

Лекция 14. Уравнение Шрёдингера

Свет проявляет как волновые, так и корпускулярные свойства. Эта дуалистическая природа описывается следующими соотношениями:

$$E = \hbar\omega, \quad \vec{p} = \hbar\vec{k} = \frac{2\pi\hbar}{\lambda} = \frac{h}{\lambda}$$

Здесь E — энергия, ω — угловая частота, \vec{p} — импульс, \vec{k} — волновой вектор, λ — длина волны, $h = 6.626 \cdot 10^{-34}$ Дж·с — постоянная Планка, $\hbar = \frac{h}{2\pi}$.

Луи де Бройль предположил, что если свет обладает как волновыми, так и корпускулярными свойствами, то подобный дуализм должен быть присущ и обычной материи: электронам, протонам и другим частицам. Он ввёл понятие волны, соответствующей частице. Её длина определяется соотношением:

$$\lambda = \frac{h}{p}$$

а частота:

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

где p — импульс частицы, E — её энергия. Для свободной частицы с массой m и без потенциальной энергии:

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

Таким образом, даже электрону можно сопоставить волну, и он может проявлять интерференцию и дифракцию. Это было экспериментально подтверждено.

Опыт Дэвиссона и Джермера (1927): при прохождении пучка электронов через кристалл никеля была обнаружена дифракционная картина, аналогичная картине от рентгеновского излучения. Это стало доказательством волновых свойств электронов.

Электрон как облако вероятностей: из-за волновой природы частицы нельзя точно указать её положение и импульс одновременно. Электрон описывается не как точечный объект, а как облако вероятностей, где выше вероятность нахождения — там выше $|\psi|^2$.

Принцип неопределённости Гейзенберга:

$$\Delta x \cdot \Delta p \gtrsim \frac{\hbar}{2}$$

где Δx — неопределённость координаты, Δp — неопределённость импульса. Это фундаментальное ограничение, вытекающее из самой природы квантовых объектов.

Волновая функция $\psi(\vec{r}, t)$ — центральное понятие квантовой механики. Её квадрат модуля

$|\psi|^2$ показывает вероятность обнаружить частицу в данной точке пространства в данный момент времени. Волновая функция может быть комплексной, но физически измеримыми являются только производные от неё величины.

Уравнение Шрёдингера описывает эволюцию волновой функции. Оно заменяет законы Ньютона в квантовом мире:

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = \hat{H} \psi(\vec{r}, t)$$

Здесь \hat{H} — гамильтониан — оператор полной энергии. Он состоит из оператора кинетической энергии и потенциальной:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r})$$

Первая часть — кинетическая энергия, выраженная через оператор Лапласа, вторая — потенциальная энергия $V(\vec{r})$.

Таким образом, уравнение Шрёдингера показывает, как изменяется волновая функция во времени под действием полной энергии системы.

Стационарное уравнение Шрёдингера (если потенциал не зависит от времени):

$$\hat{H} \psi(\vec{r}) = E \psi(\vec{r})$$

Это уравнение на собственные значения: мы ищем такие функции ψ , при которых действие оператора \hat{H} приводит к умножению на число E — энергию.

Свойства волновой функции:

- ψ должна быть нормируемой: $\int |\psi|^2 dV = 1$
- должна быть конечной, непрерывной и однозначной во всех точках
- производные ψ также должны быть непрерывными (кроме точек, где потенциал имеет особые особенности)

Всё поведение микрочастиц в квантовой механике может быть выведено из уравнения Шрёдингера, что делает его фундаментом современной теоретической физики.