ЛЕКЦИЯ 5

ПЛАН ЛЕКЦИИ

1. Волновая функция.
2. Смысл и свойства волновой функции.
3. Общее (нестационарное) уравнение Шредингера.
4. Стационарное уравнение Шредингера.
5. Математический аппарат квантовой механики. Операторы.

Из прошлой лекции: электрон, всегда проявляясь как единая неделимая частица с элементарным зарядом $\boldsymbol{e}$ и массой $\boldsymbol{m}_e$, в то же время обладает волновыми свойствами. В связи с этим у него нет траектории в строгом смысле этого слова.

Энергия внешних электронов в атоме порядка 10 эВ, что соответствует импульсу около $3\cdot 10^3$ эВ/с.

При этом неопределенность в координате электрона составит величину порядка 10^{-10} м, что сравнимо с размером атома.

Это означает, что внутри атома бессмысленно говорить о траектории электронов.

К электронам в атоме нельзя применять обычную механику. В этом и состоит непоследовательность теории Бора.

Новая теория, преодолевшая недостатки теории Бора, была создана в 1926 – 1928 г.г. В.Гейзенбергом (немецкий физик), Э.Шредингером (австрийский физик) и П. Дираком (английский физик).

Она была названа *квантовой (волновой) механикой*. Квантовая механика описывает законы движения и взаимодействия микрочастиц с учетом их волновых свойств.

ВОЛНОВАЯ ФУНКЦИЯ.

На первом этапе развития квантовой механики возникла принципиальная проблема, связанная с природой волн де Бройля. Сравним дифракцию волн и микрочастиц.

Дифракция волн.

В результате наложения дифрагирующих волн - усиление или ослабление амплитуды колебаний.

Интенсивность дифракционной картины пропорциональна квадрату амплитуды световой волны.

Из фотонной теории - интенсивность определяется числом фотонов, попадающих в рассматриваемую точку дифракционной картины.

Таким образом, число фотонов в этой точке задается квадратом амплитуды световой волны.

ВОЛНОВАЯ ФУНКЦИЯ.

Дифракция микрочастиц.

Для нее также характерно неодинаковое распределение потоков микрочастиц по различным направлениям.

Из волновой теории: максимумы в дифракционной картине означают, что эти направления характеризуются наибольшей интенсивностью волн де Бройля.

С другой стороны, интенсивность волн де Бройля больше там, где имеется большее число частиц.

Иначе, интенсивность волн де Бройля в рассматриваемой точке пространства определяет число частиц, попавших в эту точку.

Можно сказать, что дифракционная картина - это проявление статистической (вероятностной) закономерности: частицы попадают в места с наибольшей интенсивностью волн де Бройля.

Следовательно, состояние микрочастицы можно описать с помощью обычной теории вероятностей?

Нет, поскольку теория вероятностей не позволяет описать наблюдающееся на опыте явление дифракции.

ВОЛНОВАЯ ФУНКЦИЯ.

Немецкий физик М.Борн в 1926 году предположил, что по волновому закону меняется не сама вероятность, а величина, названная *амплитудой вероятности*.

Ее обозначают как $\Psi(x, y, z, t)$ и называют также *волновой функцией* или *пси-функцией*.

Амплитуда вероятности может быть величиной комплексной, а вероятность ***W*** пропорциональна квадрату ее модуля:

$$W \sim |\Psi(x, y, z, t)|^2$$

Таким образом, описание состояния микрообъекта с помощью волновой функции имеет *статистический (вероятностный)* характер: квадрат модуля волновой функции (квадрат модуля амплитуды волн де Бройля) определяет вероятность нахождения частицы в момент времени t в области с координатами x и $x+dx$, y и $y+dy$, z и $z+dz$.

Итак, волны де Бройля получили вполне определенное *статистическое* толкование.

СМЫСЛ И СВОЙСТВА ВОЛНОВОЙ ФУНКЦИИ.

Состояние микрочастиц в квантовой механике описывается принципиально по-новому – с помощью волновой функции, которая несет информацию об их корпускулярных и волновых свойствах.

Борн дал следующую интерпретацию волновой функции.

Вероятность нахождения частицы внутри бесконечно малого объема ***dV*** в момент времени ***t*** равна

$$dW = |\Psi|^2 dV$$

Квадрат модуля пси - функции $|\Psi|^2 = dW/dV$ имеет смысл *плотности вероятности*, т.е. определяет вероятность нахождения микрочастицы в единичном объеме в окрестностях точки с координатами ***x, y, z***.

Таким образом, физический смысл имеет не сама пси - функция, а квадрат ее модуля $|\Psi|^2$, которым задается *интенсивность волн де Бройля*.

СМЫСЛ И СВОЙСТВА ВОЛНОВОЙ ФУНКЦИИ.

