# Уравнение Шредингера

*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 $\mathrm{d}V$, т.е. в области с координатами $x$ и $x+\mathrm{d}x$, $y$, и $y+\mathrm{d}y$, $z$ и $z+\mathrm{d}z$.

Т.к. искомое уравнение должно описывать волновые свойства частиц, то оно должно быть волновым уравнением, подобно уравнению, описывающему электромагнитные волны.

*Основное уравнение нерелятивистской квантовой механики сформулировано в 1926 г. Э.Шредингером*.

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.

x

*Уравнение Шредингера* не выводится, а *постулируется.*

Правильность этого уравнения подтверждается согласием с опытом получаемых с его помощью результатов, что в свою очередь, придает ему характер *закона природы*.

Уравнение Шредингера *в общем виде* записывается так:

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

где $\hbar = \dfrac{h}{2\pi}$ - постоянная Планка,

$\Delta$ – оператор Лапласа $\left(\Delta\Psi = \dfrac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + \dfrac{\partial^2\Psi}{\partial y^2} + \dfrac{\partial^2\Psi}{\partial z^2}\right)$,

$i$ – мнимая единица,

$U(x, y, z, t)$ – потенциальная функция частицы в силовом поле, в котором она движется,

$\Psi$ – искомая волновая функция.

$m$ – масса частицы.

Если силовое поле, в котором движется частица -- потенциальное, то *функция $U$ не зависит явно от времени* и называется потенциальной энергией.

В этом случае решение уравнения Шредингера распадается на два сомножителя, один из которых зависит только от координаты, а другой – только от времени.

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

Здесь $E$ – полная энергия частицы, которая в случае стационарного поля остается постоянной.

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

$$\boxed{\Downarrow}$$

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

$$\boxed{\Downarrow}$$

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}e^{-i(E/\hbar)t}\Delta\psi+U(x,y,z)\psi e^{-i(E/\hbar)t}=i\hbar(-iE/\hbar)\psi e^{-i(E/\hbar)t}}$$

$$\boxed{\Downarrow}$$

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

*Уравнение Шредингера для стационарных состояний*

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

*можно переписать в виде:*

$$\boxed{\hat{H}\psi = E\psi}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U = \hat{H}$$ – оператор Гамильтона

Гамильтониан является оператором энергии .

$$\boxed{\hat{H}\psi = E\psi}$$

- дифференциальное уравнение. В это уравнение в качестве параметра входит полная энергия Е частицы.

Такие уравнения имеют бесчисленное множество решений, из которых посредством наложения граничных условий отбирают решения, имеющие физический смысл. Для уравнения Шредингера такими условиями являются условия регулярности волновых функций: волновые функции должны быть конечными, однозначными и непрерывными вместе со своими первыми производными. Таким образом, реальный физический смысл имеют только такие решения, которые выражаются регулярными функциями.

В квантовой механике энергии и другим динамическим переменным сопоставляются *операторы*.

Соответственно рассматривают *операторы координат, импульса, момента импульса* и т.д.

# Движение свободной частицы

# Движение свободной частицы

***Свободная частица – частица, движущаяся в отсутствие внешних полей.***

Т.к. на свободную частицу (пусть она движется вдоль оси *x*) силы не действуют, то ***потенциальная энергия частицы*** равна нулю: ***(U=0)***

В таком случае ***уравнение Шредингера для стационарных состояний примет вид***

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

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

Прямой подстановкой можно убедиться в том, что ***решением*** этого ***уравнения*** является функция

$$\boxed{\psi(x)=Ae^{ikx}}$$

где *A*=const и *k*=const, с собственным значением энергии:

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

Из последнего выражения следует, что ***зависимость энергии от импульса*** оказывается ***обычной для нерелятивистских частиц:***

$$\boxed{p = \hbar k} \qquad \boxed{\Rightarrow} \qquad \boxed{E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{p_x^2}{2m}}$$

Следовательно, ***энергия свободной частицы может принимать любые значения*** (число $k$ может принимать любые значения), т.е. ее ***энергетический спектр является непрерывным***.

1). Таким образом, свободная частица описывается плоской монохроматической волной де Бройля:

$$\psi(x) = Ae^{ikx} \qquad \Psi(x) = \psi(x)e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$$

$$\Downarrow$$

$\boxed{\omega = E/\hbar}$ $\boxed{k = p_x/\hbar}$

$$\boxed{\Psi(x,t) = Ae^{-(i/\hbar)(Et-p_x x)} = Ae^{-i\omega t+ikx}}$$

2). $E = \dfrac{p_x^2}{2m} = \dfrac{(\hbar k)_x^2}{2m}$ *к* произвольное → *E* произвольное

