ЛЕКЦИЯ 3

УРАВНЕНИЕ ШРЕДИНГЕРА

1. Волновая функция

Запишем **волновую функцию** свободно распространяющейся частицы:

$$\psi(x) = \psi_0\, \mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}(px - Et)}\,.$$

Это единственная волновая функция, которая является точной. То есть точно известно, что свободно распространяющейся частице сопровождает именно такая волновая функция. Очевидно, это заданная плоская волна с вполне определенными значениями импульса и энергии. Следовательно, этой частице сопутствует волна.

Вероятность обнаружить частицу в бесконечно маленьком объеме dV равна

$$|\psi|^2 dV.$$

Для нахождения вероятности обнаружения частицы в каком-то объеме нужно проинтегрировать это выражение:

$$\int |\psi|^2 dV.$$

Кроме того, у всякой функции распределения должна быть нормировка.

$$\Rightarrow \quad \int |\psi|^2 dV = 1.$$

Напомним, что

$$|\psi|^2 = \psi^* \psi.$$

Средним значением координаты называется величина:

$$\overline{x} = \int_a^b \psi^* x \psi dx.$$

При одномерном движении нормировка имеет вид:

$$\int\limits_a^b \psi^* \psi dx = 1.$$

Более того, среднее значение некоторой функции $u(x)$ есть:

$$\overline{u(x)} = \int\limits_a^b \psi^* u(x) \psi dx.$$

В частности, в качестве такой функции от координаты может быть рассмотрена потенциальная энергия.

Сейчас рассмотрим задачу нахождения среднего значения импульса. Она аналогична поиску преобразования Фурье. Сразу выпишем результат:

$$\overline{p_x} = \int p_x dw(p_x).$$

2. Уравнение Шредингера

Итак, необходимо обойти то, что неизвестно $w(p_x)$. Для этого существует обходной путь. Этот путь называется **операторным методом**.

Снова запишем волновую функцию свободно распространяющейся частицы:

$$\psi(x) = \psi_0 \,\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}(px - Et)}.$$

Отсюда получим:

$$\frac{\partial \psi}{\partial x} = \frac{i}{\hbar} p \psi,$$

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \psi = p\psi.$$

Последнее выражение можно записать в виде:

$$\hat{p}\psi = p\psi.$$

Решением этого дифференциального уравнения являются собственные значения этого оператора — те, которые разрешены, и которые при измерении могут быть получены.

Следовательно,

$$\hat{p_x} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}.$$

В самом общем виде:

$$\hat{\vec{p}} = -i\hbar \vec{\nabla}$$

Продифференцируем ψ по t:

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{E}{\hbar} \psi,$$

$$\Rightarrow \quad i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi = E\psi.$$

Оператор полной энергии имеет вид:

$$\hat{E} = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}.$$

Зависимость от времени проявляется в нестационарных случаях. В противоположном случае, когда от времени ничего не зависит, то есть при стационарном случае, **уравнение Шредингера** принимает вид:

$$\hat{E}\psi = E\psi.$$

Вспомним, что такое полная энергия:

$$E = T + U.$$

Запишем операторное соотношение:

$$\hat{E} = \hat{T} + \hat{U}.$$

Раньше было доказано, что:

$$\hat{U} = U.$$

Вспомним выражение для кинетической энергии из классической механики:

$$T = \frac{p^2}{2m}.$$

Можно сделать предположение:

$$\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}.$$

В общем случае оператор кинетической энергии имеет вид:

$$\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta.$$

Запишем уравнение Шредингера:

$$\hat{E}\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + U\psi = E\psi = i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}.$$

В стационарном случае:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + U\psi.$$

Заметим, что последнее соотношение не было выведено, а было получено из некоторых соображений.

Уравнение Шредингера дает выражение для возможных значений полной энергии, и для каждого значения энергии, вероятность ее приобрести.

$$E_1 \to |\psi_1|^2, \quad E_2 \to |\psi_2|^2, \quad \text{и так далее.}$$

В самом общем случае каждой физической величине ставится в соответствие оператор $\hat{f}$.

Найдем собственные значения этого оператора:

$$\hat{f}\psi = f\psi.$$

Собственные значения будут:

$$f_1, f_2, ...$$

Вероятности обнаружить систему с данным собственным значением этого физического оператора:

$$\psi_1, \psi_2, ...$$

Решение уравнения Шредингера — это по сути поиск волновых функций ψ_1, ψ_2. Этим волновым функциям соответствуют данные значения этого оператора f_1, f_2.

