§ Ур. Шрёдингера.

Основные положе-я квант. теории.

- Вывести нельзя
- Угадать (постулир) – можно.

На примере свободно движущ. частицы:

Пусть имеем свободно движ. частицу вдоль оси x с энерг. E и импульсом p:

Уравнение бег. волны:

$$\psi = A \cdot e^{-i(\omega t - kx)}$$

(замена) $\Rightarrow$

$$\omega \to \frac{E}{\hbar}$$

$$k \to \frac{p}{\hbar}$$

Уравнение волны для частицы:

$$\psi = A \cdot e^{-\frac{i}{\hbar}(Et - p\cdot x)}$$

Произв. по t и по x:

$$\psi = A \cdot e^{-\frac{i}{\hbar}(Et - px)}$$

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} \cdot E \cdot \psi \qquad \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = \left(\frac{i}{\hbar}\right)^2 \cdot p^2 \cdot \psi$$

$$\Rightarrow E = \frac{1}{\psi} \cdot i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} \qquad p^2 = -\frac{1}{\psi} \cdot \hbar^2 \cdot \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}$$

Класс. мех-ка:

Для свободной частицы: $E = \frac{p^2}{2m} \Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = i\hbar \cdot \frac{\partial \psi}{\partial t}$

если частица движется в силовом поле, характериз-м потенц. энергией $U(x)$: $\Rightarrow \frac{p^2}{2m} = E - U(x)$

$$\Rightarrow -\frac{1}{\psi} \cdot \frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = \frac{1}{\psi} \cdot i\hbar \cdot \frac{\partial \psi}{\partial t} - U(x)$$

$$\Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + U(x) \cdot \psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}$$

– ур. Шрёд. в одномерном случае

В общем случае: Шрёдингер (1926 г.)

$$i\hbar\frac{\partial\Psi(x,y,z,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\left[\frac{\partial^2\Psi(x,y,z,t)}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\Psi(x,y,z,t)}{\partial y^2}+\frac{\partial^2\Psi(x,y,z,t)}{\partial z^2}\right]+ \qquad (*)$$

$$+\,U(x,y,z,t)\cdot\Psi(x,y,z,t)$$

– ур. Шрёдингера

< временное ур. Шрёд. >

(*) или (**) – вершина Атомной физики.

или коротко:

$$(**)\quad i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\nabla^2\Psi + U\cdot\Psi$$

где: $\nabla^2 = \Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}$

$\Psi(x,y,z,t)$ – „волновая функция“

Пусть потенц. эн-я частицы не зависит от времени: $U(x,y,z)$

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

где: E – полн. эн-я частицы, кот. в стационарн. поле $U(x,y,z)$ остаётся постоянной

$$\Rightarrow \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\right)\cdot \cancel{e^{-i\frac{E}{\hbar}t}}\cdot \nabla^2\psi + U\cdot\psi\cdot \cancel{e^{-i\frac{E}{\hbar}t}} = i\hbar\cdot\left(-i\frac{E}{\hbar}\right)\cdot\psi\cdot \cancel{e^{-i\frac{E}{\hbar}t}}$$

$$\Downarrow$$

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

– ур. Шрёд. для стационарных состояний.

< стацион. ур. Шрёд. >

М. заметить, что:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\nabla^2\psi + U\cdot\psi = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U\right]\cdot\psi \equiv \hat{H}\psi$$

где: $\hat{H} \equiv -\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\nabla^2 + U(x,y,z)$ – закодированн. действие – оператор

Опр: Оператором $\hat{Q}$ наз. правило, посредством которого одной функции φ ставится в соответствие другая функция f

$$f = \hat{Q}\varphi$$

$\hat{Q}$ – символ. обознач. опер-ра

Опр: Оператор $\hat{Q}$ называется линейным, если для любых 2-х ф-ий φ_1 и φ_2 и для любых постоянных α_1 и α_2 выполняется условие:

$$\hat{Q}\left(\alpha_1 \cdot \varphi_1 + \alpha_2 \cdot \varphi_2\right) = \alpha_1 \cdot \hat{Q}\varphi_1 + \alpha_2 \cdot \hat{Q}\varphi_2$$

⇒ стацион. ур. Шрёдингера: $\hat{H}\Psi = E \cdot \Psi$

$\hat{H}$ – оператор Гамильтона <гамильтониан>