***непрерывный спектр собственных значений (энергий)***

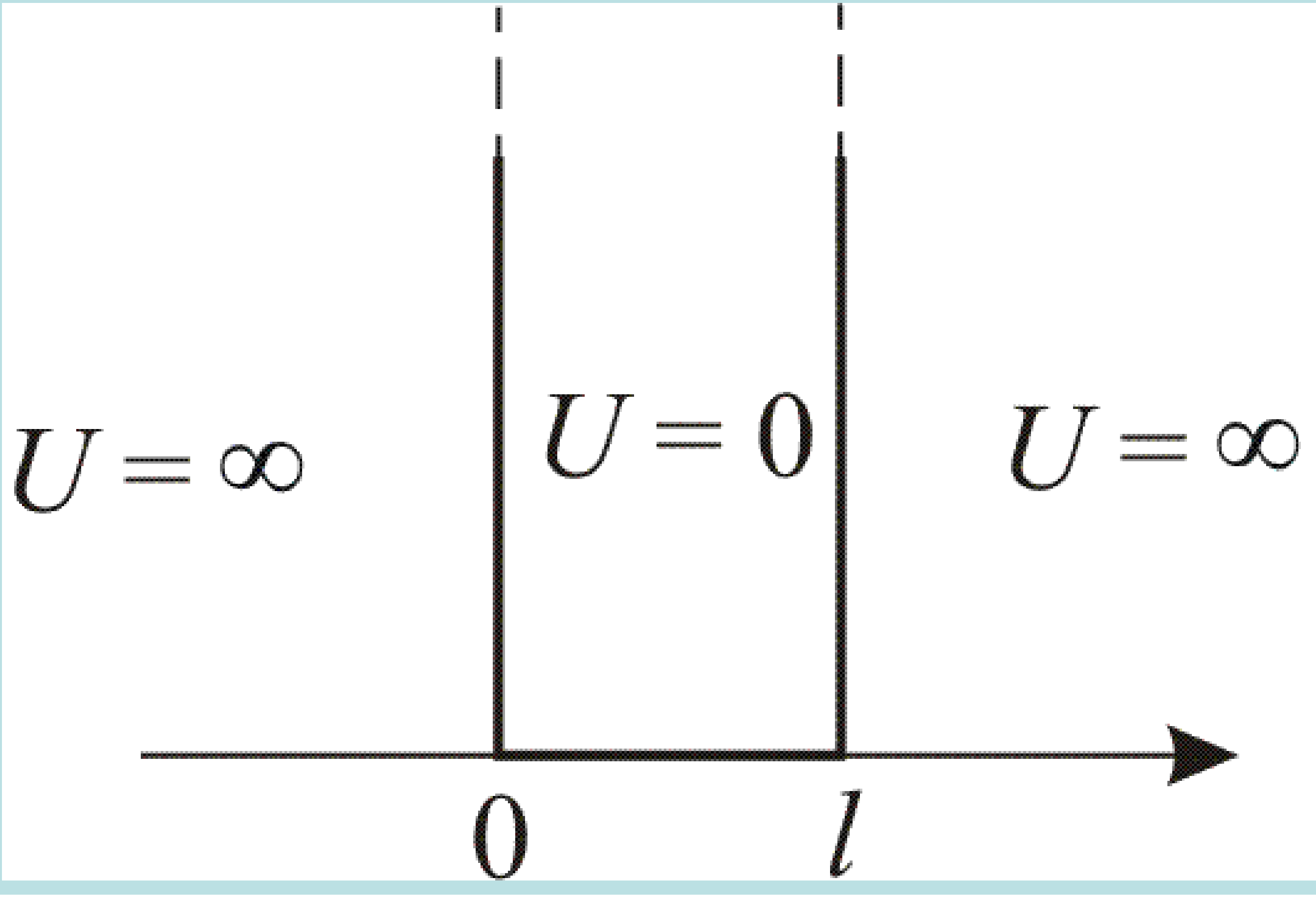
3). $\boxed{|\Psi|^2 = \Psi\Psi^* = |A|^2}$

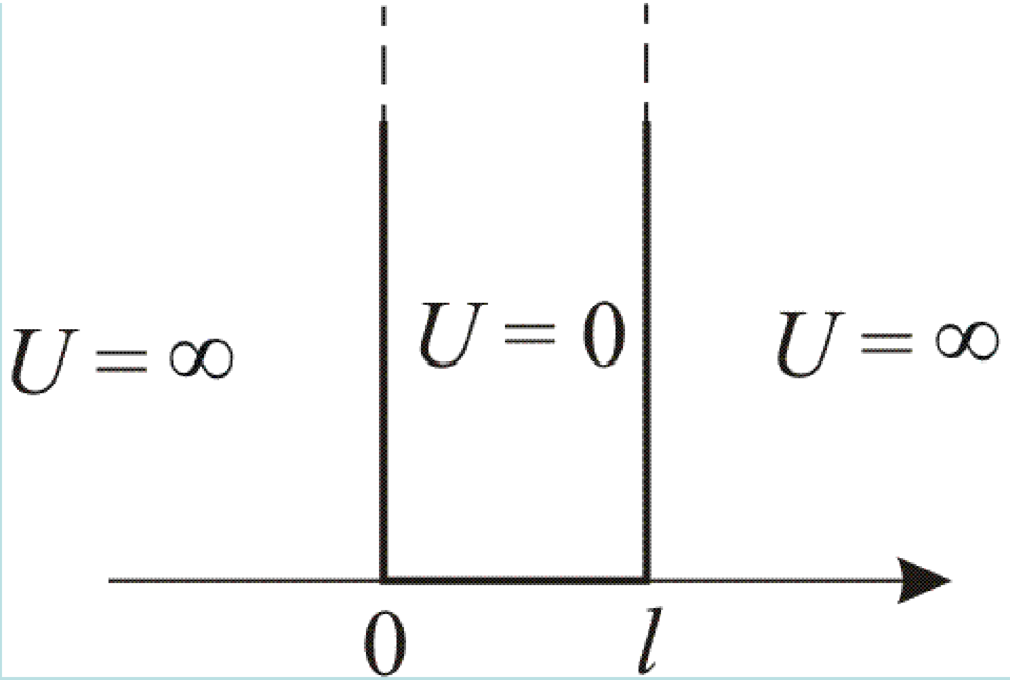
***все положения свободной частицы являются равновероятностными.***

# Частица в одномерной прямоугольной яме с бесконечными внешними «стенками»

# Частица в одномерной прямоугольной яме с бесконечно высокими внешними «стенками»

Проведем качественный анализ решений уравнения Шредингера, применительно к частице в яме с бесконечно высокими «стенками».






