

Квантовая (Волновая) механика Шредингера

Решения уравнения Шредингера.

1D Квантовый гармонический осциллятор (КГО)

Гармонический осциллятор в классической механике: частица массой m , квазиупругая сила $F = -kx$ → потенциальная энергия $U(x) = kx^2 / 2$
уравнение движения $m\ddot{x} = -kx$ → гармонические колебания с частотой $\omega = \sqrt{k/m}$. Потенциальную энергию удобно переписать в виде

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

В квантовой механике:

уравнение Ньютона → уравнение Шредингера $\hat{H}\psi = E \cdot \psi$, где

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(\vec{r}).$$

$$\nabla^2 \psi + \frac{2m}{\hbar^2} [E - U(x)] \cdot \psi = 0 \rightarrow \frac{d^2 \psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left[E - \frac{m\omega^2 x^2}{2} \right] \cdot \psi = 0 .$$

Введем безразмерную переменную $\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \cdot x$. Тогда

$$\frac{d^2 \psi}{dx^2} = \frac{d^2 \psi}{d\xi^2} \cdot \left(\frac{d\xi}{dx} \right)^2 = \frac{d^2 \psi}{d\xi^2} \cdot \frac{m\omega}{\hbar} , \quad \Rightarrow \quad \frac{d^2 \psi}{d\xi^2} + \left[\frac{2E}{\hbar\omega} - \xi^2 \right] \cdot \psi = 0 \quad (*)$$

Асимптотическое (asymptotic) поведение решения ψ_a можно угадать:

при $\frac{2E}{\hbar\omega} \ll \xi^2$ уравнение (*) сводится к

$$\frac{d^2 \psi_a}{d\xi^2} - \xi^2 \cdot \psi_a = 0 \quad (**)$$

Приближенные решения (**) (при $\xi^2 \gg 1$):

$$\psi_a \approx \exp(\pm \xi^2 / 2)$$

Расходящееся на бесконечности решение следует отбросить (**требование конечности ВФ**) и дальше искать ВФ в виде

$$\psi = f \cdot \psi_a .$$

Схема дальнейшего решения: получаем дифференциальное уравнение на f → ищем решение в виде степенного ряда (см. уравнения мат. физики).

Решения: при разумных граничных условиях, т.е., ВФ → 0 при $x \rightarrow \pm\infty$ - только при дискретных значениях энергии:

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \cdot \hbar\omega, \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

ВФ:

$$\psi_n(x) = C_n \cdot H_n(\xi) \cdot e^{-\xi^2/2}$$

H_n - полиномы Эрмита, $\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \cdot x$, нормировочные постоянные

