10})^2}$$

$$\psi_1(x,t) = A_0 e^{-i(\omega t - kx)}$$

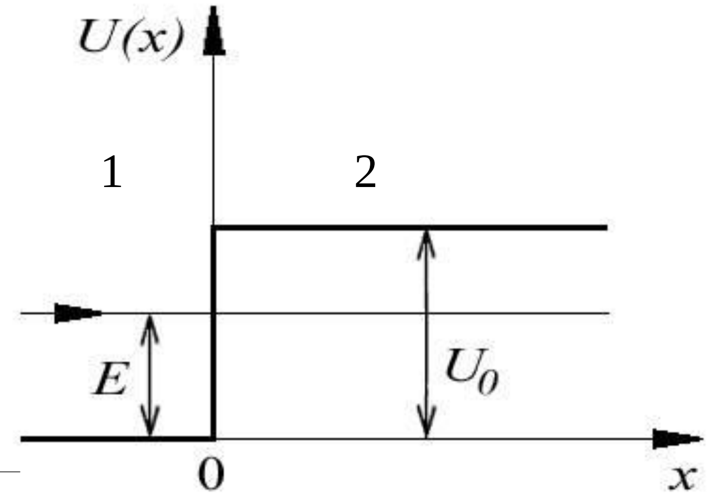
$$\psi_2(x,t) = A_0 e^{-\eta x} e^{-i(\omega t)}$$

$$\psi_3(x,t) = A_3 e^{-i(\omega t - k(x-l))}$$

$$\eta = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(U-E)} > 0$$

- $= 1.5\cdot 10^{-23}\ \text{Дж} = 0.9\cdot 10^{-4}\ \text{эВ}$

Задача 7. Электрон с энергией E=100 эВ попадает на потенциальный барьер высотой U_0=64 эВ. Определить вероятность того, что электрон отразится от барьера.



- **Решение:**

Уравнение Шредингера для каждой области:

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi_1(x)+k_1^2\psi_1(x)=0 \qquad k_1=\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}E}$$

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi_2(x)+k_2^2\psi_2(x)=0 \qquad k_2=\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E-U_0)}$$

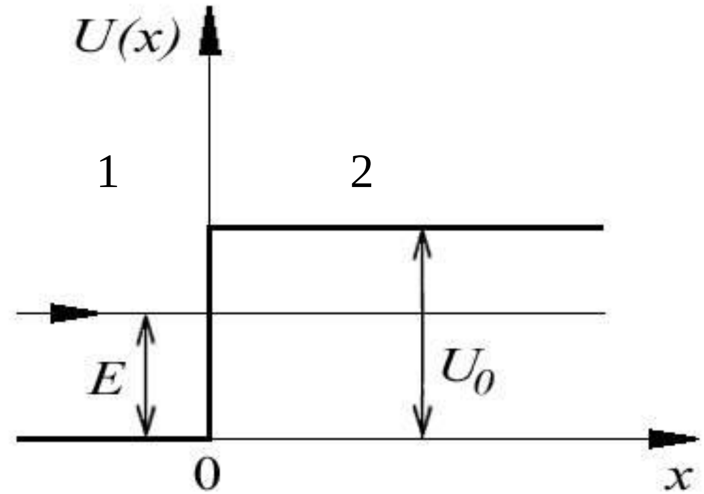
В области 1 волновая функция равна сумме падающей и отраженной волны:

$$\psi_1(x)=Ae^{ik_1x}+Be^{-ik_1x}$$

В области 2 волновая функция равна прошедшей волне:

$$\psi_2(x)=Ce^{ik_2x}$$

Задача 7. Электрон с энергией E=100 эВ попадает на потенциальный барьер высотой U_0=64 эВ. Определить вероятность того, что электрон отразится от барьера.



- Решение:

Граничные условия:

$$\psi_1(0)=\psi_2(0)$$

$$\frac{\partial\psi_1(0)}{\partial x}=\frac{\partial\psi_2(0)}{\partial x}$$

$$\psi_1(0)=A+B \qquad \frac{\partial\psi_1(0)}{\partial x}=ik_1A-ik_2B$$

$$\psi_2(0)=C \qquad \frac{\partial\psi_2(0)}{\partial x}=ik_2C$$

Коэффициент отражения:

$$R=\frac{|B|^2}{|A|^2}=\frac{C^2(k_1-k_2)^2}{4k_1^2}\cdot\frac{4k_1^2}{C^2(k_1+k_2)^2}$$

$$\begin{cases}A+B=C\\(A-B)=\dfrac{k_2}{k_1}C\end{cases}\Rightarrow\begin{cases}A=\dfrac{C}{2}\left(1+\dfrac{k_2}{k_1}\right)\\B=\dfrac{C}{2}\left(1-\dfrac{k_2}{k_1}\right)\end{cases}$$

$$R=\frac{(k_1-k_2)^2}{(k_1+k_2)^2}=\frac{\left(1-\sqrt{1-\dfrac{U_0}{E}}\right)^2}{\left(1+\sqrt{1-\dfrac{U_0}{E}}\right)^2}$$

- $R=0.0625$

Задача 8. Вычислить отношение вероятностей W_1/W_2 нахождения электрона на первом и втором энергетических уровнях в интервале $l/4$, равноудаленном от стенок одномерной потенциальной ямы шириной l.

