

УРАВНЕНИЕ ШРЕДИНГЕРА – ОСНОВНОЕ УРАВНЕНИЕ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

1. Волновое уравнение Шредингера (1926г)

Толкование волн де Бройля и соотношение неопределенностей Гейзенберга привели к выводу, что уравнением движения в квантовой механике, описывающей движение микрочастиц в различных силовых полях, должно быть уравнение, из которого бы вытекали наблюдаемые на опыте волновые свойства частиц. Основное уравнение должно быть уравнением относительно волновой функции $\Psi(x, y, z, t)$, т.к. именно величина $|\Psi|^2$ осуществляет вероятность пребывания частицы в момент времени t в объеме dV , т.е. в области с координатами x и $x+dx$, y и $y+dy$, z и $z+dz$. Т.к. искомое уравнение должно учитывать волновые свойства частиц, то оно должно быть волновым уравнением, подобно уравнению, описывающему электромагнитные волны.



Шредингер Эрвин (1887–1961) – австрийский физик-теоретик, один из создателей квантовой механики. Основные работы в области статистической физики, квантовой теории, квантовой механики, общей теории относительности, биофизики. Разработал теорию движения микрочастиц – волновую механику, построил квантовую теорию возмущений – приближенный метод в квантовой механике. За создание волновой механики удостоен Нобелевской премии.

Уравнение, удовлетворяющее перечисленным требованиям, было сформулировано в 1926 г. Э. Шредингером и называется уравнением Шредингера:

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

где $\hbar = \frac{h}{2\pi}$, m – масса частицы, ∇ – оператор Лапласа, который в декар-

товой системе координат имеет вид $\left(\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right)$, i – мнимая единица, $U(x, y, z, t)$ – потенциальная энергия частицы в силовом поле, в котором она движется, Ψ – искомая волновая функция. Данное уравнение является общим уравнением Шредингера. Его также называют временным (зависящим от времени) уравнением Шредингера. Решением данного дифференциального уравнения Шредингера является функция $\Psi(x, y, z, t)$, вид которой зависит от условия задачи.

Общее уравнение Шредингера справедливо для любой частицы (со спином, равным 0), движущейся со скоростью малой по сравнению со

скоростью света, т.е. со скоростью $v \ll c$. Оно дополняется условиями, накладываемыми на волновую функцию:

- 1) волновая функция должна быть конечной, однозначной и непрерывной;
- 2) производные $\frac{\partial \psi}{\partial x}$; $\frac{\partial \psi}{\partial y}$; $\frac{\partial \psi}{\partial z}$ должны быть непрерывны;
- 3) функция $|\psi|^2$ должна быть интегрируема; это условие в простейших случаях сводится к условию нормировки вероятностей.

В тех случаях, когда частица находится в стационарных потенциальных силовых полях (энергия $U=U(x,y,z)$ не зависит от времени), общее уравнение Шредингера можно упростить, исключив зависимость ψ от времени.

Рассмотрим случай, когда силовое поле, в котором движется частица стационарно, т.е. $U=U(x,y,z)$ не зависит от времени и имеет смысл потенциальной энергии. Тогда решение уравнения Шредингера может быть представлено в виде произведения двух функций, одна из которых зависит только от координат, другая – только от времени: $\psi(x, y, z, t) = \psi(x, y, z) \cdot \varphi(t)$.

Подставим решение, производя дифференцирование, в общее уравнение Шредингера, получим $-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi \cdot \varphi + U(x, y, z) \Psi \cdot \varphi = i\hbar \frac{\partial \varphi}{\partial t} \cdot \psi$.

Разделим полученное уравнение на $\psi \varphi$:
 $-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi \cdot \frac{1}{\psi} + U(x, y, z) = i\hbar \frac{\partial \varphi}{\partial t} \cdot \frac{1}{\varphi}$ или $\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi \cdot \frac{1}{\psi} - U(x, y, z) = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \varphi}{\partial t} \cdot \frac{1}{\varphi}$.

Поскольку левая часть уравнения есть функция координат, а правая – функция времени, то данное уравнение выполняется только в том случае, когда обе части уравнения равны постоянной величине. Обозначим ее $(-E)$.

$$\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi \cdot \frac{1}{\psi} - U(x, y, z) = -E \quad \text{и} \quad \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \varphi}{\partial t} \cdot \frac{1}{\varphi} = -E.$$

Тогда $\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi + (E - U)\psi = 0$ - **уравнение Шредингера для стационарных состояний (стационарное уравнение Шредингера)**. Решением этого уравнения является функция $\psi(x, y, z)$.

Данное уравнение является важнейшим уравнением квантовой механики. Функции ψ , удовлетворяющие данному уравнению Шредингера при данном значении U , называются **собственными функциями**. А значения E , при которых существуют решения уравнения Шредингера, называют **собственными значениями**.

Решая уравнение $\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \varphi}{\partial t} \cdot \frac{1}{\varphi} = -E$, найдем вид функции φ : приведем уравнение к виду $\frac{d\varphi}{d\varphi} = \left(-\frac{i}{\hbar}\right) E \cdot dt$. Уравнение можно проинтегрировать $\ln \varphi = \left(-\frac{i}{\hbar}\right) E \cdot t + \ln \varphi_0$ или $\varphi = \varphi_0 e^{-\frac{i}{\hbar} E t}$, где $\varphi_0 = \varphi(0)$ - значение $\varphi_0(t)$ в начальный момент времени $t=0$.

Тогда общее решение уравнения Шредингера имеет вид:

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

Таким образом, состояние частицы в данный момент времени описывается периодической функцией времени с частотой $\omega = \frac{E}{\hbar}$, определяемой полной энергией частицы. Связь энергии частицы с частотой волны де Бройля является важнейшей основой квантовой механики.