Такая яма описывается потенциальной энергией вида

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

где $l$ – ширина «ямы», а энергия отсчитывается от ее дна. (для простоты принимая, что частица движется вдоль оси *x*)

***Уравнение Шредингера для стационарных состояний***
в случае одномерной задачи запишется в виде:

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

***По условию задачи*** (бесконечно высокие «стенки»), ***частица не проникает за пределы «ямы», поэтому вероятность ее обнаружения,*** (а следовательно, и волновая функция) ***за пределами «ямы» равна нулю.***

На границах ямы волновая функция также должна обращаться в нуль. Следовательно, ***граничные условия*** в таком случае имеют вид

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

волновые функции должны быть конечными, однозначными и непрерывными вместе со своими первыми производными.

В пределах «ямы» ($0 \le \boldsymbol{x} \le \boldsymbol{l}$) уравнение Шредингера сведется к уравнению

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2}E = 0 \quad \Rightarrow \quad \boxed{\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + k^2\psi = 0,}$$

где $k^2 = \dfrac{2mE}{\hbar^2}.$

Общее решение этого дифференциального уравнения

$$\boxed{\psi(x) = A\sin kx}$$

Условие $\Psi(l) = A\sin kl = 0$ выполняется только при

$$\psi(0) = \psi(l) = 0 \quad \Rightarrow \quad \boxed{k = \frac{n\pi}{l}}$$

***Отсюда следует, что:***

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

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}.$$

где $n = 1, 2, 3\ldots$

Таким образом, стационарное уравнение Шредингера описывающее движение частицы в «потенциальной яме» с бесконечно высокими «стенками», удовлетворяется только при собственных значениях $E_n$, зависящих от целого числа $n$.

***Энергия $E_n$ частицы*** в «потенциальной яме» с бесконечно высокими «стенками» ***принимает лишь определенные дискретные значения, т.е.*** **квантуется**.

***Квантовые значения энергии*** $E_n$ ***называются уровнями энергии***, а ***число*** $n$***, определяющее энергетические уровни - главным квантовым числом.***

Таким образом, ***микрочастица*** в «потенциальной яме» с бесконечно высокими «стенками» ***может находиться только на определенных энергетических уровнях*** $E_n$, или, как говорят, частица ***находится в квантовом состоянии*** $n$***.***

$$\boxed{\psi(x) = A\sin kx} \qquad \boxed{k = \frac{n\pi}{l}}$$

$$\Downarrow$$

$$\Psi_n(x) = A\sin\frac{n\pi}{l}x.$$

Постоянную интегрирования *A* найдем ***из условия нормировки:***

$$A^2\int_0^l \sin^2\frac{\pi n}{l}x\mathrm{d}x = 1$$

В результате интегрирования получим $A = \sqrt{\dfrac{2}{l}}$

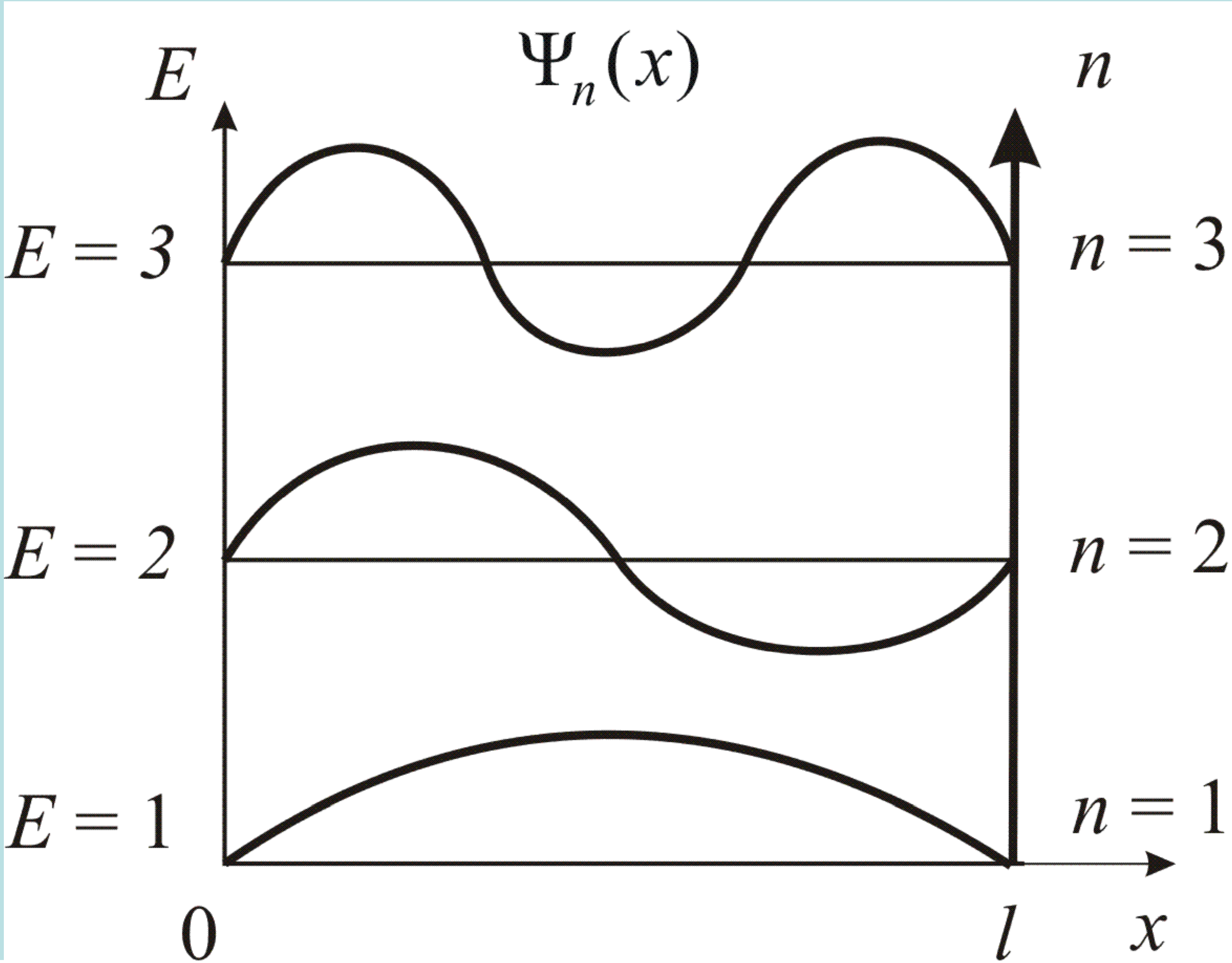
***Собственные функции будут иметь вид:***

