Мы рассматриваем проблему корпускулярно-волнового дуализма, проявляемого частицами. Помимо Боровской теории появилась еще и теория Де Бройля, которые стыкуются между собой: на боровской орбите укладывается целое число волн Де Бройля. Волны Де Бройля – математическая волны. Для описания парадоксального поведения частицы необходимо разработать математическую теорию, адекватную такому поведению частиц.

Необходимо:

1) Выбрать величину, характеризующую состояние частицы в пространстве.
2) Уравнение, описывающее движение частицы.
3) Величины, которые можно измерять.

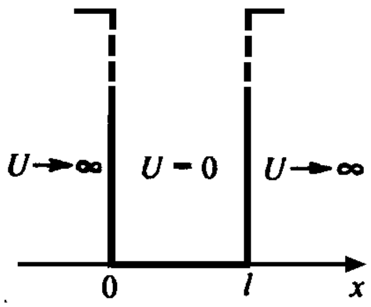
У нас имеется:

1) Состояние частицы описывается волновой функцией.
2) Волновая функция характеризует распределение вероятности обнаружить частицу в определенной точке.
3) Распределение вероятности формируется при большом количестве частиц и распределение вероятности аналогично распределению интенсивности волны.

$I \sim A^2$ – физический смысл имеет квадрат волновой функции $|\psi^2| = \psi * \bar{\psi} = \rho$ – плотность распределения вероятности и $\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi^2|\, dV = 1$, так как частица реальна.

Свойства волновой функции

1) Волновая функция конечна.
2) **Волновая функция непрерывна.**
3) Волновая функция однозначна.
4) **Волновая функция должна быть гладкой, даже если поле испытывает разрыв. Функция не может иметь скачков.**
5) **Принцип суперпозиции – если частица может находиться в состояниях $\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_n$, то она может находиться в состоянии $\psi = c_1\psi_1 + c_2\psi_2 + \dots + c_n\psi_n$; $\psi = \sum_{i=1}^{n} c_i\psi_i$, т.е. в состоянии, которое является линейной комбинацией $\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_n$.**
6) **Уравнение Шредингера – связывает волновую функцию с силовой ситуацией частицы. $i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + U(r)\psi$, где $\Delta = \nabla^2 = \frac{d^2}{dx^2}$, $U(R)$ – потенциальный рельеф, соответствующий ситуации, в которой находится частица. Если частица свободна, то $U(r) = 0$.** Потенциальная яма и потенциальный барьер изображены на рисунках. Примером потенциального барьера служит электрон на глубоких уровнях в атоме.



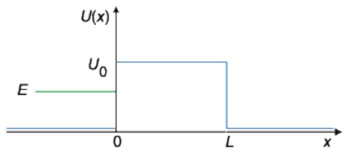


Рис.10.1.1. Прямоугольный потенциальный барьер.

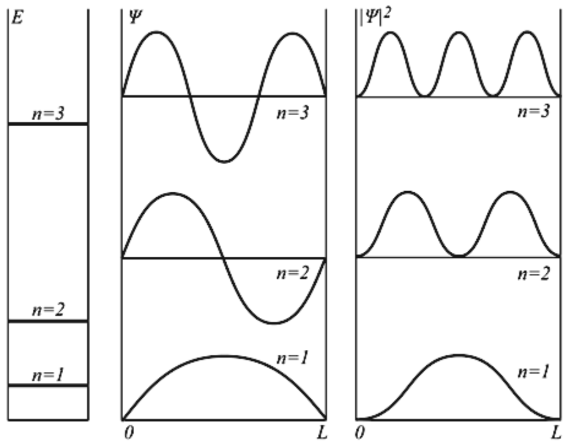
Стационарное уравнение Шредингера

Запишем волновую функцию в виде $\psi(r,t) = \varphi(r)e^{i\omega t}$. В стационарном виде нас интересует только координатная ее часть. **В стационарном виде уравнение Шредингера принимает вид $\widehat{H}\psi = E\psi$, где E – полная энергия.** $\widehat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U(r) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U(r)$ – оператор полной энергии (гамильтониан). Решением данного уравнения является волновая функция ψ_n, которая представляет собой собственную функцию оператора Гамильтона. $\boldsymbol{E}$ **в уравнении – полная энергия частицы в состоянии $\boldsymbol{\psi_n}$, $\boldsymbol{\psi_n}$ – собственное значение оператора Гамильтона, описывающее положение частицы.**

В квантовой механике осуществляется вероятностный подход к описанию состояния частицы, значение физической величины (энергии, координаты) может быть только средним. Это среднее значение можно найти, используя оператор физической величины $< E >= \int_{-\infty}^{+\infty} \psi \,\widehat{\widehat{H}}\, \bar{\psi} dV$.

Операторы связывают величины, описывающие состояние частицы с средним значением физической величины, которое можно измерить.

Пример: частица в бесконечно глубокой потенциальной яме $0 < x < l$. Внутри ямы можно использовать стационарное уравнение Шредингера $\widehat{\widehat{H}}\,\psi = E\psi$. $\widehat{\widehat{H}} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U(r) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2$. Подставив, получим $-\frac{\hbar^2}{2m}\psi'' = E\psi$. Получили дифференциальное уравнение. Его характеристическим уравнением будет $k^2 + \frac{2mE}{\hbar^2} = 0$. Отсюда $k = \pm i|k|$. Общее решение имеет вид $\psi = c_1 \cos kx + c_2 \sin kx$. Для нахождения c_1 и c_2 используем граничные условия: $\psi(0) = 0 = \psi(l)$. Вне ямы волновая функция должна быть равна нулю, в яме не ноль. Получаем $c_1 = 0, \psi(l) = c_2 \sin kl = 0$, откуда $k = \frac{n\pi}{l}$, т.е. $\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} = \frac{n\pi}{l}$, откуда **получаем выражение энергии $\boldsymbol{E_n = \frac{\pi\hbar^2 n^2}{2ml^2}}$.** Таким образом, если частица находится в бесконечно глубокой потенциальной яме, то ее энергия принимает дискретный спектр значений, или существуют энергетические уровни. **Вывод: теория Шредингера подтвердила энергетические уровни**. У свободной частицы энергетический спектр сплошной.



Волновая функция имеет вид $\psi = c_2 \sin\frac{\pi n x}{l}$. Чтобы найти c_2, используем условия нормировки. $\int_0^l c_2^2 \sin^2\frac{\pi n x}{l} dx = 1$, откуда получим $c_2 = \sqrt{\frac{2}{l}}$ и $\psi_n = \sqrt{\frac{2}{l}} \sin\frac{\pi n x}{l}$.

Состояние $n = 1$ является обычным состоянием. $E_1 = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ml^2}$. Состояние при $n > 1$ является возбужденным. Для определения вероятности нахождения частицы в каком-либо состоянии на каком-то отрезке, можно как брать интеграл $\int_a^b \left(\sqrt{\frac{2}{l}} \sin\frac{\pi n x}{l}\right)^2 dx = \frac{2}{l}\left(\frac{x}{2} - \frac{l\sin\left(\frac{2\pi x}{l}\right)}{4\pi}\right)\Bigg|_a^b$, так и посмотреть площадь фигуры на графике квадрата волновой функции. Например, вероятность нахождения при $n = 2$ от $l = 0$ до $l = \frac{l}{4}$ равна $\frac{1}{4}$.

Для определения вероятности прохождения частицы через потенциальный барьер используется коэффициент прохождения, где U – потенциал барьера, E – энергия частиц, l – ширина барьера.

$$D = D_0 \exp\left(-\frac{2}{\hbar}\sqrt{2m(U-E)}l\right)$$