Для того, чтобы выяснить смысл E в стационарном уравнении Шредингера и указать путь, который может привести к стационарному уравнению Шредингера, сравним его с волновым уравнением.

Волновое уравнение имеет вид: $\Delta \xi - \frac{1}{v_{\text{фаз}}^2} \frac{\partial^2 \xi}{\partial t^2} = 0$, решением этого уравнения является функция вида $\xi = A(r) \cdot e^{i(\omega t - kr)}$, где $A(r)$ - комплексный вектор амплитуды волны. Продифференцируем дважды данное уравнение по времени, получим $\frac{\partial^2 \xi}{\partial t^2} = -\omega^2 \xi = -4\pi^2 \nu^2 \xi$. Подставим данное выражение в

волновое уравнение $\Delta \xi - \frac{1}{v_{\text{фаз}}^2} \frac{\partial^2 \xi}{\partial t^2} = 0$, получим $\Delta \xi + \frac{4\pi^2 \nu^2}{v_{\text{фаз}}^2} \xi = 0$. Учитывая, что $\frac{1}{\lambda} = \frac{\nu}{v_{\text{фаз}}}$, а по теории де Бройля $\lambda = \frac{h}{p}$, после небольших преобразова-

ний имеем $\Delta \xi + \frac{p^2}{\hbar^2} \xi = 0$, где $\hbar = \frac{h}{2\pi}$. Кинетическая энергия частицы $\frac{mv^2}{2} = \frac{p^2}{2m} = E - U$, где E - полная энергия, а U - потенциальная энергия.

Тогда $\frac{p^2}{\hbar^2} = \frac{2m}{\hbar^2} (E - U)$ и уравнение примет вид: $\Delta \xi + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U) \xi = 0$.

Таким образом, уравнение $\Delta \xi + \frac{4\pi^2 \nu^2}{v_{\text{фаз}}^2} \xi = 0$ тождественно стационарному уравнению Шредингера $\Delta \xi + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U) \xi = 0$, если E - полная энергия частицы, движущейся в данном поле и обладающая потенциальной энергией U .

Такой подход к истолкованию уравнения Шредингера не должен рассматриваться как его вывод, он лишь указывает на волновой характер этого уравнения. Еще раз подчеркнем, что уравнение Шредингера постулируется. Кроме того заметим, что представление полной энергии частицы в виде суммы кинетической и потенциальной энергий имеет в квантовой механике ограниченный характер.

Мы уже говорили о физическом смысле ψ функции. Для того, чтобы решение уравнения Шредингера описывало реальное поведение частиц, необходимо, исходя из физического смысла волновых функций, наложить на них следующие аналитические ограничения.

1. Волновые функции должны быть *однозначными* функциями координат и времени. В противном случае получим бессмыслицу: для одной и той же точки пространства будет две или больше вероятностей нахождения частицы.

2. Волновые функции должны быть *непрерывными*. Волновая функция – это аналог траектории в классической физике. Состояние квантовой системы во времени и пространстве должно изменяться непрерывно.

3. Волновые функции должны быть всюду *конечными* и удовлетворять *граничным условиям*. Это следует из требования конечности вероятности нахождения частицы в данной точке пространства.

Уравнение Шредингера имеет ряд особенностей. В соответствии с теорией дифференциальных уравнений, в зависимости от вида функции U будет иметь решение, удовлетворяющее указанным аналитическим ограничениям, либо при любых значениях E , либо при некоторых дискретных значениях E , либо в одной области при любых значениях E , а в других – при дискретных.

Те дискретные значения параметра E , при которых уравнение имеет решение, называются *собственными значениями*. Возможные значения энергии E образуют *энергетический спектр*.

Функция $\psi(r)$, являющаяся решением уравнения при данном значении параметра E , называется *собственной функцией*.

Из указанных особенностей уравнения Шредингера вытекают следующие следствия:

а. если частица движется в свободном пространстве, ее энергетический спектр непрерывный;

б. если же положение частицы в пространстве ограничено, например, электрон движется в атоме, то спектр дискретен, т.е. движение электрона квантуется.

Применение уравнения Шредингера к решению некоторых модельных задач

1. Свободная частица

Свободная частица – частица, движущаяся в отсутствие внешних полей. Пусть частица движется вдоль оси x . Потенциальная энергия $U(x) = 0$ (так как на свободную частицу силы не действуют), поэтому уравнение

Шредингера имеет вид: $\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E \cdot \psi(x) = 0$.

Решение этого уравнения имеет вид $\psi = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$, где A и B – некоторые постоянные, а $k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} E}$ – волновое число. Решение общего урав-

нения Шредингера получится в форме $\psi(x, y, z, t) = A \cdot e^{-i\left(\frac{E}{\hbar^2}t - kx\right)} + B \cdot e^{-i\left(\frac{E}{\hbar^2}t + kx\right)}$.

Решение представляет собой суперпозицию двух плоских монохроматических волн одинаковой частоты $\omega = \frac{E}{\hbar}$, распространяющихся одна в положительном направлении оси x с амплитудой A , другая в противоположном направлении с амплитудой B . Так как свободная частица движется вдоль оси x , то условию удовлетворяет решение $B=0$ (отраженной

волны нет): $\psi(x, y, z, t) = A \cdot e^{-i\left(\frac{E}{\hbar^2}t - kx\right)} = A \cdot e^{-i(\omega t - kx)}$.

Тогда решение стационарного уравнения примет вид $\psi(x) = A \cdot e^{ikx}$, где $A = const$, $k = \frac{2\pi}{\lambda} = const$ – волновое число, $i = \sqrt{-1}$ – мнимая единица.