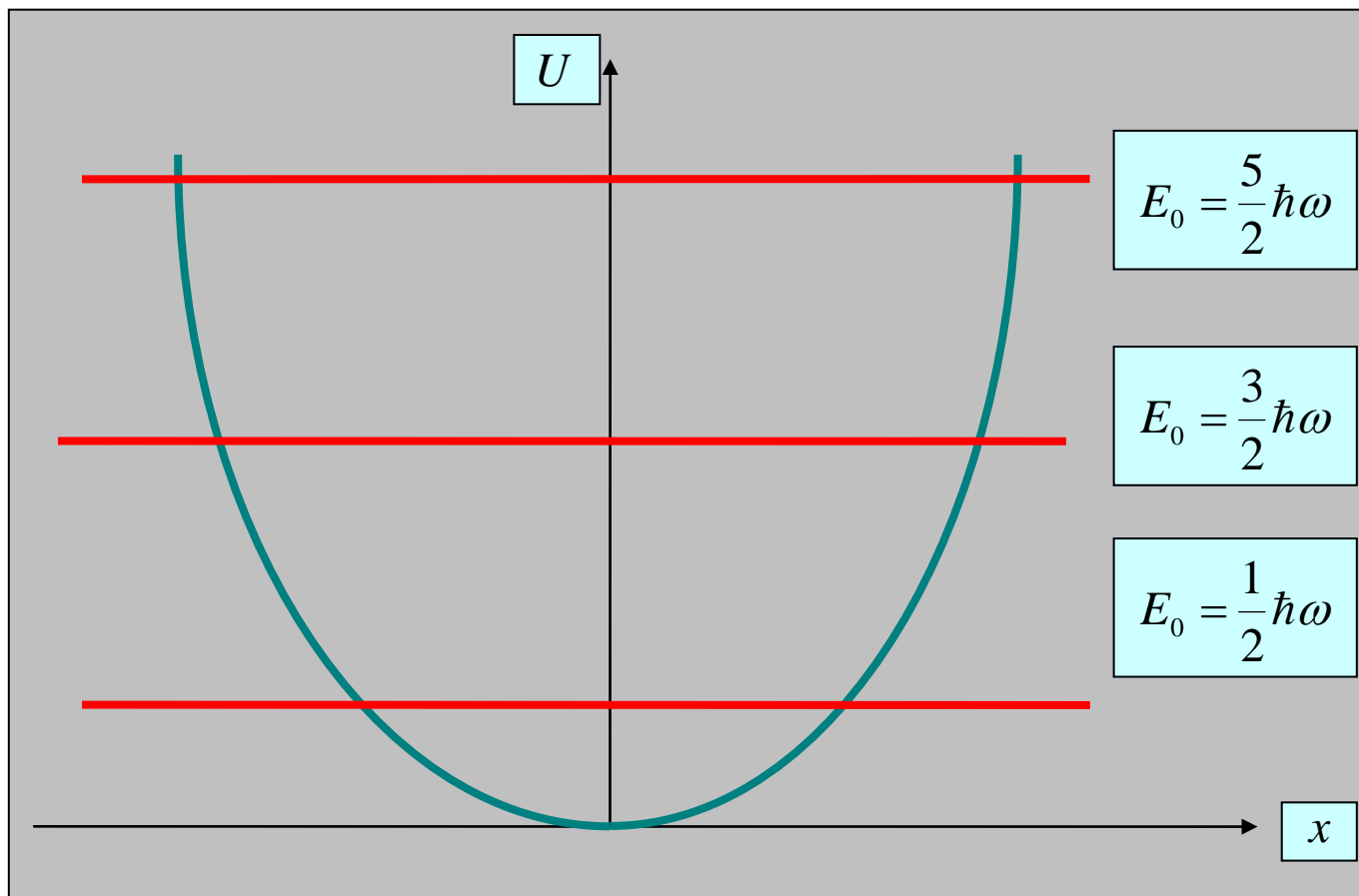
$$C_n = \left(2^n \cdot n! \cdot \sqrt{\frac{\pi \hbar}{m\omega}} \right)^{-1/2}$$

Первые три состояния:

- $n = 0$ $E_0 = \frac{1}{2} \hbar \omega$ $\psi_0 = C_0 \cdot \exp(-\xi^2/2)$
- $n = 1$ $E_1 = \frac{3}{2} \hbar \omega$ $\psi_1 = C_1 \cdot (2\xi) \cdot \exp(-\xi^2/2)$
- $n = 2$ $E_2 = \frac{5}{2} \hbar \omega$ $\psi_2 = C_2 \cdot (4\xi^2 - 2) \exp(-\xi^2/2)$

Энергетический спектр задачи о КГО – дискретен, как в примере с прямоугольной ямой с бесконечно высокими стенками.

Лестница уровней КГО (сравнить с бесконечной прямоугольной ямой!):



Итоги:

- Уровни энергий КГО эквидистанты
- Минимальное значение энергии КГО – «нулевая энергия» $E_0 = \hbar\omega/2$.
Это - проявление специфических квантовых свойств системы и связано с соотношением неопределенностей Гейзенберга для координаты и импульса (ЛК-16)

- Энергия КГО может изменяться только порциями величиной $\hbar\omega$ → следствие решения у.Ш. с гармоническим потенциалом → подтверждение гипотезы Планка (выдвинута при создании теории теплового излучения)
- Волновые функции КГО – четные (n - четное) и нечетные (n - нечетное). Это – следствие четности потенциальной энергии

$$U(x) = \frac{m\omega^2 x^2}{2}.$$

- Большие квантовые числа: $n \gg 1$

$$\frac{\Delta E}{E} = \frac{E_{n+1} - E_n}{E_n} = \frac{\hbar\omega}{(n + 1/2)\hbar\omega} \cong \frac{1}{n}$$

Возникновение (квази) непрерывного спектра излучения КГО при квантовых переходах вместо линейчатого → переход к классической физике.

Квантовый и классический гармонический осцилляторы

Классический осциллятор: траектория частицы $x(t) = a \cdot \sin(\omega t)$, $\omega = \sqrt{k/m}$

Полная энергия $E = ka^2/2$

Вероятность нахождения частицы на отрезке $x \div x + dx$

$$\rho(x)dx = \frac{dt}{T/2}$$

Половину времени частица движется слева направо и половину - справа налево.