Интеграл от выражения $dW = |\Psi|^2 dV$, взятый по всему объему, доступному для движения микрочастицы, представляет собой *условие нормировки*:

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

Условие нормировки вытекает из математического смысла плотности вероятности и означает, что частица объективно существует в пространстве с объемом V.

Чтобы волновая функция объективно отражала состояние микрочастиц, она должна обладать рядом <u>свойств</u> и удовлетворять некоторым <u>ограничительным условиям</u>:

1. <u>Функция должна быть *конечной*</u>. Поскольку функция характеризует вероятность обнаружения микрочастицы в элементе объема, она должна быть конечной (ее значение не должно быть больше единицы).

СМЫСЛ И СВОЙСТВА ВОЛНОВОЙ ФУНКЦИИ.

2. Функция должна быть *однозначной*. Вероятность не может быть неоднозначной.

3. Функция должна быть *непрерывной*. Вероятность не может изменяться скачком.

Волновые функции, или амплитуды вероятностей в квантовой механике, как и оптические амплитуды, удовлетворяют *принципу суперпозиции*.

В рассмотренном на прошлой лекции «мысленном» опыте с двухщелевым интерферометром принцип суперпозиции выглядит следующим образом:

$$\Psi = \Psi_1 + \Psi_2$$

где Ψ_1, Ψ_2 - амплитуды вероятности прохождения частицы соответственно через первую и вторую щели, а Ψ - результирующая амплитуда, когда открыты обе щели.

СМЫСЛ И СВОЙСТВА ВОЛНОВОЙ ФУНКЦИИ.

Общая формулировка принципа суперпозиции: *если в рассматриваемых условиях физическая система может находиться в различных состояниях, которым соответствуют волновые функции* $\Psi_1, \Psi_2, \ldots, \Psi_k, \ldots$, *то в этих условиях возможны и состояния с волновой функцией, являющейся суперпозицией перечисленных выше состояний:*

$$\Psi = \sum_k C_k \Psi_k$$

где C_k ($k = 1, 2, 3, \ldots$) – некоторые комплексные числа.

Сложение волновых функций (*амплитуд вероятностей*), а не *вероятностей* (определяемых квадратами модулей волновых функций) принципиально отличает квантовую теорию от классической статистической теории, в которой для независимых событий справедлива теорема сложения вероятностей.

СМЫСЛ И СВОЙСТВА ВОЛНОВОЙ ФУНКЦИИ.

Таким образом, из смысла пси – функции вытекает, что квантовая механика имеет статистический характер.

Она не позволяет определить местонахождение частицы в пространстве или траекторию, по которой движется частица.

С помощью пси – функции можно лишь предсказать, с какой вероятностью частица может быть обнаружена в различных точках пространства.

ОБЩЕЕ (НЕСТАЦИОНАРНОЕ) УРАВНЕНИЕ ШРЕДИНГЕРА

В основе обычной механики лежат уравнения Ньютона, усовершенствованные для релятивистских скоростей Эйнштейном.

В этих уравнениях используется понятие траектории.

В основу квантовой механики должно быть положено такое уравнение, которое позволило бы описать двойственную природу микрочастиц, ведущих себя то, как волна, то, как частица.

Установлено, что состояние микрочастицы в квантовой механике задается волновой функцией (амплитудой вероятности), которая является функцией пространственных координат и времени.

Именно волновая функция, или точнее, величина $|\Psi|^2$, определяет вероятность пребывания частицы в момент времени t в объеме dV, т.е. в области с координатами x и $x+dx$, y и $y+dy$, z и $z+dz$.

Следовательно, основное уравнение должно быть уравнением относительно волновой функции.

ОБЩЕЕ (НЕСТАЦИОНАРНОЕ) УРАВНЕНИЕ ШРЕДИНГЕРА

Так как искомое уравнение должно учитывать волновые свойства частиц, оно должно быть *волновым* уравнением.

Такое уравнение впервые было предложено в 1926 году Шредингером.

Релятивистский вариант уравнения был дан Дираком.

Уравнение Шредингера, как и многие основные уравнения физики (например, уравнения Ньютона в классической механике, уравнения Максвелла для электромагнитного поля), не выводится, а постулируется.

Правильность уравнения показывается многочисленными опытами, что придает ему характер закона природы.

ОБЩЕЕ (НЕСТАЦИОНАРНОЕ) УРАВНЕНИЕ ШРЕДИНГЕРА

Уравнение Шредингера (так называемое *общее* или *нестационарное уравнение Шредингера*) имеет вид:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi + U(x,y,z,t)\Psi = i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}$$

Самостоятельно: сравнить с волновым уравнением электромагнитной волны.

