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:

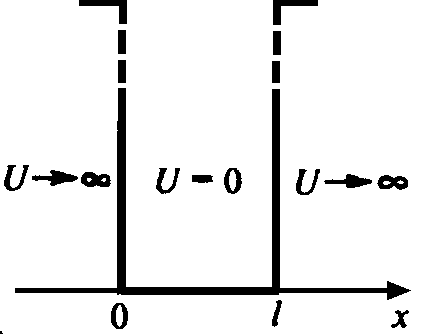
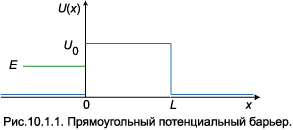
1. Выбрать величину, характеризующую состояние частицы в пространстве.
2. Уравнение, описывающее движение частицы.
3. Величины, которые можно измерять.

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.

– физический смысл имеет квадрат волновой функции – плотность распределения вероятности и , так как частица реальна.

# Свойства волновой функции

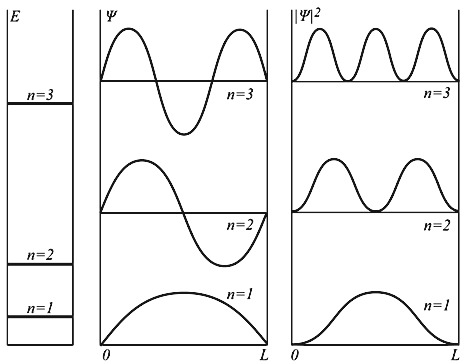
1. Волновая функция конечна.
2. **Волновая функция непрерывна.**
3. Волновая функция однозначна.
4. **Волновая функция должна быть гладкой, даже если поле испытывает разрыв. Функция не может иметь скачков.**
5. **Принцип суперпозиции – если частица может находиться в состояниях , то она может находиться в состоянии , т.е. в состоянии, которое является линейной комбинацией .**
6. **Уравнение Шредингера – связывает волновую функцию с силовой ситуацией частицы. , где , – потенциальный рельеф, соответствующий ситуации, в которой находится частица. Если частица свободна, то .** Потенциальная яма и потенциальный барьер изображены на рисунках. Примером потенциального барьера служит электрон на глубоких уровнях в атоме.

# Стационарное уравнение Шредингера

Запишем волновую функцию в виде . В стационарном виде нас интересует только координатная ее часть. **В стационарном виде уравнение Шредингера принимает вид , где – полная энергия.** – оператор полной энергии (гамильтониан). Решением данного уравнения является волновая функция , которая представляет собой собственную функцию оператора Гамильтона.  **в уравнении – полная энергия частицы в состоянии , – 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 .

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

Пример: частица в бесконечно глубокой потенциальной яме . Внутри ямы можно использовать стационарное уравнение Шредингера . . Подставив, получим . Получили дифференциальное уравнение. Его характеристическим уравнением будет . Отсюда . Общее решение имеет вид . Для нахождения и используем граничные условия: . Вне ямы волновая функция должна быть равна нулю, в яме не ноль. Получаем , , откуда , т.е. , откуда **получаем выражение энергии .** 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 . Чтобы найти , используем условия нормировки. , откуда получим и .

Состояние является обычным состоянием. . Состояние при является возбужденным. Для определения вероятности нахождения частицы в каком-либо состоянии на каком-то отрезке, можно как брать интеграл , так и посмотреть площадь фигуры на графике квадрата волновой функции. Например, вероятность нахождения при от до равна .

C:\Users\Borsch\Desktop\image644.pngДля определения вероятности прохождения частицы через потенциальный барьер используется коэффициент прохождения, где – потенциал барьера, – энергия частиц, – ширина барьера.