Если скорость частицы v , то $dt = dx/v \rightarrow$

$$\rho(x)dx = \frac{2dt}{T} = \frac{2}{2\pi/\omega} \frac{dx}{v} = \frac{\omega}{\pi} \frac{dx}{v}$$

Находим

$$v = \frac{dx}{dt} = a\omega \cdot \cos(\omega t) = a\omega \cdot \sqrt{1 - x^2/a^2}$$

Для вероятности нахождения частицы на отрезке $x \div x + dx$ ($-a \leq x \leq a$) получаем:

$$\rho(x)dx = \frac{1}{\pi a} \frac{dx}{\sqrt{1 - x^2/a^2}}$$

Следствие: в классической механике плотность вероятности обнаружить частицу на отрезке $x \div x + dx \rightarrow \infty$ при $x \rightarrow \pm a$ (вблизи точек поворота). Величина a - амплитуда колебаний - определяется начальными условиями (в конечном счете, полной энергией осциллятора).

Квантовый гармонический осциллятор: плотность вероятности обнаружить частицу на отрезке $x \div x + dx$ определяется квадратом модуля волновой

функции и зависит от номера состояния (в конечном счете – от полной энергии, но теперь – энергия квантована):

$$\rho_n(x)dx = |\psi_n(x)|^2 dx$$

Только дискретные значения энергии КГО:

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \cdot \hbar\omega, \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

Волновые функции:

$$\psi_n(x) = C_n \cdot H_n(\xi) \cdot e^{-\xi^2/2}$$

H_n - полиномы Эрмита, $\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \cdot x$, C_n - нормировочные постоянные

Следствия:

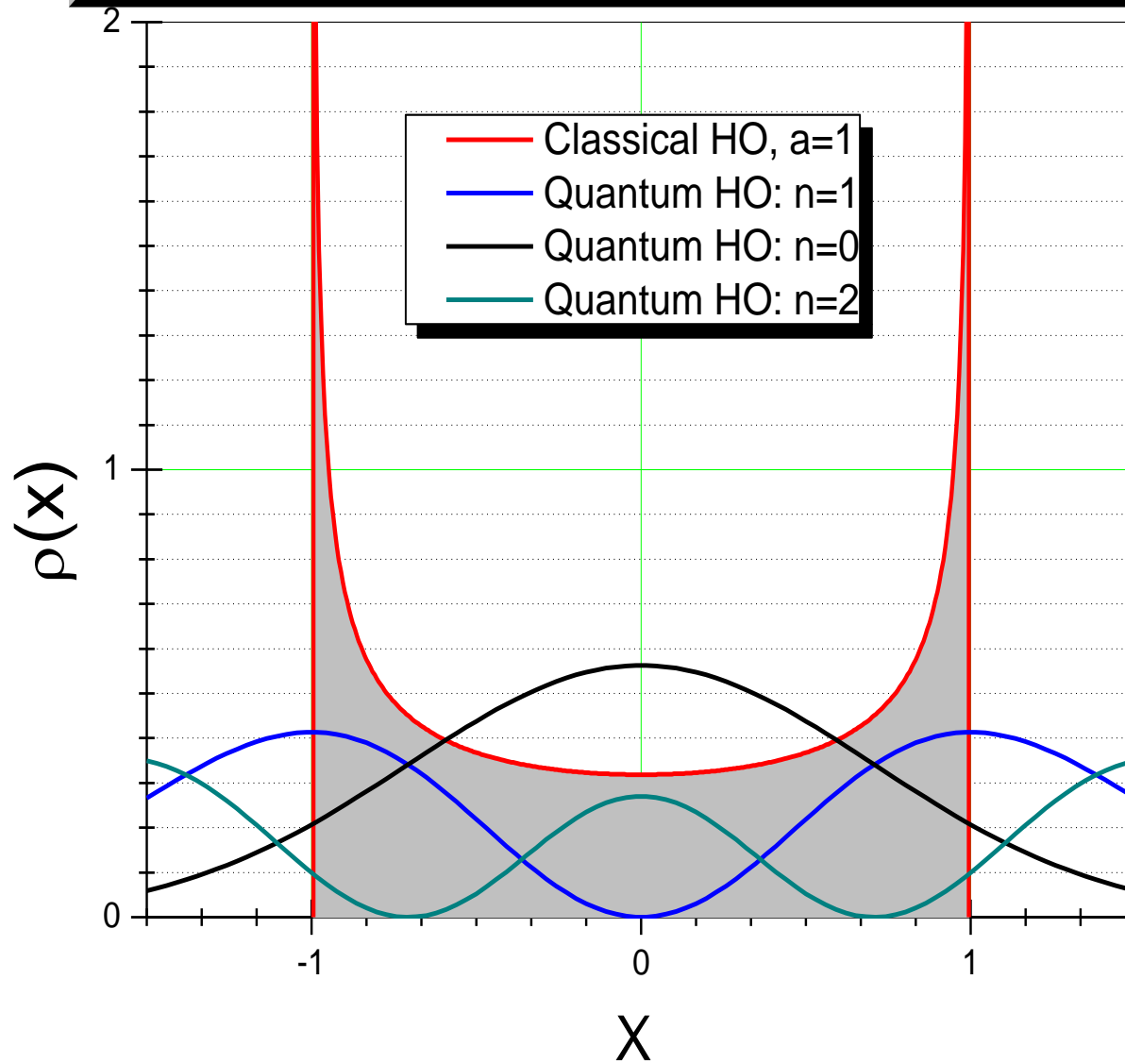
1. Исчезает расходимость плотности вероятности при $x \rightarrow \pm a$
2. Существует вероятность обнаружить частицу за пределами классически дозированной области движения $-a \leq x \leq a$
3. При $n \gg 1$ поведение $\rho_n(x) = |\psi_n(x)|^2$ приближается к «классическому», $\rho(x)$ (иллюстрация принципа соответствия Бора: при больших квантовых числах поведение системы приближается к классическому)