Решение удовлетворяет уравнению, если энергия частицы имеет вид: $E = \frac{\hbar k^2}{2m} = \frac{p^2}{2m} = \frac{mv^2}{2}$, т.е. энергия свободной частицы совпадает с классической кинетической энергией и может меняться непрерывно от нуля до бесконечности.

Общее решение уравнения Шредингера для этого случая имеет вид: $\psi(x, t) = A \cdot e^{-i(\omega t - kx)}$. Эта функция представляет собой плоскую монохроматическую волну де Бройля. Вероятность обнаружения частицы в окрестности точки с координатой x $|\psi(x, t)|^2 = \psi(x, t) \cdot \psi^*(x, t) = A^2$ постоянна во всем пространстве, что можно интерпретировать, как движение частицы с постоянной скоростью.

2. Туннельный эффект

Туннельный эффект – проникновение частицы через потенциальный барьер, высота которого больше полной энергии частицы. Квантовая частица массой m , двигаясь вдоль оси x , встречает на своем пути потенциальный барьер, высота которого больше ее полной энергии $U_0 > E$. Возможность прохождения частицы сквозь потенциальный барьер, является

чисто квантовым эффектом, в основе которого лежит волновая природа свойств вещества. Проиллюстрируем основные закономерности этого явления на примере преодоления микрочастицей с энергией E прямоугольного потенциального барьера высотой $U_0 > E$, определяемого следующими соотношениями:

$$U(x) = \begin{cases} 0, & -\infty < x < 0, & (1 \text{ область}) \\ U_0, & 0 \leq x \leq d, & (2 \text{ область}) \\ 0, & d < x < \infty, & (3 \text{ область}) \end{cases}$$

В соответствии с законами классической механики при $E = \frac{m v^2}{2} < U_0$ частица в области 1 движется вдоль оси x равномерно и прямолинейно, а затем, отразившись от барьера в точке $x=0$, движется в обратном направлении с постоянной скоростью v .

Поведение квантовой частицы будет подчиняться уравнению Шредингера, которые для различных областей могут быть записаны:

$$\frac{d^2 \psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E \psi = 0 \quad (1 \text{ и } 3 \text{ области})$$

$$\frac{d^2 \psi}{dx^2} - \frac{2m}{\hbar^2} (U_0 - E) \psi = 0 \quad (2 \text{ область})$$

Общее решение в области 1, где $k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E > 0$, имеет вид суперпозиции падающей (e^{+ikx}) и отраженной (e^{-ikx}) плоских волн де Бройля (k - волновое число): $\psi_1 = A_1 \cdot e^{ikx} + B_1 \cdot e^{-ikx}$. Для области 3, уравнение примет вид $\psi_3 = A_3 \cdot e^{ik(x-d)} + B_3 \cdot e^{-ik(x-d)}$.

В области 2, где $0 < x < d$, куда неспособна проникнуть классическая частица, корни характеристического уравнения для дифференциального уравнения Шредингера для 2 области действительны и равны $\pm \eta$, где

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

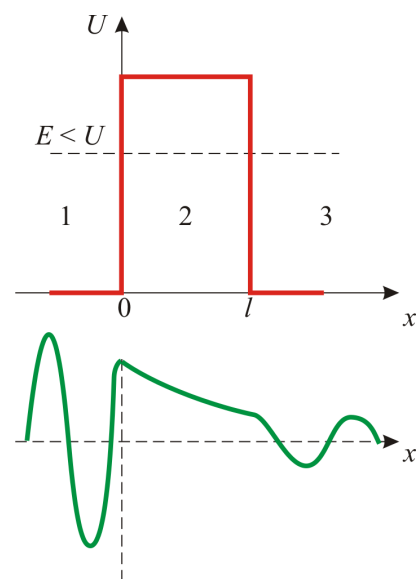
поэтому

$$\psi_2 = A_2 \cdot e^{-\eta x} + B_2 \cdot e^{\eta x}.$$

Постоянные интегрирования $A_1, B_1, A_2, B_2, A_3, B_3$ находятся из условия непрерывности волновой функции и ее производной на

границах барьера:
$$\begin{cases} \psi_1(0) = \psi_2(0) \\ \psi_1'(0) = \psi_2'(0) \\ \psi_2(l) = \psi_3(l) \\ \psi_2'(l) = \psi_3'(l) \end{cases}$$

Так как мы рассматриваем прохождение микрочастицы через барьер, то явлением отра-



жения от барьера не будем учитывать. Тогда обозначим амплитуду волны, падающей на барьер $A_1=A_0$ (амплитуда волны распространяющейся в области 1 вдоль оси x); амплитуда отраженной волны в области 1 $B_1=0$. Решение стационарного уравнения Шредингера тогда для области 1 принимает вид: $\psi_1 = A_0 \cdot e^{ikx}$, а решение общего уравнения $\psi_1(x, t) = A_0 \cdot e^{-i(\omega t - kx)}$.

В области 2 : $B_2=0$ (отражение от правой стороны барьера не учитываем), а $A_2=A_0$ на левой границе барьера, тогда $\psi_2 = A_0 \cdot e^{-\eta x}$, а решение общего уравнения для 2 области примет вид: $\psi_2(x, t) = A_0 e^{-\eta x} \cdot e^{-i(\omega t)}$. Как видно из уравнения – это колебания с убывающей по экспоненциальному закону амплитудой.