где m – масса частицы, i – мнимая единица, Δ - оператор Лапласа

$$\Delta\Psi = \frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\Psi}{\partial z^2},$$

$U(x,y,z,t)$ - потенциальная функция частицы в силовом поле.

Решением уравнения Шредингера является пси-функция.

Очевидно, что вид этой пси-функции зависит от функции $U(x, y, z, t)$.

Но: определить конкретный вид этой функции в каждой конкретной задаче – основная и очень трудная задача.

Для многих практически важных случаев уравнение можно упростить, рассматривая движение частиц в стационарном силовом поле. Такие состояния называются *стационарными* или *состояниями с фиксированными значениями энергии*.

СТАЦИОНАРНОЕ УРАВНЕНИЕ ШРЕДИНГЕРА

Стационарные состояния играют в квантовой механике особую роль и наиболее часто встречаются в ее приложениях.

Если силовое поле, в котором движется частица, стационарно, то функция ***U*** не зависит явно от времени и имеет смысл потенциальной энергии частицы во внешнем поле.

Уравнение Шредингера для стационарных состояний имеет вид:

$$\Delta\Psi + \frac{2\boldsymbol{m}}{\hbar^2}\left(\boldsymbol{E} - \boldsymbol{U}\right)\Psi = 0$$

В этом уравнении ***E*** – полная энергия частицы, которая для стационарного поля остается постоянной.

Решение записанного уравнения находят в виде двух сомножителей, один из которых зависит только от координат, а другой только от времени:

$$\Psi\left(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y},\boldsymbol{z},\boldsymbol{t}\right) = \psi\left(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y},\boldsymbol{z}\right)\cdot \boldsymbol{exp}\left(-\frac{\boldsymbol{iEt}}{\hbar}\right)$$

СТАЦИОНАРНОЕ УРАВНЕНИЕ ШРЕДИНГЕРА

Убедимся, что уравнение Шредингера для стационарных состояний действительно имеет такое решение. Проще всего это сделать, подставив решение в нестационарное уравнение. Если решение верное, в итоге должно получиться стационарное уравнение.

В нестационарное уравнение входят вторые производные от пси – функции по координатам и первая производная по времени. Запишем эти производные.

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2}\left[\Psi(x,y,z,t)\right]=\frac{\partial^2\psi(x,y,z)}{\partial x^2}\cdot exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right),$$

$$\frac{\partial^2}{\partial y^2}\left[\Psi(x,y,z,t)\right]=\frac{\partial^2\psi(x,y,z)}{\partial y^2}\cdot exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right),$$

$$\frac{\partial^2}{\partial z^2}\left[\Psi(x,y,z,t)\right]=\frac{\partial^2\psi(x,y,z)}{\partial z^2}\cdot exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right),$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\left[\Psi(x,y,z,t)\right]=\psi(x,y,z)\cdot\left(-i\frac{E}{\hbar}\right)\cdot exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right).$$

СТАЦИОНАРНОЕ УРАВНЕНИЕ ШРЕДИНГЕРА

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi + U(x,y,z,t)\Psi = i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}}$$

Подставим полученные выражения в уравнение Шредингера, получим:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\Delta\psi\cdot exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right)+U\cdot\psi(x,y,z)\cdot exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right)=$$

$$i\hbar\psi(x,y,z)\cdot(-iE/\hbar)\cdot exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right).$$

После преобразований:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(x,y,z)+U\cdot\psi(x,y,z)=E\psi(x,y,z)$$

или $$\Delta\psi(x,y,z)+\frac{2m}{\hbar^2}(E-U)\psi(x,y,z)=0$$

СТАЦИОНАРНОЕ УРАВНЕНИЕ ШРЕДИНГЕРА

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

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi + U(x,y,z,t)\Psi = i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}}$$

Полученное уравнение не зависит от времени, вид пси – функции и функции *U* определяется только координатами микрочастицы.

Поэтому для удобства перепишем это выражение в виде:

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

Получили уравнение Шредингера для стационарных состояний, что и является подтверждением правильности решения в виде

$$\Psi(x,y,z,t) = \psi(x,y,z)\cdot exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right)$$

СТАЦИОНАРНОЕ УРАВНЕНИЕ ШРЕДИНГЕРА

Уравнение Шредингера для стационарных состояний содержит в качестве параметра полную энергию $\boldsymbol{E}$ частицы.

В теории дифференциальных уравнений доказывается, что подобные уравнения имеют бесчисленное множество решений, из которых путем наложения граничных условий выбирают решения, имеющие физический смысл.

Для уравнения Шредингера такими условиями являются условия регулярности волновых функций: волновые функции и их первые производные должны быть конечными, однозначными и непрерывными.

Таким образом, волновая функция Ψ должна удовлетворять ограничительным условиям, перечисленным в разделе «Смысл и свойства волновой функции».

