Волновая функция Уравнение Шредингера

Обнаружение волновых свойств микрочастиц[1]свидетельствовало о том, что классическая механика не может дать правильного описания поведения подобных частиц. Возникла необходимость создать механику микрочастиц, которая учитывала бы также и их волновые свойства. Новая механика, созданная Шредингером, Гайзенбергом, Дираком и другими, получила название волновой или квантовой механики. Основным уравнением квантовой механики является уравнение Шредингера. Подобно тому, как уравнения Максвелла или Ньютона не могут быть получены теоретически, а представляют собой обобщение большого числа опытных фактов, уравнение Шредингера также нельзя вывести из каких-либо известных ранее соотношений. Его следует рассматривать как исходное основное" предположение, справедливость которого доказывается тем обстоятельством, что все вытекающие из него следствия самым точным образом согласуются с опытными фактами.

Состояние микрочастицы описывается в квантовой механике так называемой волновой функцией, которую принято обозначать буквой Ψ. Она является функцией координат и времени и может быть найдена путем решения уравнения:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi + U\Psi = i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}. \qquad (28)$$

Это уравнение было установлено Шредингером в 1926 г. и называется временным уравнением Шредингера. Величины, входящие в это уравнение, имеют следующие значения:

i — мнимая единица;
$\hbar$ — постоянная Планка, деленная на 2π;
m — масса частицы;
Δ — оператор Лапласа $\left(\Delta\Psi = \frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\Psi}{\partial z^2}\right)$;
U — потенциальная энергия частицы.

Как следует из уравнения (28), вид волновой функции Ψ определяется потенциальной энергией U, т. е., в конечном счете, характером тех сил, которые действуют на частицу.

Квантовомеханическое описание движения микрочастиц носит вероятностный характер. Соотношение между волновой функцией Ψ и описываемой ею частицей аналогично соотношению между световой волной и фотоном, квадрат амплитуды световой волны определяет вероятность попадания фотона в соответствующую точку пространства. Точно так же квадрат модуля волновой функции для какой-либо точки пространства, будучи умножен на включающий в себя эту точку элемент объема dV, определяет вероятность dP того, что частица будет обнаружена в пределах объема dV:

$$A|\Psi|^2\,dV = dP, |\Psi|^2 = \Psi\Psi^* \;, \qquad (29)$$

где А – некоторый коэффициент, который определяется из условия нормировки:

$$A\int_V \Psi\Psi^* dV = 1 \qquad (30)$$

Вообще говоря, U есть функция координат и времени. Для стационарного (не меняющеюся со временем) силового поля U не зависит явно от времени. В последнем случае волновая функция Ψ распадается на два множителя, один из которых зависит только от времени, второй — только от координат:

$$\Psi(x, y, z, t) = e^{-i(E/\hbar)t}\psi(x, y, z) \;, \qquad (31)$$

где Е — полная энергия частицы.

В самом деле, подстановка функции (31) в уравнение (28) дает:

[1] Микрочастицами называют элементарные частицы (электроны, протоны, нейтроны и другие простые частицы), а также сложные частицы, образованные из элементарных частиц (молекулы, атомы, ядра атомов и т. д.).

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi e^{-i(E/\hbar)t}+U\psi e^{-i(E/\hbar)t}=i\hbar\left(-i\frac{E}{\hbar}\right)\psi e^{-i(E/\hbar)t}. \quad (32)$$

Сокращая все члены этого уравнения на общий множитель $e^{-i(E/\hbar)t}$ и произведя соответствующие преобразования, получим дифференциальное уравнение, определяющее функцию ψ:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi e^{-\frac{iE}{\hbar}t}+U\psi e^{-\frac{iE}{\hbar}t}=ih(-\frac{iE}{\hbar})\psi e^{-\frac{iE}{\hbar}t}, \quad (33)$$

Сокращая на общий множитель, получим

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi+U\psi=ih(-\frac{iE}{\hbar})\psi, \quad (34)$$

или

$$\Delta\psi e^{-\frac{iE}{\hbar}t}+\frac{2m}{\hbar^2}(E-U)\psi=0 \quad (35)$$

Уравнение (35) называется уравнением Шредингера для стационарных состояний. Оно применимо для решения широкого круга задач квантовой механики.

Специфической особенностью этого уравнения является то, что оно имеет решения не при любых значениях энергии Е, а лишь при определенных, называемых собственными значениями. Решения (функции ψ), соответствующие собственным значениям, называются собственными функциями задачи. Совокупность собственных значений образует спектр возможных значений энергии. Если собственные значения образуют непрерывную последовательность, спектр будет сплошным, а если дискретную - дискретным.

Применение уравнения Шредингера для расчета поведения различных микросистем (атомов, молекул, кристаллических ячеек, и т.д.) с неизбежностью приводит к квантованию энергии. Т.е. решение существует только в том случае, когда энергия системы принимает ряд определенных (фиксированных значений).