Для области 3: $B_3=0$ (отраженной волны нет), границы барьера достигают колебания с амплитудой $A_3 = A_0 \cdot e^{-\eta d}$, тогда решение стационарного уравнения Шредингера для области 3 имеет вид $\psi_3 = A_3 \cdot e^{ik(x-d)}$, а решение общего уравнения для этой области $\psi_3(x, t) = A_3 \cdot e^{-i(\omega t - k(x-d))}$.

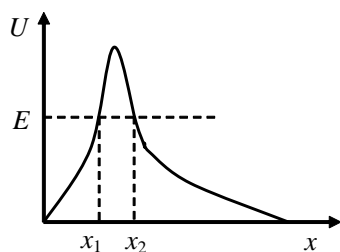
Амплитуда A_3 прошедшей волны меньше амплитуды A_0 падающей волны, что указывает на частичное поглощение и отражение волны на границах барьера.

Вероятность прохождения микрочастицы через барьер определяется коэффициентом прозрачности D , который для **прямоугольного барьера**

высотой U_0 и шириной d вычисляется по формуле: $D = \frac{|A_3|^2}{|A_0|^2} = e^{-\frac{2d}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)}}$.

Вероятность обнаружить частицу за барьером шириной d , равна $|\psi(x)|^2 = A_0^2 \cdot e^{-2\eta d}$. Таким образом, квантовая частица имеет вероятность проникнуть за барьер, непреодолимый для классической частицы.

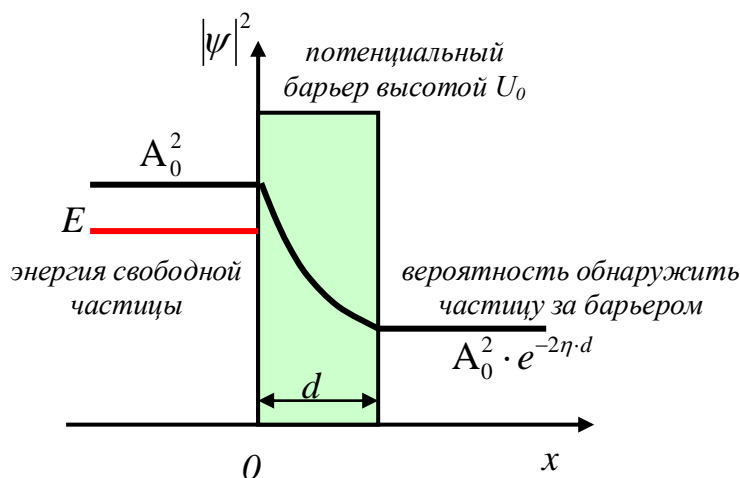
Для потенциального барьера произвольной формы, удовлетворяющей условиям квазиклассического приближения (достаточно гладкая форма кривой), имеем



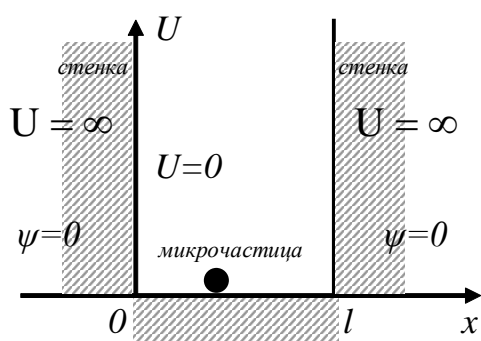
$D = D_0 \cdot \exp\left(-\frac{2}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m(U - E)} dx\right)$, где $U = U(x)$, x_1 и x_2 – координаты начала и конца потенциального барьера $U(x)$ для данного значения полной энергии E , D_0 – постоянный коэффициент, близкий к единице.

Туннельный эффект является специфическим квантовым эффектом. Прохождение частицы сквозь область, в которую, согласно законам классической механики, она не может проникнуть, можно пояснить соотношением неопределенностей. Неопределенность импульса Δp на отрезке

$\Delta x = l$ составляет $\Delta p > h/l$. Связанная с этим разбросом в значениях импульса кинетическая энергия $(\Delta p)^2/(2m)$ может оказаться достаточной для того, чтобы полная энергия частицы оказалась больше потенциальной.



3. Частица в «потенциальной яме» с бесконечно высокими стенками



Потенциальной ямой с бесконечно высокими стенками называется область пространства, в которой потенциальная энергия определена соотношениями:

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

l – ширина ямы; энергия U отсчитывается от дна ямы.

На рисунке показана зависимость потенциальной энергии микро-частицы U от его положения на оси x . На границах области $(0, l)$ потенциальная энергия скачком возрастает до бесконечности. Частица не выходит за пределы области $(0, l)$, находится как бы в ящике с идеально отражающими стенками. В одномерном случае $U=U(x)$ волновая функция $\psi = \psi(x)$, следовательно, уравнение Шредингера примет вид

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

Вероятность нахождения электрона в областях $x < 0$ и $x > l$ равна нулю, так что $\psi = 0$ в этих областях. Поэтому **граничные условия** для решения уравнения Шредингера таковы:

$$\psi(0) = \psi(l) = 0.$$

Внутри ящика частица движется свободно, но выйти за пределы его не может.

Запишем уравнение Шредингера для одномерного случая, учтем, что $U=0$ внутри ящика

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{8\pi^2m}{h^2} E \cdot \psi = 0.$$

Или $\frac{d^2\psi}{dx^2} + k^2\psi = 0$, где $k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E$.

Общее решение этого дифференциального уравнения имеет вид

$$\psi(x) = A \cdot \sin kx + B \cdot \cos kx.$$

Подставим в решение граничные условия.