Графики (рис. ниже): нужно сравнить поведение

$$\rho(x) = \frac{1}{\pi a} \frac{1}{\sqrt{1 - x^2/a^2}} \quad \text{и} \quad \rho_n(x) = |\psi_n(x)|^2$$

для одинаковых энергий.

Probability Density: Classical vs Quantum Oscillator



Классический гармонический осциллятор:

Решения определяют k , m и полная энергия $E = ka^2/2$, или (эквивалентно) $\omega = \sqrt{k/m}$ и амплитуда колебаний a .

Квантовый гармонический осциллятор:

Решения определяют $\xi = x \cdot \sqrt{m\omega/\hbar}$ и целое число n .

Для $n \gg 1$ («Квазиклассический предел»)

$$E = ka^2/2 = \frac{m\omega^2 a^2}{2} \rightarrow \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \cong n \cdot \hbar\omega, \gg 1 \quad a \cong \sqrt{2n\hbar/m\omega}$$

Пакеты: Quantum @ Wave packets

Две задачи

1. Квантовые лестницы уровней для:

А) 2D КГО:
$$U(x, y) = \frac{k \cdot (x^2 + y^2)}{2}$$

Б) 3D КГО:
$$U(x, y, z) = \frac{k \cdot (x^2 + y^2 + z^2)}{2} = \frac{k \cdot r^2}{2}$$

(решения уравнения Шредингера)

2. Для 3D: сравнить квантовую лестницу уровней энергии с полученной (ПР-3) квантованием энергии электрона в атоме по Бору, для

$$U(r) = \frac{k \cdot r^2}{2}$$

ПЕРСОНАЛИИ: Erwin Schrödinger



Quantum Theory



In the 1920s, **Schrodinger** and other scientists abandoned the idea of precise orbits, and replaced it with a description of regions called orbitals. **Schrodinger's** theory is called the Quantum theory.

- **Although Bohr's model gives a qualitatively accurate description of atoms, it does not give quantitatively accurate results for atoms more complex than hydrogen.**
- **In order to describe such atoms, it is necessary to use quantum mechanics. In quantum mechanics, the electron orbits are replaced by probability distributions that only indicate in which regions of space each electron is most likely to be found.**
- **An equation first written by **Schrodinger** allows this distribution to be calculated for each atom. From the distribution, properties of the atom such as energy and angular momentum can be determined.**
- **Calculations of a wide variety of atomic phenomena have been carried out by means of quantum mechanics. Without exception, these calculations have proven to give an accurate description of the properties and behavior of atoms.**
- **For the simplest atoms, the observations and calculations sometimes agree to better than one part in a billion.**