- <u>Решение:</u>

Найдем границы интервала, равноудаленного от стенок потенциальной ямы:

$$x_1 = \frac{l-\Delta x}{2} = \frac{3}{8}l$$

$$x_2 = \frac{l+\Delta x}{2} = \frac{5}{8}l$$

$$|\psi_n(x)|^2 = \frac{2}{l}\sin^2\left(\frac{n\pi x}{l}\right)$$

$$W_1 = \int_{x_1}^{x_2} |\psi_1(x)|^2 dx = \frac{2}{l}\int_{x_1}^{x_2} \sin^2\left(\frac{\pi x}{l}\right) dx = \frac{2}{l}\int_{x_1}^{x_2} \frac{1-\cos\left(\frac{2\pi x}{l}\right)}{2} dx$$

$$= \frac{1}{l}\left(x - \frac{l}{2\pi}\sin\left(\frac{2\pi x}{l}\right)\right)\Bigg|_{\frac{3}{8}l}^{\frac{5}{8}l} = \frac{1}{4} - \frac{1}{2\pi}\left(\sin\left(\frac{5\pi}{4}\right) - \sin\left(\frac{3\pi}{4}\right)\right) = \frac{1}{4} + \frac{\sqrt{2}}{2\pi}$$

Задача 8. Вычислить отношение вероятностей W_1/W_2 нахождения электрона на первом и втором энергетических уровнях в интервале $l/4$, равноудаленном от стенок одномерной потенциальной ямы шириной l.

- Решение:

$$W_2 = \int_{x_1}^{x_2} \left|\psi_2(x)\right|^2 dx = \frac{2}{l}\int_{x_1}^{x_2} \sin^2\left(\frac{2\pi x}{l}\right) dx = \frac{2}{l}\int_{x_1}^{x_2} \frac{1-\cos\left(\frac{4\pi x}{l}\right)}{2} dx$$

$$= \frac{1}{l}\left(x - \frac{l}{4\pi}\sin\left(\frac{4\pi x}{l}\right)\right)\Bigg|_{\frac{3}{8}l}^{\frac{5}{8}l} = \frac{1}{4} - \frac{1}{4\pi}\left(\sin\left(\frac{5\pi}{2}\right) - \sin\left(\frac{3\pi}{2}\right)\right) = \frac{1}{4} - \frac{1}{2\pi}$$

$$\frac{W_1}{W_2} = \frac{\frac{1}{4} + \frac{\sqrt{2}}{2\pi}}{\frac{1}{4} - \frac{1}{2\pi}} = \frac{\pi + 2\sqrt{2}}{\pi - 2} = 5.23$$

Задача 9. Электрон находится в потенциальном ящике шириной l=0.5 нм. Определить наименьшую разность энергетических уровней электрона. Ответ выразить в электрон-вольтах.

- Решение:

Энергия электрона в одномерной потенциальной яме может принимать дискретный ряд значений:

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

Энергетическое расстояние между ближайшими уровнями n и n+1:

$$\Delta E_n = \frac{h^2}{8m_e l^2}\left[(n+1)^2 - n^2\right]$$

$$\Delta E_n = \frac{h^2}{8m_e l^2}\left[n^2 + 2n + 1 - n^2\right] = \frac{h^2}{8m_e l^2}\left[2n+1\right]$$

Минимальное энергетическое расстояние между уровнями при n=1:

$$\Delta E_1 = \frac{3h^2}{8m_e l^2} \qquad \Delta E_1 = 7.23 \cdot 10^{-19}\,\text{Дж} = 4.5\,\text{эВ}$$

Задача 10. Частица находится в потенциальном ящике. Найти отношение разности соседних энергетических уровней $\Delta E_{n+1,n}$ к энергии частицы E_n в трех случаях: 1) n=3; 2) n=10; 3) $n\to\infty$.

- Решение:

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

$$\Delta E_n = \frac{\pi^2\hbar^2(n+1)^2}{2ml^2} - \frac{\pi^2\hbar^2 n^2}{2ml^2} = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ml^2}\left((n+1)^2 - n^2\right) = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ml^2}(2n+1)$$

$$\frac{\Delta E_n}{E_n} = \frac{\pi^2\hbar^2(2n+1)}{2ml^2}\cdot\frac{2ml^2}{\pi^2\hbar^2 n^2} = \frac{(2n+1)}{n^2} \sim \frac{1}{n}$$

1) При n=3 $$\frac{\Delta E_n}{E_n} = \frac{(2n+1)}{n^2} = \frac{7}{9} = 0.77$$

2) При n=10 $$\frac{\Delta E_n}{E_n} = \frac{(2n+1)}{n^2} = \frac{21}{100} = 0.21$$

3) При $n\to\infty$ $$\frac{\Delta E_n}{E_n} = \frac{2}{n} + \frac{1}{n^2} \to 0$$

Задача 11. Протон с энергией E=1 МэВ изменил при прохождении потенциального барьера дебройлевскую длину волны на 1%. Определить высоту U потенциального барьера.

- <u>Решение:</u>

Энергия покоя протона:

$$E_0 = m_p c^2 = 1.66 \cdot 10^{-27} \text{кг} \cdot 9 \cdot 10^{16} \text{м}^2/\text{с}^2 =$$

$$= 1.49 \cdot 10^{-10} \text{Дж} = 9.3 \cdot 10^8 \text{эВ} >> E$$

Следовательно, можем применять формулу для кинетической энергии:

$$T = \frac{m_p v^2}{2} = \frac{p}{2m_p}$$

$$\lambda_1 = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2m_p E}}$$

$$\lambda_2 = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2m_p (E-U)}}$$

$$\Rightarrow \frac{\lambda_1}{\lambda_2} = \frac{\sqrt{E-U}}{\sqrt{E}}$$

$$\lambda_2 = \lambda_1 + \Delta\lambda =$$

$$\lambda_1 + 0.01\lambda_1 = 1.01\lambda_1$$

$$\frac{\lambda_1^2}{\lambda_2^2} = \frac{E-U}{E} \qquad \Rightarrow U = E\left(1 - \frac{\lambda_1^2}{\lambda_2^2}\right)$$

$$U = 0.02 \text{МэВ}$$