1. Так как при $x=0$ волновая функция $\psi(x) = \psi(0) = 0$, то $B=0$. Тогда $\psi(x) = A \cdot \sin kx$.
2. Так как при $x=l$ волновая функция $\psi(x) = \psi(l) = 0$, то $\psi(x) = \psi(l) = A \cdot \sin kl = 0$ выполняется только при $kl = n\pi$, где $n=1,2,\dots$ - целые числа, т.е. необходимо, чтобы $k = \frac{n\pi}{l}$ принимало

значения кратные n .

Таким образом, решением уравнения Шредингера является волновая функция $\psi(x) = A \sin \frac{\pi n x}{l}$. Поскольку $k = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{n\pi}{l}$, то $l = \frac{n\lambda}{2}$ или $\lambda = \frac{2l}{n}$ - на ширине l потенциальной ямы должно укладываться целое число полу-волн де Бройля. Обратим внимание на то, что $n \neq 0$, иначе волновая функция $\psi(x)$ была бы тождественно равна нулю и плотность вероятности $|\psi|^2$ также была бы равна нулю.

Найдем энергию частицы в потенциальной яме: так как $k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E$, а

$k = \frac{n\pi}{l}$, то $E = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ml^2} n^2$ или $E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ml^2} n^2$ - стационарное уравнение Шредин-

гера, описывающее движение микрочастицы в «потенциально яме» с бесконечно высокими стенками удовлетворяется только при собственных значениях E_n энергии, зависящих от целого числа n . Следовательно, энергия E_n частицы в «потенциальной яме» с бесконечно высокими стенками принимает лишь *определенные дискретные значения, т.е. квантуется*.

Квантованные значения энергии E_n называются **уровнями энергии**, а число n , определяющее энергетические уровни частицы, называется **главным квантовым числом**. Заметим, энергия микрочастицы с мини-

малым значением n ($n=1$) равна $E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ml^2}$. Состояние микрочастицы с минимальным значением энергии **называется основным**.

Пример: для электрона в яме шириной 10^{-10} м $E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ml^2} = 37,3$ эВ.

Таким образом, решение уравнения Шредингера характеризуется наличием дискретного спектра разрешенных значений энергии E_n ($n=1,2,3,\dots$) квантовой частицы в бесконечно глубокой потенциальной яме. Другие значения энергии (кроме разрешенных) невозможны: вероятность обнаружить частицу внутри ямы с энергией, отличной от E_n равна нулю. Этот результат согласуется с гипотезой Планка о квантовании энергии и является характерным свойством уравнения Шредингера.

Итак, решая уравнение Шредингера для микрочастицы, находящейся в потенциальной яме с бесконечно высокими стенками $\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{8\pi^2m}{h^2} E \cdot \psi = 0$, получили решение $\psi(x) = A \sin \frac{\pi n x}{l}$, где A – некоторая постоянная. Для ее нахождения воспользуемся условием нормировки, которое в данном случае запишется следующим образом:

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

Вычислив интеграл, получим $A = \sqrt{\frac{2}{l}}$.

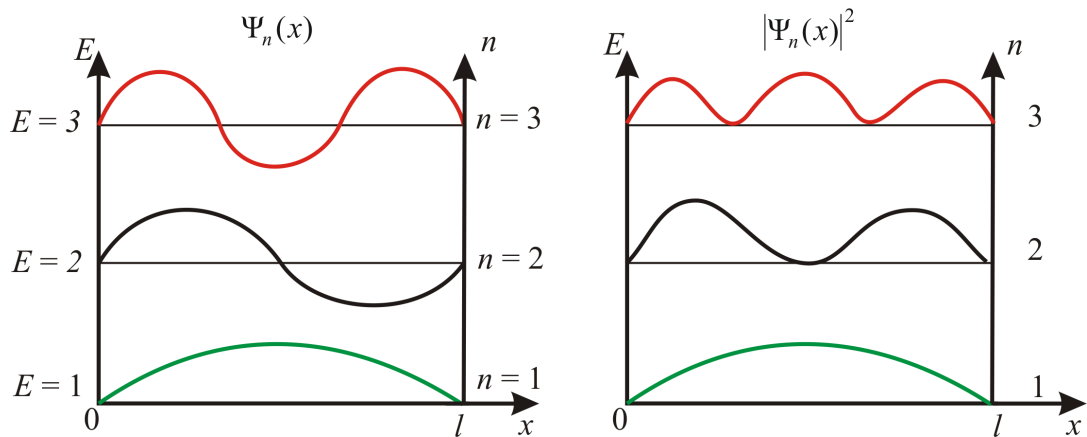
Таким образом, поведение микрочастицы в потенциальной яме определяется набором собственных функций $\psi_n(x)$ и собственных значений энергии E_n , а также волновых функций $\psi_n(x,t)$, имеющих вид уравнений стоячих волн:

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{l}} \sin \frac{n\pi}{l} x ; \quad E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ml^2} n^2 ; \quad \psi_n(x,t) = \sqrt{\frac{2}{l}} \cdot e^{-i\omega t} \cdot \sin \frac{n\pi}{l} x.$$

Нормированные собственные функции равны

$$\psi_n = \sqrt{\frac{2}{l}} \sin \frac{\pi n x}{l} \quad (n = 1, 2, 3, \dots)$$

График собственных функций ψ_n соответствующие уровням энергии при $n = 1, 2, 3$, приведены на рисунке.