$$\boxed{\Psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{l}}\sin\left(\frac{n\pi}{l}x\right)}$$ где $n = 1, 2, 3\ldots$ $$\boxed{E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ml^2}}$$

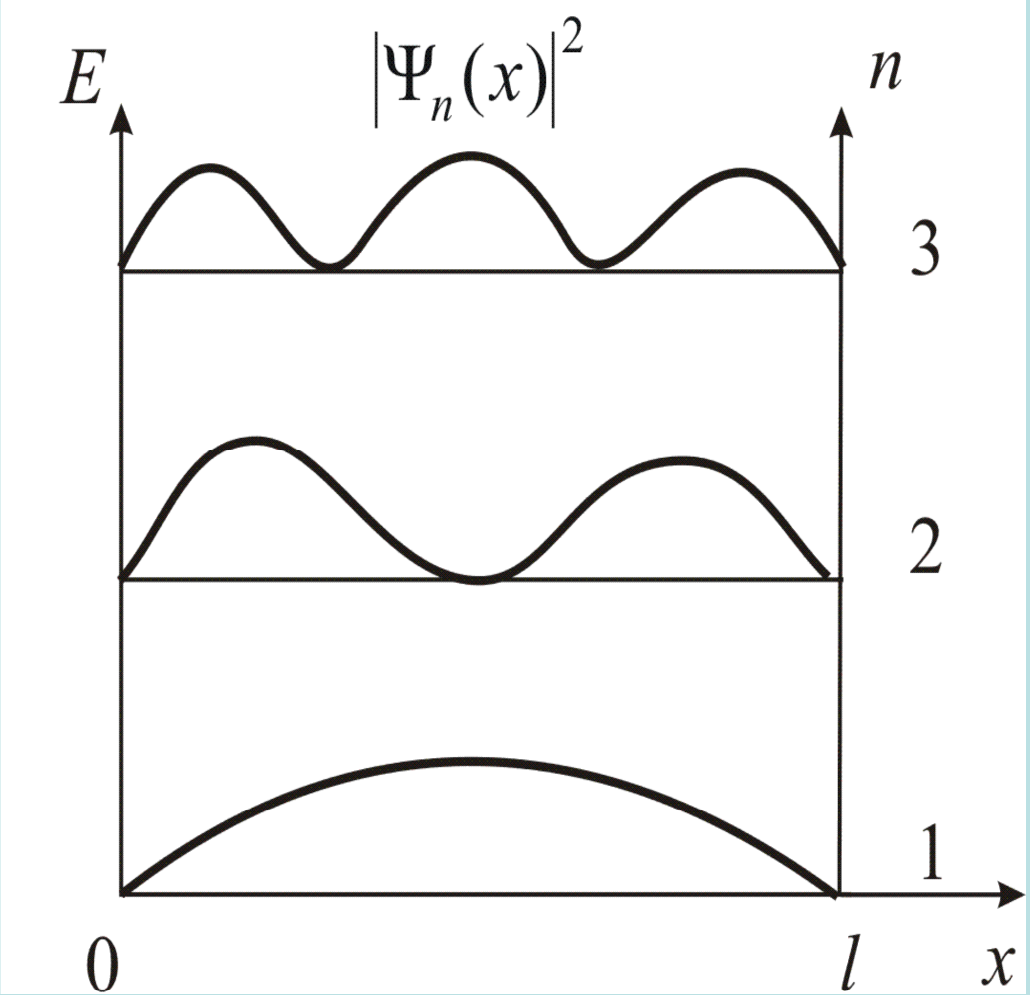
***Графики собственных функций***
соответствующие уровням энергии при

$$\Psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{l}}\sin\left(\frac{n\pi}{l}x\right)$$

$n = 1, 2, 3\ldots$



**Плотность вероятности** $|\Psi(x)|^2$ ***обнаружения частицы на различных расстояниях*** от «стенок» ямы для $n = 1, 2, 3$




***В квантовом состоянии с $n = 2$ частица не может находиться в центре ямы***, в то время как одинаково может пребывать в ее левой и правой частях.