Физический смысл $|\psi_n|^2$ — это вероятность обнаружить значение f_n этой физической величины, то есть с какой вероятностью оно проявится при измерении.

Задача 3.2. Волновая функция частицы

Волновая функция частицы массой m, совершающей одномерное движение, имеет вид $\psi(x) = A\,\mathrm{e}^{-\alpha x^2}$. Найти потенциал $U(x)$, в котором двигается частица, и ее энергию ϵ, если известно, что при $x = 0$, $U(x) = 0$.

Решение.

Запишем уравнение Шредингера:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} + U(x)\psi = E\psi.$$

Вычислим первую и вторую производные волновой функции:

$$\psi' = -A(2\alpha)x\,\mathrm{e}^{-\alpha x^2}.$$

$$\psi'' = A\,\mathrm{e}^{-\alpha x^2}(4\alpha^2x^2 - 2\alpha).$$

Подставим эти выражения в уравнение Шредингера:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}(4\alpha^2x^2 - 2\alpha) + U(x) = E.$$

Известно, что $u(0) = 0$.

$$\Rightarrow \quad u(x)\,|_{x=0} = 0 \to E = \frac{\alpha\hbar^2}{m}.$$

Это выражение постоянное:

$$\Rightarrow \quad u(x) = E + \frac{\hbar^2}{2m}(4\alpha^2x^2 - 2\alpha) = \frac{2\alpha^2\hbar^2}{m}x^2.$$

На самом деле это гармонический осциллятор, который представлен на рисунке (3.1):

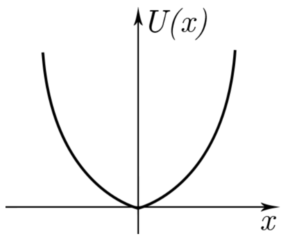

Рис. 3.1

Задача 3.4. Соотношение неопределенностей и уравнение Шредингера

Волновая функция частицы массой m, совершающей одномерное движение в поле с потенциалом $U(x)$, есть

$$\psi(x) = \begin{cases} A \cdot x \cdot \exp\{(-\frac{x}{a})\}, & \text{при } x > 0; \\ 0, & \text{при } x \leqslant 0. \end{cases}$$

Оценить с помощью соотношения неопределенностей среднюю кинетическую энергию $\langle T \rangle$ частицы и сравнить с результатом точного расчета. Найти среднее значение координаты $\langle x \rangle$, а также $U(x)$ при $x > 0$ и полную энергию ϵ, если известно, что $U(x) \to 0$ при $x \to \infty$.

Решение.

Задано, что:

$$U(x) \to 0 \ \textit{при} \ x \to \infty.$$

$$w(x) = |\psi|^2 = A^2 x^2 \, \mathrm{e}^{-\frac{2x}{a}} \, .$$

Это продемонстрировано на графике (3.2):

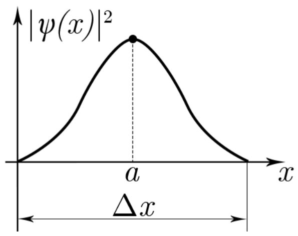

Рис. 3.2

Найдем максимум этой функции:

$$\frac{dw}{dx} = 0 \quad \Rightarrow \quad x_m = a.$$

Воспользуемся соотношением неопределнностей. Оценка для неопределенности в координате будет:

$$\Delta x \simeq 2a.$$

Соотношение неопределенностей имеет вид:

$$\Delta p_x \Delta x \sim \hbar \quad \Rightarrow \quad \Delta p_x = \frac{\hbar}{2a},$$

$$\Delta p_x \approx p_x \quad \Rightarrow \quad < T >= \frac{\hbar^2}{8ma^2}.$$

Найдем среднее значение координаты:

$$\overline{x} = \frac{\int\limits_0^\infty \psi^* x \psi dx}{\int\limits_0^\infty \psi^* \psi dx} = \frac{3}{2} a.$$

Дальше решим уравнение Шредингера:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2}+U(x)\psi=E\psi.$$

Для энергии получим выражение:

$$E=U(x)-\frac{\hbar^2}{2max}\left(\frac{x}{a}-2\right).$$

Известно, что при $U(x)\to 0$ при $x\to\infty$:

$$\Rightarrow\quad E=-\frac{\hbar^2}{2ma^2}.$$

Энергия отрицательна.

$$\Rightarrow\quad U(x)=-\frac{\hbar^2}{max}.$$

Очевидно, это кулоновский потенциал. Этот кулоновский потенциал продемонстрирован на графике (3.3).