По физическому смыслу квадрат модуля собственной функции – это плотность вероятности найти частицу в том или ином месте ящика при различных значениях ее энергии. На рисунке изображена плотность вероятности обнаружения частицы на различных расстояниях от «стенок» ямы: $|\Psi(x)|^2 = \Psi_n(x)\Psi_n^*(x)$ для $n = 1, 2, 3, \dots$. Как видно из рисунка, в низшем (основном) энергетическом состоянии (квантовое число $n=1$) с наибольшей вероятностью можно встретить частицу в середине ящика, вероятность найти ее у стенок равна нулю. В состоянии с $n=2$ частица не будет обнаружена в середине ящика, но одинаково часто бывает как в левой, так и в правой половине ящика. Такое положение частицы несовместимо с представлением о *траекториях*.

Очевидно, чем больше энергия частицы, тем ближе друг к другу располагаются максимумы кривой $|\psi_n|^2$. При $n \rightarrow \infty$ кривая будет близка к прямой, параллельной оси x . Вероятность обнаружить микрочастицу в любой части ямы величина постоянная. Такая частица ведет себя как свободная микрочастица.

Следует обратить внимание, что энергетический интервал между двумя соседними энергетическими уровнями зависит от n :

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

Например, для электрона при размерах ямы $l = 10^{-1}$ м (свободные электроны в металле) $\Delta E_n \approx 10^{-35} n$ Дж $\approx 10^{-16} n$ эВ, т.е. энергетические уровни расположены столь тесно, что спектр можно считать практически непрерывным. Если же размеры ямы соизмеримы с размерами атома ($l \approx 10^{-10}$ м), то для электрона $\Delta E_n \approx 10^{-17} n$ Дж $\approx 10^{-2} n$ эВ, т.е. получаются явно дискретные значения энергии (линейчатый спектр). Таким образом, применение уравнения Шредингера к частице в «потенциальной яме» с бесконечно высокими «стенками» приводит к **квантовым значениям**

энергии и координат, 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* $\frac{\pi^2 \hbar^2}{2ml^2}$. Наличие отличной от нуля минимальной энергии не случайно и вытекает из соотношения неопределенностей. Неопределенность координаты Δx частицы в яме шириной l равна: $\Delta x = l$. Тогда согласно соотношению неопределенностей, импульс не может иметь точное, в данном случае нулевое, значение. Неопределенность импульса

$$\Delta p \approx \frac{\hbar}{l}.$$

Такому разбросу значений импульса соответствует кинетическая энергия $E_{\min} \approx \frac{\Delta p^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2ml^2}$. Все остальные уровни имеют энергию, превышающую это значение, при больших квантовых числах ($n \gg 1$)

$$\frac{\Delta E_n}{E_n} \approx \frac{2}{n} \ll 1, \text{ т.е. соседние уровни расположены тесно: тем теснее, чем}$$

больше n . Если n очень велико, то можно говорить о *практически непрерывной последовательности уровней*, и характерная особенность квантовых процессов – *дискретность сглаживается*. Этот результат является частным случаем **принципа соответствия Бора**, согласно которому законы квантовой механики должны при больших значениях квантовых чисел переходить в законы классической физики.

Более общая трактовка **принципа соответствия**: *всякая новая, более общая теория, являющаяся развитием классической, не отвергает ее полностью, а включает в себя классическую теорию, указывая границы ее применимости*, причем в определенных предельных условиях новая теория переходит в старую.

4. Линейный гармонический осциллятор в квантовой механике

Линейный гармоническим осциллятор – система, совершающая одномерное движение под действием квазиупругой силы или гармоническим осциллятором называют частицу, совершающую одномерное движение под действием квазиупругой силы $\vec{F} = -k\vec{x}$.

Потенциальная энергия частицы

$$U = \frac{kx^2}{2}, \text{ или } U = \frac{m\omega_0^2 x^2}{2},$$

где $\omega_0 = \sqrt{\frac{k}{m}}$ - собственная частота колебаний осциллятора, m - масса частицы. Зависимость потенциальной энергии $U = U(x)$ имеет вид параболы, т.е. «потенциальная яма» в данном случае является параболической.

Рассмотрим классическую частицу, совершающую гармонические колебания (классический осциллятор). Характер движения определяется вторым законом Ньютона. Амплитуда малых колебаний классического осциллятора определяется его полной энергией E и начальными условиями, т.е. значениями x_0 и v_0 при $t=0$, которые в классической механике имеют одновременно вполне определенные значения ($0 \leq v_0 < \infty$, $-\infty < x < \infty$). Поэтому энергия $E = \frac{kA^2}{2}$ для классического осциллятора может принимать любые значения между нулем и бесконечностью. В точках с координатами $\pm x_{\max}$ полная энергия E равна потенциальной энергии. Поэтому с классической точки зрения частица не может выйти за пределы области $(-x_{\max}, +x_{\max})$. Такой выход означал бы, что ее потенциальная энергия больше полной, что для классической частицы противоречит закону сохранения энергии. Таким образом, классическая частица находится в потенциальной яме $-x_{\max} \leq x \leq +x_{\max}$ без права выхода из нее.

Квантовый гармонический осциллятор описывается уравнением Шредингера, учитывающим зависимость потенциальной энергии $U = U(x)$ для осциллятора.

Стационарное уравнение Шредингера для одномерного квантового осциллятора с энергией $U = \frac{m\omega_0^2 x^2}{2}$, имеет вид

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E - \frac{m\omega_0^2 x^2}{2} \right) \Psi = 0.$$

Трудности решения этого уравнения связаны со слагаемым, содержащим x^2 . Приведем выражения волновых функций, являющихся решениями уравнения.