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

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

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

Например, для электрона при размерах ямы $l = 10^{-1}$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 же 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 квантовым 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*** (***при n*=1**):

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

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

***Неопределенность координаты*** $\Delta x$ частицы в яме шириной $l$ равна $\boldsymbol{\Delta x = l}$.

Тогда согласно соотношению неопределенностей,

$$\Delta x \Delta p \geq \hbar$$

***импульс не может иметь точное***, в данном случае, ***нулевое***, значение. ***Неопределенность импульса:***

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

Такому разбросу значений импульса соответствует ***минимальная кинетическая энергия:***

$$\boxed{E_{\min} \approx \frac{\Delta p^2}{2m} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ml^2}}$$

Все остальные уровни имеют энергию, превышающую это значение

Из уравнений для энергии и разности соседних энергий следует, что ***при больших квантовых числах*** $n \gg 1$

$$\frac{\Delta E_n}{E_n} \approx \frac{2}{n} << 1$$

т.е. ***соседние уровни расположены тесно: тем теснее, чем больше п.***

Если *п* очень велико, то можно говорить о практически непрерывной последовательности уровней и характерная особенность квантовых процессов ***– дискретность – сглаживается.***

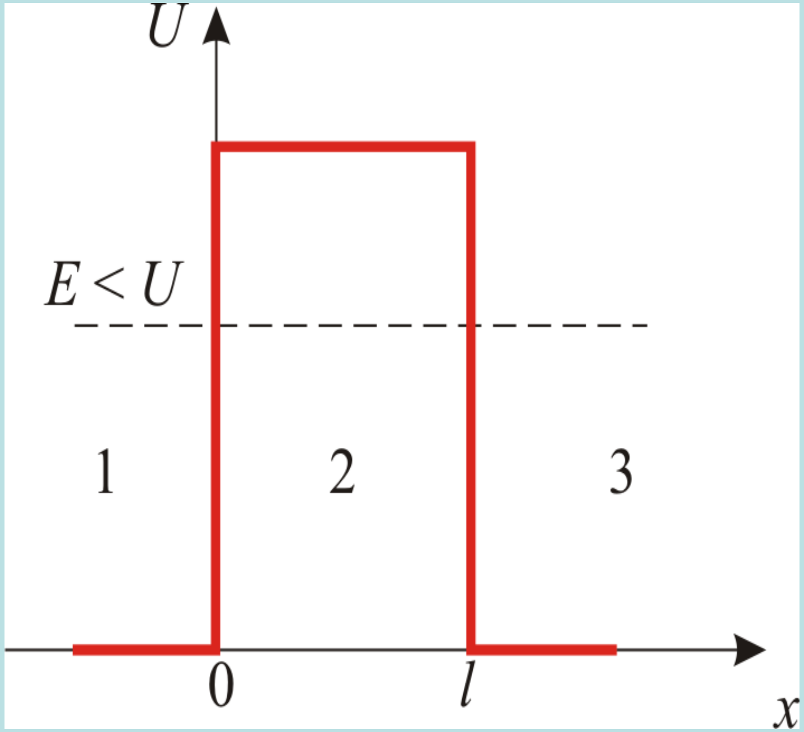
Этот результат является частным случаем ***принципа соответствия Бора*** (1923 г.) согласно которому законы квантовой механики должны при больших значениях квантовых чисел переходить в законы классической физики.

***Принцип 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.

# Прохождение частиц сквозь потенциальный барьер. Туннельный эффект

# Прохождение частиц сквозь потенциальный барьер. Туннельный эффект



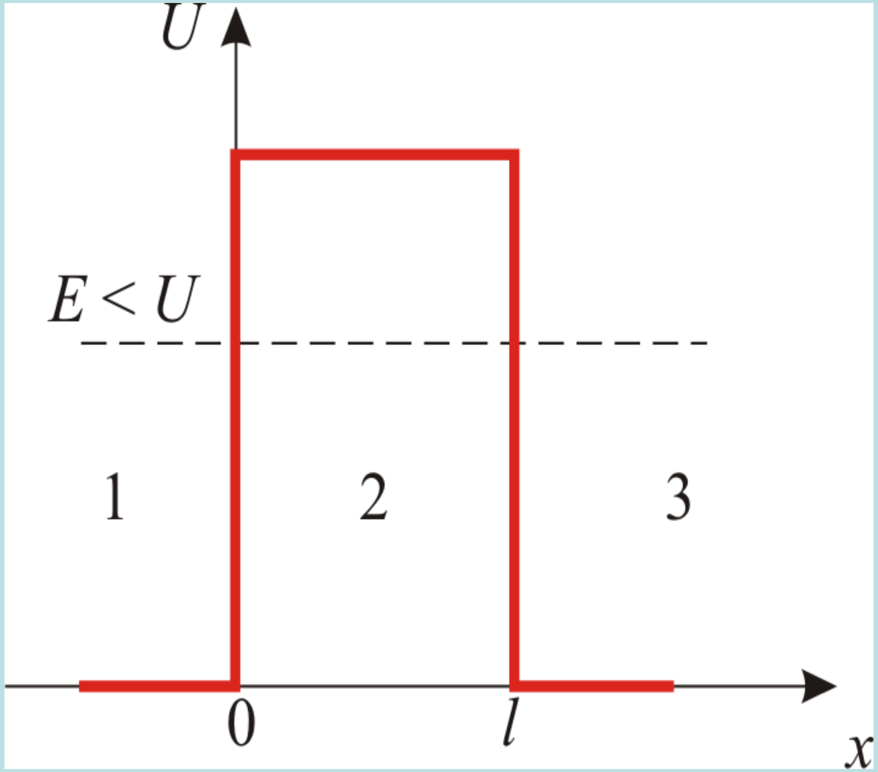

Рассмотрим простейший потенциальный барьер прямоугольной формы высоты $U$ и шириной $l$ для одномерного (по оси $x$) движения частицы.