Регулярные решения имеют место не при любых значениях параметра $\boldsymbol{E}$, а только при определенном их наборе, характерном для конкретной задачи.

СТАЦИОНАРНОЕ УРАВНЕНИЕ ШРЕДИНГЕРА

Эти значения энергии называются *собственными*.

Решения, которые соответствуют *собственным* значениям энергии, называются *собственными функциями*.

Совокупность собственных значений величины называется ее *спектром*.

Собственные значения полной энергии ***E*** могут образовывать как непрерывный, так и дискретный ряд.

В первом случае говорят о *непрерывном* или *сплошном спектре*, во втором – о *дискретном спектре*.

В случае дискретного спектра собственные значения и собственные функции можно пронумеровать:

$$\boldsymbol{E_1},\ \boldsymbol{E_2},\ \ldots,\ \boldsymbol{E_n},\ \ldots,$$

$$\psi_1,\ \psi_2, \ldots,\ \psi_3, \ldots .$$

Таким образом, квантование энергии получается из основных положений квантовой механики без каких-либо дополнительных предположений.

МАТЕМАТИЧЕСКИЙ АППАРАТ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ. ОПЕРАТОРЫ.

В квантовой механике большую роль играет понятие *оператора*.

Впервые с операторами мы столкнулись, записывая уравнения Максвелла в дифференциальной форме (оператор Гамильтона).

Определение оператора формулируется следующим образом:

Оператором называется функция, областью определения и областью значений которой является множество *числовых функций*.

Иными словами, под оператором понимается правило, посредством которого одной функции (обозначим ее $\Psi(x)$) сопоставляется другая функция (обозначим ее $\varphi(x)$).

Символически это записывается следующим образом: $\hat{F}\Psi(x)=\varphi(x)$

$\hat{F}$ - обозначение оператора (буква со шляпкой, буква F выбрана произвольно).

МАТЕМАТИЧЕСКИЙ АППАРАТ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ. ОПЕРАТОРЫ.

$$\boxed{\hat{F}\Psi(x)=\varphi(x)}$$

Смысл приведенного выражения в том, что оператор $\hat{F}$ сопоставляет функции $\Psi(x)$ функцию $\varphi(x)$.

Рассмотрим несколько примеров операторов.

1. Оператор дифференцирования.

Этот оператор обозначается так: $\hat{F}=\dfrac{d}{dx}$

Результатом действия этого оператора на произвольную функцию $\Psi(x)$ является производная этой функции по ее аргументу x.

Например:

$$\hat{F}\sin x=\frac{d}{dx}\sin x=\frac{d\sin x}{dx}=\cos x,\qquad \hat{F}x^3=\frac{d}{dx}x^3=\frac{dx^3}{dx}=3x^2.$$

МАТЕМАТИЧЕСКИЙ АППАРАТ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ. ОПЕРАТОРЫ.

$$\boxed{\hat{F}\Psi(x) = \varphi(x)}$$

2. Оператор умножения.

Этот оператор умножает всякую функцию $\Psi(x)$ на некоторую фиксированную функцию $\varphi(x)$.

Этот оператор обозначается так: $\hat{F} = \varphi(x)$

Например, оператор умножения на $\sin x$ обозначается $\hat{F} = \sin x$ и действует так:

$$\hat{F}e^x = e^x \sin x \qquad \hat{F}\sin x = \sin^2 x$$

Оператор $\hat{F} = 2$ всякую функцию, на которую он действует, умножает на 2.

МАТЕМАТИЧЕСКИЙ АППАРАТ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ. ОПЕРАТОРЫ.

Практически все операторы, которые действуют в квантовой механике, это *линейные* операторы.

Оператор $\hat{F}$ называется линейным, если для любых двух функций $\Psi(x)$ и $\varphi(x)$ и любых двух чисел a и b выполняется равенство

$$\hat{F}\left(a\Psi(x)+b\varphi(x)\right)=a\hat{F}\Psi(x)+b\hat{F}\varphi(x)$$

Можно выделить ряд специальных операторов, так называемых операторов основных физических величин.

В квантовой механике это операторы координат, импульса, момента импульса, энергии и т.д.

Полная энергия материального объекта, записанная в виде функции от координат и импульсов, называется *функцией Гамильтона* и обозначается буквой H.

Оператор функции Гамильтона механической системы (оператор полной энергии) называется *оператором Гамильтона* или *гамильтонианом* и обозначается буквой $\hat{H}$.

МАТЕМАТИЧЕСКИЙ АППАРАТ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ. ОПЕРАТОРЫ.

С помощью этого оператора можно, например, иначе записать стационарное уравнение Шредингера:

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

$\hat{H}$ - это оператор, равный сумме операторов $-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta$ и U:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U$$

(вспомним, что $\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$ - оператор Лапласа)