Первые три волновых функции гармонического осциллятора выглядят так:

$$n = 0, \quad \psi_0(x) = \frac{1}{\sqrt{x_0} \sqrt{\pi}} \exp\left(-\frac{x^2}{2x_0^2}\right),$$

$$n = 1, \quad \psi_1(x) = \frac{1}{\sqrt{2x_0} \sqrt{\pi}} \frac{2x}{x_0} \exp\left(-\frac{x^2}{2x_0^2}\right),$$

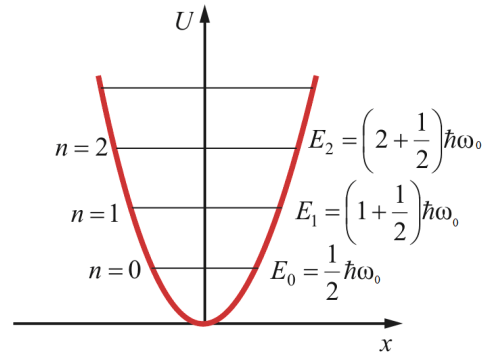
$$n = 2, \quad \psi_2(x) = \frac{1}{\sqrt{8x_0} \sqrt{\pi}} \left(\frac{4x^2}{x_0^2} - 2\right) \exp\left(-\frac{x^2}{2x_0^2}\right).$$

Здесь введено обозначение $x_0^2 = \hbar/(4\pi^2 m \nu)$.

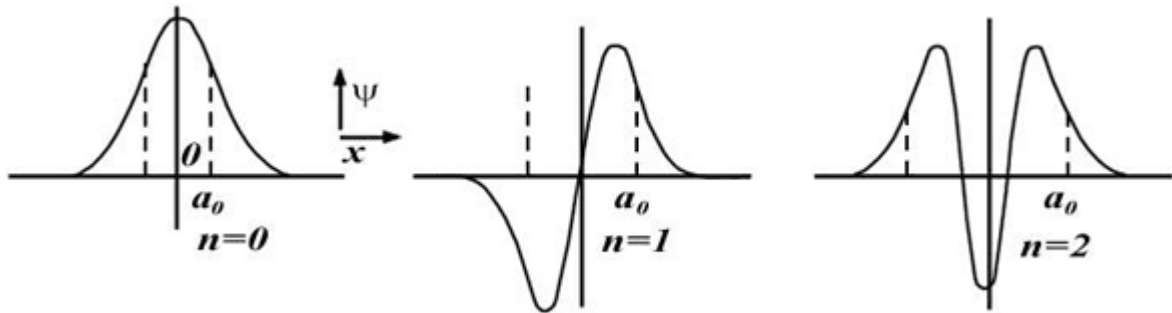
Анализ показывает, что, как и в случае с прямоугольной потенциальной ямой, волновые функции, являющиеся решением этого уравнения, будут непрерывными и конечными не при всех значениях энергии E , а лишь при *дискретном* наборе значений

$E = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega_0$, где $n=0,1,2,\dots$. Отметим, что

энергетические уровни гармонического осциллятора в отличие от случая прямоугольной потенциальной ямы расположены на одинаковом энергетическом расстоянии друг от друга $\Delta E = \hbar \omega_0$.

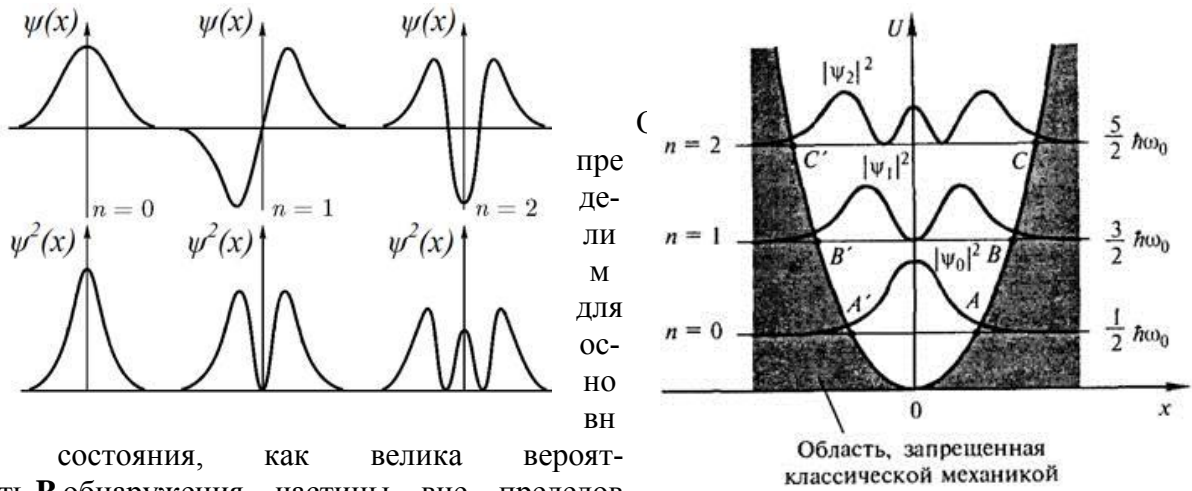


Графики волновых функций представлены на рисунке ниже.



Пунктиром на рисунках показаны границы, между которыми совершала бы колебания классическая частица. Значения a_0 (a_0 – координата точки поворота классической частицы в потенциальной яме, равная амплитуде колебаний) отличаются для разных n , так как от n зависит энергия E ($\sim E^{1/2}$). Очевидно, что при малых значениях квантового числа n плотность вероятности нахождения частицы, определяемая квадратом модуля волновой функции $\psi_0(x)^2$, кардинальным образом отличается от плотности вероятности обнаружения классического осциллятора: в основном состоянии максимальное значение вероятности приходится на центр, модуль волновой функции для всех квантовых чисел n имеет наибольшие значения между классическими точками поворота и экспоненциально убывающие "хвосты" вне этих точек.