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

При данных условиях задачи ***классическая частица,*** ***обладая энергией $E$:***

***либо беспрепятственно пройдет над барьером,***

***либо отразится от него*** $(E < U)$ и будет двигаться в обратную сторону, т.е. она не может проникнуть через барьер.




***Для микрочастицы*** же, 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** $\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+\frac{2m}{\hbar^2}(E-U)=0$ для состояний в каждой из выделенных областей имеет вид:

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

$$\frac{\partial^2\Psi_2}{\partial x^2}+q^2\Psi_2=0 \quad \left(для\, 2\, обл.\quad q^2=\frac{2m(E-U)}{\hbar^2}\right)$$

Общее решение этих дифференциальных уравнений

$$\Psi_1(x)=A_1e^{ikx}+B_1e^{-ikx} \quad (1)$$

$$\Psi_2(x)=A_2e^{iqx}+B_2e^{-iqx} \quad (2)$$

$$\Psi_3(x)=A_3e^{ikx}+B_3e^{-ikx} \quad (3)$$

Учитывая значение ***q*** и то, что $B_3 = 0$, 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

1). Область (1) : две плоские волны

$$\Psi_1(x,t) = \psi_1(x)e^{-i\frac{E}{\hbar}t} =$$

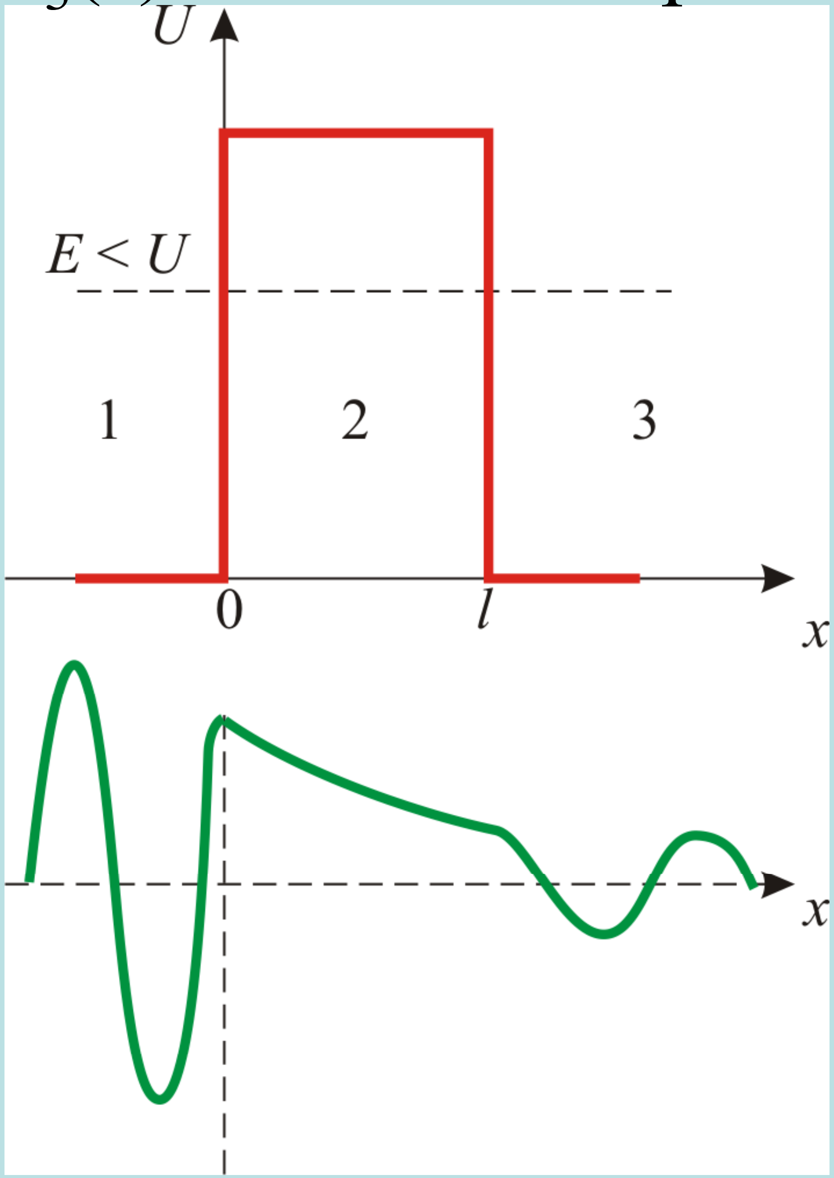
$$= A_1 e^{-(i/\hbar)(Et - p_x x)} + B_1 e^{-(i/\hbar)(Et + p_x x)}$$

1). Область (3) : $B_3 = 0$

$$\Psi_3(x,t) = A_3 e^{-(i/\hbar)(Et - p_x x)}$$

1). Область (2) : уже не волна

Качественный анализ функций $\Psi_1(x)$, $\Psi_2(x)$, $\Psi_3(x)$ показан на рис.




1. ***В области 1 плоская волна де Бройля.***

2. ***Волновая функция не равна нулю и внутри барьера,*** хотя уже не соответствует плоским волнам де Бройля

