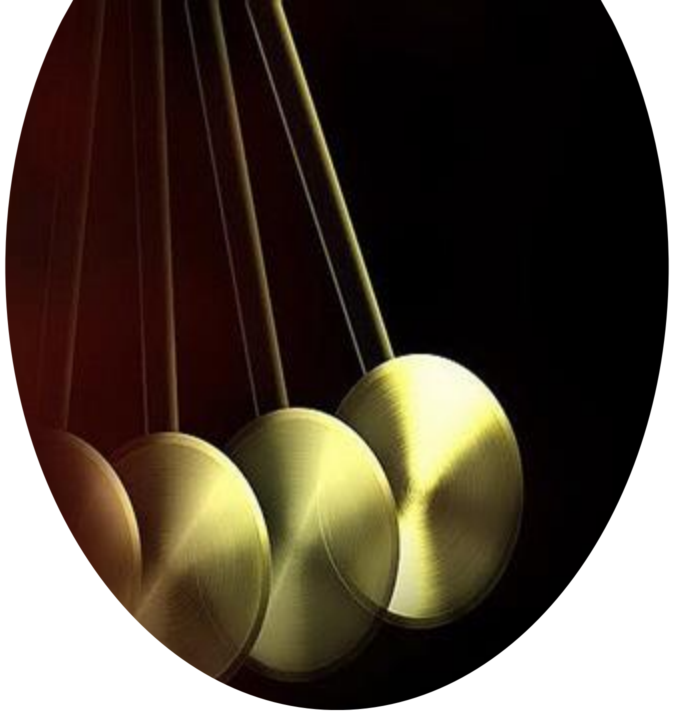

Атомная физика

Лекция 7

Уравнение Шредингера

Движущейся частице с импульсом $\vec{p}$ и энергией E сопоставлена волна

$$\psi = \psi_0 \cos\left(\omega \cdot t - \vec{k} \cdot \vec{r}\right)$$

Из энергии получаем частоту:

$$\boxed{E = h\nu = \frac{h}{2\pi} \cdot 2\pi\nu = \hbar \cdot \omega} \Rightarrow \boxed{\omega = \frac{E}{\hbar}}$$

Из импульса получаем волновой вектор:

$$\boxed{k = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{2\pi}{\left(\dfrac{h}{p}\right)} = \frac{2\pi \cdot p}{h} = \frac{p}{\hbar}}$$

Уравнение Шредингера

$$\psi = \psi_0 \cos\left(\omega \cdot t - \vec{k} \cdot \vec{r}\right)$$

$$\omega = \frac{E}{\hbar}$$

$$k = \frac{p}{\hbar}$$

$$\psi = \psi_0 \cos\left(\frac{E}{\hbar} \cdot t - \frac{\vec{p}}{\hbar} \cdot \vec{r}\right)$$

Для волны, бегущей вдоль оси ОХ (частицы, движущейся параллельно оси ОХ):

$$\psi(x) = \psi_0 \cos\left(\frac{E}{\hbar} \cdot t - \frac{p}{\hbar} \cdot x\right)$$

Уравнение Шредингера

Уравнение Шредингера:

- основное уравнение квантовой механики,

- описывает поведение микрочастицы в силовом поле,

- **сочетает в себе как волновые, так и корпускулярные свойства микрочастиц,**
- **является законом природы,**
- его нельзя строго вывести из каких-либо известных ранее соотношений (как и уравнения Ньютона в классической механике).

Справедливость **уравнения Шредингера** (записано в 1926 году) доказывается тем, что все вытекающие из него следствия точно согласуются с опытными фактами.

1. **Масса** микрочастицы - **m**: **определяет её корпускулярные свойства.**

2. Потенциальная энергия U(x, y, z, t): определяет взаимодействие частицы с силовым полем.

В общем случае она зависит от координат микрочастицы и от времени.

3. «Пси»-функция Ψ (x, y, z, t): определяет волновые свойства микрочастицы.

- является также функцией координат и времени.

Вид Ψ- функции определяется потенциальной энергией , то есть, характером тех сил, которые действуют на частицу.