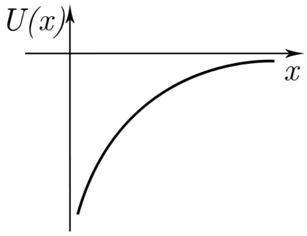

Рис. 3.3

3. Плотность потока вероятности

Из других разделов физики известны уравнения непрерывности для потока жидкости, энергии, заряда. В квантовой физике можно получить аналогичное уравнение для **потока вероятности**. Иногда принимают обозначение $\hat{E}=\hat{H}$ — гамильтониан.

Запишем уравнение Шредингера:

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi+U(x,y,x)\psi=\hat{H}\psi.$$

Вероятность нахождения частицы в объеме V равна:

$$\int\limits_V|\psi|^2dV.$$

Рассмотрим, как меняется эта вероятность по времени:

$$\frac{\partial}{\partial t}\int|\psi|^2dV.$$

Это есть вероятность того, что за одну секунду частица покинет объем V. Распишем ее:

$$\frac{\partial}{\partial t}\int |\psi|^2 dV = \int \left(\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial t} + \psi\frac{\partial\psi^*}{\partial t}\right) dV.$$

Получаем:

$$\frac{\partial\psi}{\partial t} = \frac{i\hbar}{2m}\Delta\psi - \frac{i}{\hbar}U\psi,$$

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

$$\Rightarrow \quad \psi^*\psi^{'} + (\psi\psi^*)^{'} = \frac{i\hbar}{2m}(\psi^*\Delta\psi - \psi\Delta\psi^*),$$

$$\Rightarrow \quad \frac{\partial}{\partial t}|\psi|^2 = \frac{i\hbar}{2m}(\psi^*\Delta\psi - \psi\Delta\psi^*).$$

Из теории поля можно записать таким образом:

$$\psi^*\Delta\psi - \psi\Delta\psi^* = \mathrm{div}(\psi\nabla\psi^* - \psi^*\nabla\psi).$$

Введем новое понятие — **вектор плотности потока вероятности**:

$$\vec{j} = \frac{i\hbar}{2m} = (\psi\nabla\psi^* - \psi^*\nabla\psi),$$

$$\Rightarrow \quad \frac{\partial|\psi|^2}{\partial t} + \mathrm{div}\,\vec{j} = 0.$$

Задача 3.25. Барьер в виде ступеньки

Свободно движущаяся частица массой m с энергией ϵ подходит к границе раздела двух областей I и II, на которой потенциальная энергия частицы скачкообразно меняется от постоянного значения U_1 до постоянного значения U_2. Определить коэффициенты отражения и пропускания частицы на этой границе по амплитуде (r и d) и по энергии (R и D). Исследовать случаи, когда: 1) $\epsilon > U_2$ и 2) $\epsilon < U_2$. Во втором случае определить среднюю глубину проникновения l частицы во вторую среду.

Решение.

Движение частицы продемонстрировано на картинке:

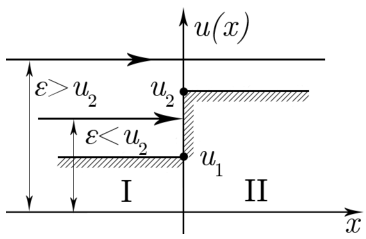

Рис. 3.4

В классическом случае, если $\epsilon > U_2$, то частица не почувствует барьера. Но для волны это не так.

Распишем случаи:

$$1)\ \epsilon > U_2,$$

$$2)\ \epsilon < U_2.$$

Рассмотрим первый случай:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi'' + (u-\epsilon)\psi = 0 \Rightarrow \psi'' + \frac{2m}{\hbar^2}(\epsilon - U)\psi = 0.$$

Это волновое уравнение:

$$\textit{для области } I : k_1^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(\epsilon - U_1),$$

$$\textit{для области } II : k_2^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(\epsilon - U_2).$$

Требуется конструировать решения. Очевидно, они будут гармоническими. В I области существуют падающая и отраженная волны. Будем полагать, что $r = \frac{A_{отр}}{A_{пад}}$. Присвоим $A_{пад} = 1$.

Решение в области I имеет вид:

$$\psi_1 = 1 \cdot \mathrm{e}^{ik_1x} + r \cdot \mathrm{e}^{ik_1x}.$$

Решение в области II имеет вид:

$$\psi_2 = d\,\mathrm{e}^{ik_2x}.$$

В этой задаче стационарное состояние. Из теории дифференциальных уравнений известно, что всякое дифференциальное уравнение II порядка должно иметь граничные условия.

Эти условия в данной задаче получаются из того, что $|\psi|^2$ есть плотность вероятности. Условия для плотности вероятности будут.