3. ***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.***

x

***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

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

x

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

$$\Delta x \Delta p \geq \hbar$$

Неопределенность импульса на отрезке $\Delta x = l$ составляет

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

Связанная с этим разбросом в значении импульса

***кинетическая энергия*** $\hat{E} = \dfrac{\Delta p^2}{2m}$

***может оказаться достаточной для того, чтобы полная энергия оказалась больше потенциальной***.

***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).

# Гармонический осциллятор

# Гармонический осциллятор

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

***Потенциальная энергия частицы***

$$U = kx^2/2$$

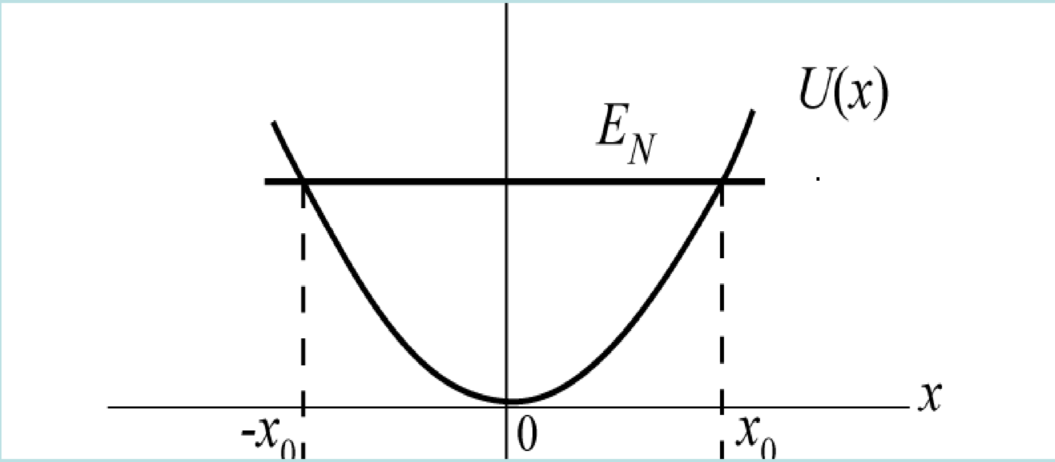
***или***

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

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:

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

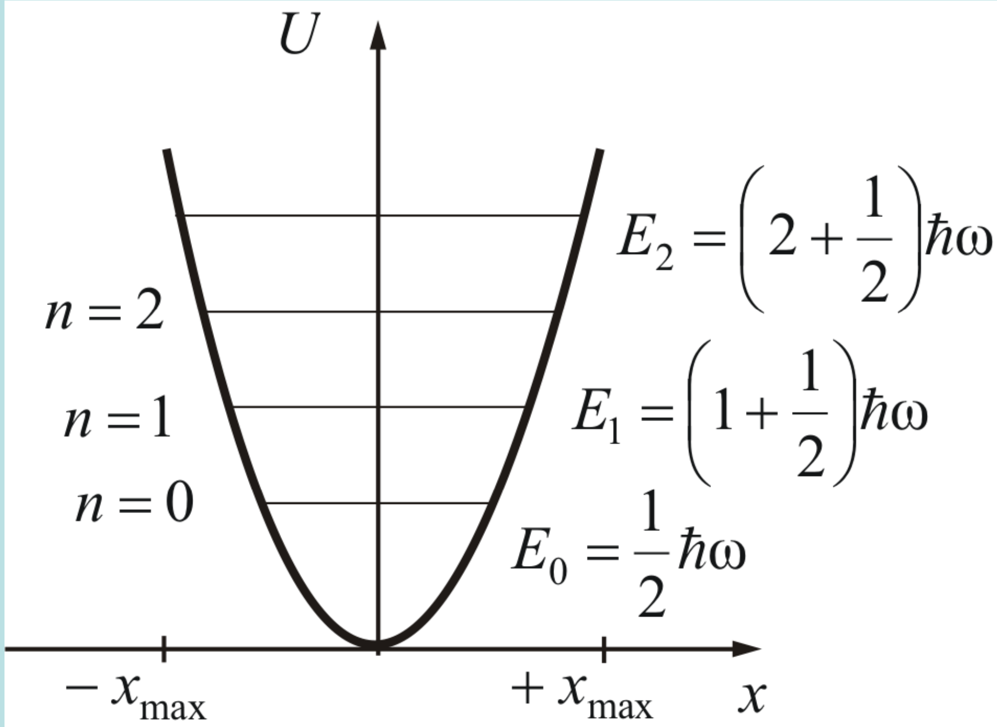
где $n = 0, 1, 2\ldots$

$$\Delta E_n = \hbar\omega$$

не зависит от $n$.

Минимальная энергия

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




**называется нулевой энергией**, т.е. **при** $T = 0$ **K колебания атомов в молекуле или кристаллической решетке не прекращаются.**