Нестационарными называются состояния микрочастицы, в которых потенциальная энергия зависит и от координат и от времени:

$$U = U(x, y, z, t)$$

Уравнение Шредингера для нестационарных состояний записывается как

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi + U\Psi = i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}$$

Здесь

$$\Delta\Psi = \frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\Psi}{\partial z^2}$$ - оператор Лапласа.

Стационарными называются состояния микрочастицы, в которых её потенциальная энергия не зависит от времени и является функцией только координат:

$$U = U(x, y, z)$$

Уравнение Шредингера для стационарных состояний:

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

E – **полная энергия** микрочастицы.

Стационарное уравнение Шрёдингера

Если потенциальная функция не зависит от времени: *U*=*U*(*x*,*y*,*z*), то

$$\Psi(x,y,z,t)=\psi(x,y,z)\cdot e^{-i\omega\cdot t}$$

$$\frac{\partial\Psi}{\partial t}=\psi(x,y,z)\cdot\frac{\partial}{\partial t}\left(e^{-i\omega\cdot t}\right)=\psi\cdot(-i\omega)\cdot e^{-i\omega\cdot t}$$

$$\boxed{\Delta\Psi(x,y,z,t)=e^{-i\omega\cdot t}\cdot\Delta\psi(x,y,z)}$$

Стационарное уравнение Шрёдингера

$$\Psi(x,y,z,t)=\psi(x,y,z)\cdot e^{-i\omega\cdot t}$$

$$\frac{\partial\Psi}{\partial t}=\psi\cdot(-i\omega)\cdot e^{-i\omega\cdot t}$$

$$\Delta\Psi(x,y,z,t)=e^{-i\omega\cdot t}\cdot\Delta\psi(x,y,z)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\Delta\Psi+U\cdot\Psi=i\hbar\cdot\frac{\partial\Psi}{\partial t}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot e^{-i\omega\cdot t}\cdot\Delta\psi+U\cdot e^{-i\omega\cdot t}\cdot\psi=i\hbar\cdot\psi\cdot(-i\omega)\cdot e^{-i\omega\cdot t}$$

Стационарное уравнение Шрёдингера

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot \cancel{e^{-i\omega \cdot t}}\cdot \Delta\psi + U\cdot \cancel{e^{-i\omega \cdot t}}\cdot\psi = i\hbar\cdot\psi\cdot(-i\omega)\cdot \cancel{e^{-i\omega \cdot t}}}$$

$$\Downarrow$$

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\Delta\psi + U\cdot\psi = i\hbar\cdot\psi\cdot(-i\omega)}$$

$$E = \hbar\cdot\omega$$

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\Delta\psi + U\cdot\psi = E\cdot\psi}$$

$$\Downarrow$$

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

Уравнение Шредингера позволяет найти ответ на следующие вопросы.

1. Каков энергетический спектр микрочастицы: дискретный или непрерывный?

$$E_1, E_2, \ldots, E_n$$

2. Каков вид волновых функций?

$$\Psi_1, \Psi_2, \ldots, \Psi_n$$

3. В какой точке силового поля локализована микрочастица?

$$|\psi_1|^2, |\psi_2|^2, \ldots, |\psi_n|^2$$

Волновая функция и её свойства

Особенностью квантово-механического описания поведения микрочастиц является вероятностный подход .

Вероятностной является причинно – следственная связь между событиями микрочастицы.

При этом изменяется не сама вероятность поведения микрочастицы, а величина, названная **амплитудой вероятности** или «пси»-функцией.

$$\psi(x, y, z, t)$$

Волновая функция описывает волновые свойства частиц.

Свойства волновой функции

Правильную интерпретацию физического смысла волновой функции дал М. Борн в 1926 г.

1. **Физический смысл** имеет не сама волновая функция, а квадрат ее модуля: **квадрат модуля волновой функции равен плотности вероятности нахождения частицы в соответствующем объёме пространства.**

$$|\Psi|^2 = \frac{dP}{dV}$$

2. **Вероятность P** нахождения микрочастицы в заданном объёме **V равна единице:**

$$\boxed{P = \int_{-\infty}^{\infty} dP = 1}$$

3. **Условие нормировки волновой функции:**

$$\int_V |\Psi|^2 dV = 1$$

4. **Волновая функция** должна быть:

- **непрерывной,** поскольку описывает последовательное изменение поведения микрочастицы в некотором заданном пространстве;
- **однозначной и конечной,** т.е. давать один ответ на поставленный вопрос о месте нахождения микрочастицы;
- **интегрируемой и дифференцируемой** по координатам и времени.