На рисунке приведены графики волновых функций и графики плотности вероятности для различных квантовых состояний микрочастицы внутри потенциальной ямы.



пределами для основного состояния, как велика вероятность **P** обнаружения частицы вне пределов классической области, т.е. вне области $-a_0 < x < a_0$. Значение a_0 находится просто

$$\frac{\hbar k a_0^2}{2} = E_0 = \frac{1}{2} \hbar \nu, \quad a_0 = \sqrt{\frac{\hbar \nu}{k}} = \sqrt{\frac{\hbar}{2\pi \sqrt{km}}} = x_0.$$

Найдем сначала вероятность обнаружения частицы в классической области

$$P_{\text{кл}} = \int_{-a_0}^{a_0} |\psi_0(x)|^2 dx = \frac{1}{x_0 \sqrt{\pi}} \int_{-a_0}^{a_0} e^{-\frac{x^2}{x_0^2}} dx = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-1}^1 e^{-y^2} dy,$$

где $y = x/x_0$. Поскольку под интегралом находится четная функция переменной y , то

$$P_{\text{кл}} = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^1 e^{-y^2} dy.$$

Полученный интеграл называется интегралом вероятностей, значения его для различных значений верхнего предела имеются в таблицах. В нашем случае (интеграл от 0 до 1) $P_{\text{кл}} \approx 0.84$. Соответственно, вероятность того, что частица будет обнаружена вне классической области, равна $P = 1 - P_{\text{кл}} \approx 0.16$. Очень значительная величина!

Для сравнения рассчитаем вероятность нахождения классической частицы в потенциальной яме. С классической точки зрения амплитуда малых колебаний гармонического осциллятора определяется запасом его полной энергии E . В точках поворота кинетическая энергия осциллятора равна нулю и вся энергия переходит в потенциальную. Этим точкам соответствуют значения координат $x = \pm a$, где a – амплитуда колебаний классического осциллятора. За пределы области $(-a, +a)$ классическая частица выйти не может. Вероятность $p_{\text{кл}} dx$ того, что частица в течение времени dt находится на отрезке от x до $x+dx$ по классической механике выразится соотношением

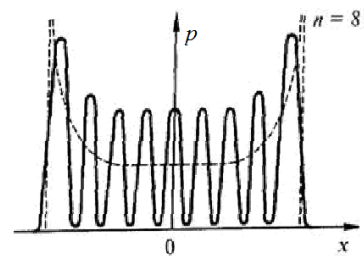
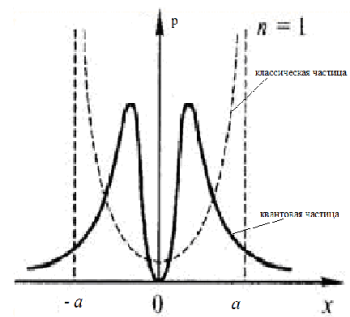
$$p_{\text{кл}} dx = \frac{dt}{T/2} = \frac{\omega_0 dx}{\pi v}, \quad \text{где } v \text{ – скорость частицы, совершающей гармонические колеба}$$

ния, например по закону $x = a \sin \omega_0 t$. Тогда $v = \frac{dx}{dt} = a \omega_0 \cos \omega_0 t = a \omega_0 \left[1 - \frac{x^2}{a^2} \right]^{1/2}$. Вероятность нахождения классической частицы внутри потенциальной ямы при $-a \leq x$

$\leq a$, равна $p_{кл} dx = \frac{1}{\pi a} \frac{dx}{\left(1 - \frac{x^2}{a^2}\right)^{1/2}}$. При приближении x к пре-

дельным точкам $\pm a$, ограничивающим область, в которой может быть классическая частица, плотность вероятности неограниченно возрастает. На приведенном рисунке график плотности вероятности классической частицы обозначен пунктирной линией, сплошной линией проведен график плотности вероятности квантовой частицы. Как видно из рисунка для квантовой частицы существует отличная от нуля плотность вероятности за пределами потенциальной ямы $-a < x < a$.

С увеличением n график плотности вероятности квантовой частицы меняется и все больше становится похожей на классическую кривую.



Итак, минимальная энергия $E_0 = \frac{1}{2} \hbar \omega_0$ называется нулевой энергией (обратим внимание, что минимальная энергия классического осциллятора равна 0), которая соответствует так называемым *нулевым колебаниям квантового осциллятора*. Таким образом, квантовый объект (микрочастица) не может находиться в состоянии аналогичном состоянию равновесия классической частицы (на дне ямы), что является следствием принципа

Таким образом, важной особенностью решения является наличие так называемых *нулевых колебаний* - колебаний с энергией, соответствующих значению квантового числа $n = 0$. Отличие от нуля минимальной энергии осциллятора характерно для всех квантовых систем и является следствием соотношения неопределенностей. В реальных квантовых системах, например, кристаллах, эти колебания сохраняются, как показывает опыт, даже при температурах, близких к абсолютному нулю, когда, казалось бы, все тепловое движение должно прекратиться. Опыты по рассеянию света кристаллами при низких температурах это подтверждают. Велика роль нулевых колебаний и в объяснении природы сил молекулярных взаимодействий (пример ниже) и других молекулярных явлений.

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. Для гармонического осциллятора оно выражено формулой

$$\Delta n = \pm 1.$$

Из $E = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega_0$ вытекает, что энергия квантового осциллятора изменяется только порциями, т.е. квантуется. Причем, как и в прямоугольной яме, энергия ограничена снизу минимальным значением:

$$E_0 = 1/2\hbar\omega_0$$

– *энергия нулевых колебаний*. Это означает, что частица не может находиться на дне потенциальной ямы.