**Это означает что частица не может находиться на дне потенциальной ямы.**

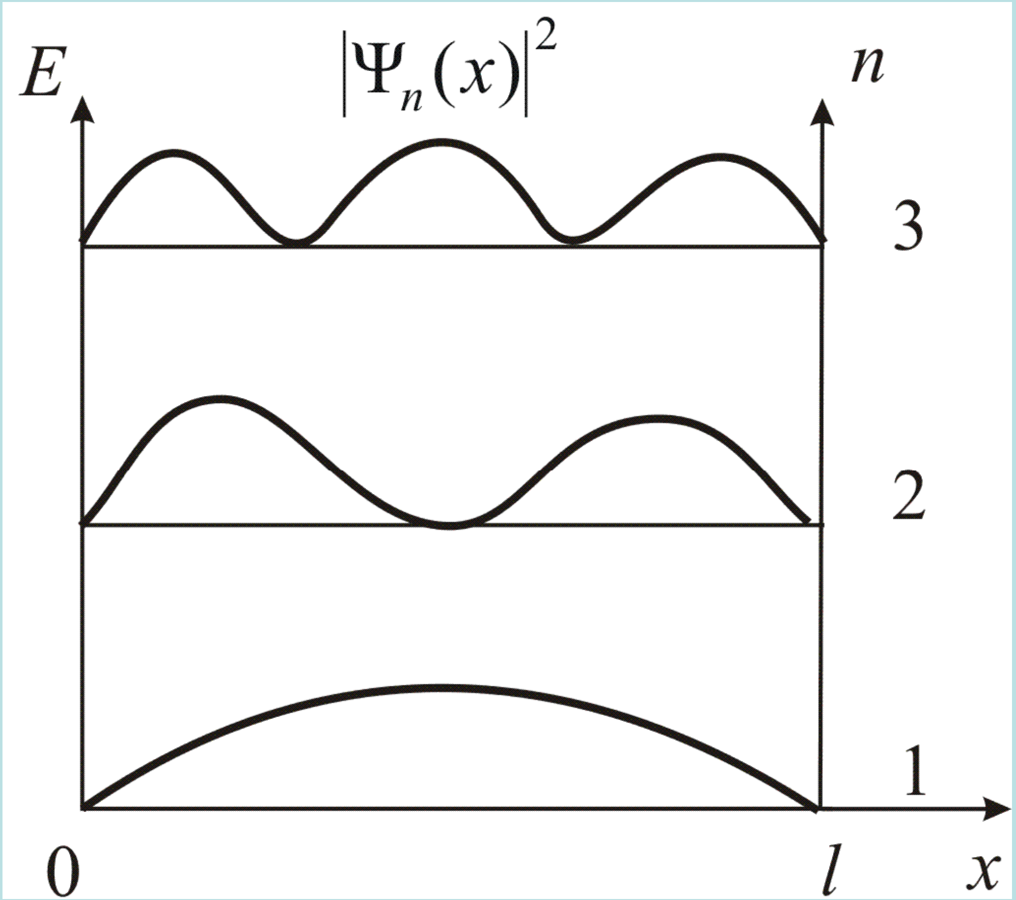
В квантовой механике вычисляется вероятность различных переходов квантовой системы из одного состояния в другое. Для гармонического осциллятора возможны лишь переходы между соседними уровнями.

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

$$\Delta n = \pm 1$$

Плотность вероятности нахождения частицы

$$|\Psi|^2 = \Psi \cdot \Psi^*$$



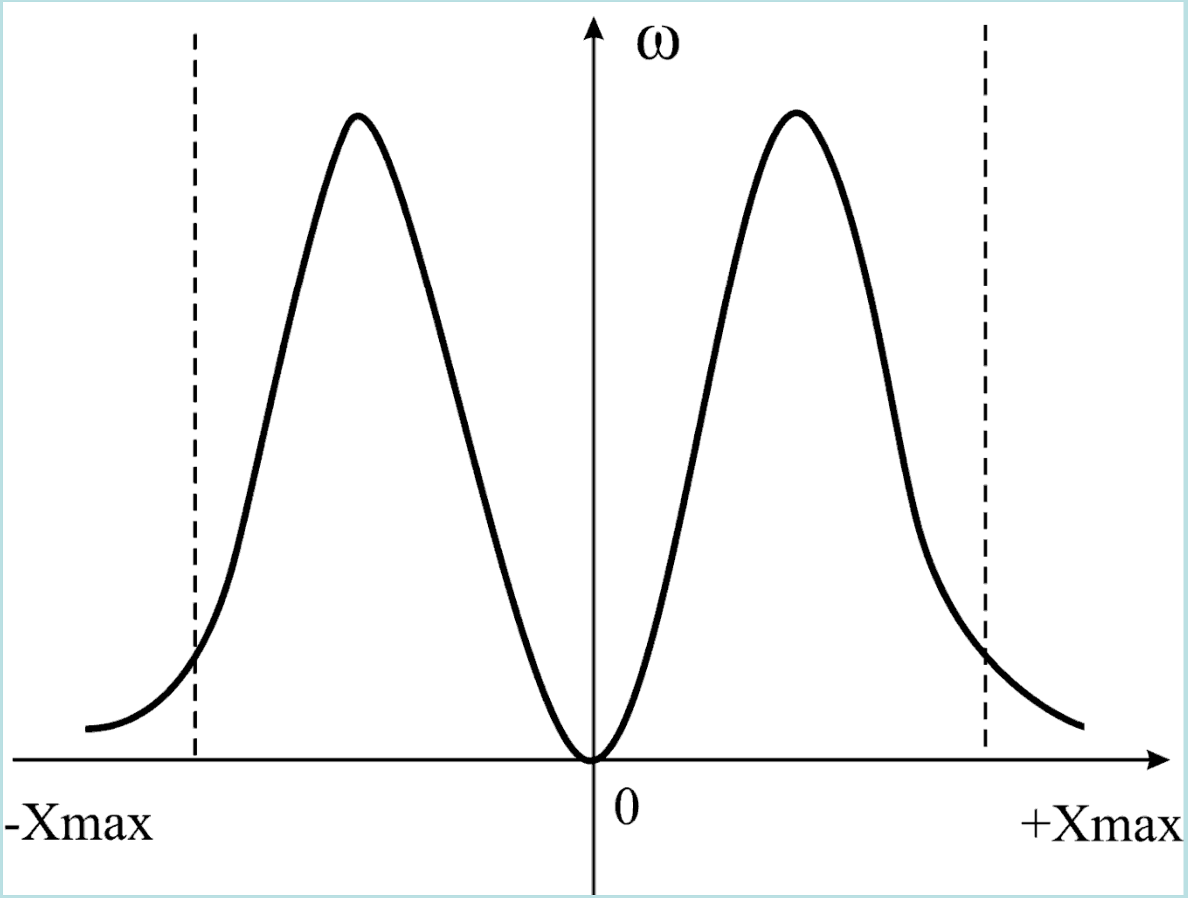

При $\boldsymbol{n = 2}$ в середине ямы частицы быть не может.

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

$$E_n = n\hbar\omega$$

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

Кроме того, ***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.



http://www.youtube.com/watch?v=P7n4tLA0azI