5. **Первые и вторые производные от волновой функции должны быть также непрерывными.**

Из уравнения Шредингера и из условий, налагаемых на волновую функцию, непосредственно вытекают **правила квантования.**

Решения уравнения Шредингера существуют не при любых, а только при **некоторых значениях величин**, получивших название **собственных значений.**

Собственные значения полной энергии образуют **дискретный энергетический спектр** микрочастицы:

$$\boxed{E_1, E_2, E_3 \ldots}$$

Собственные функции, собственные значения

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

Решение уравнения Шрёдингера существует не для любых значений энергии *E*

Значения энергии, при которых решение существует, называются **собственными значениями**

Соответствующие им волновые функции тоже называются **собственными функциями**

Совокупность собственных значений энергии – **спектр** (энергетический спектр)

Спектр энергии может быть дискретным (набор конкретных значений) или непрерывным, сплошным

Собственным значениям энергии микрочастицы соответствуют **собственные волновые функции**.

$$\Psi_1, \Psi_2, \Psi_3 \cdots$$

Далее можно найти **вероятность нахождения частицы в различных точках пространства**:

$$\Psi_1^{\ 2}, \Psi_2^{\ 2}, \ldots, \Psi_n^{\ 2}$$

Нахождения собственных значений всех величин представляет весьма **трудную математическую задачу**.

Собственные функции, собственные значения

Если спектр дискретный, собственные значения можно пронумеровать:

$$E_1 \rightarrow \psi_1$$
$$E_2 \rightarrow \psi_2$$
$$\ldots$$
$$E_i \rightarrow \psi_i$$

Если одному и тому же собственному значению энергии соответствует несколько волновых функций, тогда соответствующий уровень энергии называется <u>вырожденным</u>

$$E_n \rightarrow \psi_{n1};\ \psi_{n2};\ \psi_{n3}$$

Кратность вырождения равна числу волновых функций

Квантование энергии при решении уравнения Шрёдингера получается естественно, без привлечения каких-либо дополнительных соображений

Движение свободной частицы

Свободная частица движется вдоль оси X в свободном пространстве при отсутствии внешних силовых полей.

В этих условиях **потенциальная энергия частицы равна нулю** ($U = 0$).

Тогда **полная энергия частицы ($E=E_K+U$) равна её кинетической энергии:**

$$\boxed{E = \frac{p^2}{2m}}$$

Уравнение Шредингера в одномерном случае движения имеет вид:

$$\boxed{\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E\psi = 0}$$

Это уравнение похоже на дифференциальное уравнение гармонических колебаний,

$$\frac{d^2x}{dt^2} + \omega^2 x = 0$$

решением которого является выражение:

$$\boxed{x = x_o \cdot \sin(\omega t + \alpha)}$$

По аналогии обозначим величину

$$\frac{2mE}{\hbar^2} = \omega^2$$

Тогда решением уравнения Шредингера является выражение:

$$\psi(x) = \psi_o \sin(\omega t + \alpha)$$

Эта функция представляет собой **плоскую монохроматическую волну де Бройля.**

Область локализации частицы определяет квадрат модуля волновой функции.

$$|\psi|^2 = \psi_O{}^2 \sin^2(\omega x + \alpha)$$

Поскольку $\left\langle \sin^2 x = \dfrac{1}{2} \right\rangle$, то

$$|\psi|^2 = \frac{\psi_O{}^2}{2}$$

Получили, что все **положения частицы в пространстве (вдоль оси X) равновероятны.**

Определим **значения полной энергии и импульса** частицы:

$$E = \frac{\hbar^2\omega^2}{2m}$$

$$p = \hbar\omega$$

Поскольку частота волновой функции ω может принимать любые положительные значения, то **импульс p и энергия E частицы принимают любые значения.**

Энергетический спектр свободной частицы является **непрерывным.**