1) Конечность $\psi(x)$
2) Непрерывность $\psi(x)$
3) Гладкость $\psi(x)$
4) Однозначность $\psi(x)$

В данном случае однозначность выполняется.

Следовательно, условия в данном случае будут:

$$\psi_1(0) = \psi_2(0) \quad \Rightarrow \quad \mathrm{e}^{ik_1x} + r\,\mathrm{e}^{-ik_1x}|_{x=0} = d\,\mathrm{e}^{ik_2x}|_{x=0} \quad \Rightarrow \quad 1 + r = d,$$

$$\psi_1'(0) = \psi_2'(0) \quad \Rightarrow \quad ik_1\,\mathrm{e}^{ik_1x} + r(-ik_1)\,\mathrm{e}^{-ik_1x}|_{x=0} = dik_2\,\mathrm{e}^{ik_2x}|_{x=0} \quad \Rightarrow \quad 1 + r = d.$$

Итак:

$$\begin{cases} 1 + r = d, \\ k_1(1-r) = dk_2, \end{cases}$$

$$\begin{cases} 1 + r = d, \\ k_1(1-r) = dk_2. \end{cases}$$

Ответ будет иметь вид:

$$r = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}; \quad d = \frac{2k_1}{k_1 + k_2},$$

$$r^2 + d^2 \neq 1.$$

Такие коэффициенты получались в интерферометре Фабри – Перо.

Плотность потока вероятности:

$$\vec{j} = \frac{i\hbar}{2m} = (\psi(\psi^*)' - \psi'\psi^*,$$

$$j_{пад} = \frac{i\hbar}{2m}(\mathrm{e}^{ik_1x}(-ik_1)\,\mathrm{e}^{-ik_1x} - ik_1\,\mathrm{e}^{ik_1x}\,\mathrm{e}^{-ik_2x}) = \frac{\hbar k_1}{m} = \gamma.$$

В этом случае это просто скорость этой частицы.
Рассмотрим отражение:

$$j_{отр} = \frac{i\hbar}{2m}(r^2 ik_1 + r^2(ik_1)) = -r^2\frac{\hbar k_1}{m}.$$

Прошедшая волна имеет вид:

$$j_{прош} = d^2\frac{\hbar k_2}{m}.$$

Физический смысл плотности потока вероятности — это вероятность частицы выйти из заданного объема за 1 секунду.

Найдем R и D:

$$R = |\frac{j_{отр}}{j_{пад}}| = d^2 = |\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}|^2,$$

$$D = |\frac{j_{прош}}{j_{пад}}| = d^2\frac{k_2}{k_1} = 4\frac{k_1 k_2}{(k_1 + k_2)^2}.$$

Как видно, $R + D = 1$. Это так, потому что речь идет о вероятностях. Следовательно, частица либо пройдет, либо отразится.

Напомним, что $\oint\limits_S (\vec{j}dS)$ есть вероятность того, что за одну секунду частица пересечет поверхность S. $\int\limits_V |\psi|^2 dV$ — вероятность нахождения частицы в объеме V, который ограничен поверхностью S.

Поэтому возникает **уравнение непрерывности**:

$$\oint (\vec{j}d\vec{S}) = -\frac{\partial}{\partial t}\int\limits_v (|\psi|)^2 dV.$$

Это уравнение в точности такое же, как и для заряда, и т. д.

Следующий случай $\epsilon < U_2$. В этом случае все аналогично.

$$k_1^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(\epsilon - U_1),$$

$$k_2^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(U_2 - \epsilon) = \kappa^2.$$

Запишем уравнение Шредингера:

$$\psi'' - \frac{2m}{\hbar^2}(U_2).$$

Это уравнение на самом деле затухающее.

$$\psi_1 = \mathrm{e}^{ik_1x} + r\,\mathrm{e}^{-ik_1x},$$

$$\psi_2 = d\,\mathrm{e}^{-\kappa x}.$$

Сшивка на границах:

$$\begin{cases} \psi_1(0) = \psi_2(0), \\ \psi_1'(0) = \psi_2'(0), \end{cases}$$

$$\Rightarrow \quad \begin{cases} 1 + r = d, \\ ik_1 - rik_1 = -d\kappa. \end{cases}$$

Получим:

$$1 - r = -d\frac{\kappa}{rk_1},$$

$$d = \frac{2k_1}{k_1 + i\kappa}.$$

$$|\psi_2|^2 = dd^* \, \mathrm{e}^{-2\kappa x} = \frac{4k_1^2}{k_1^2 + \kappa^2} \, \mathrm{e}^{-2\kappa x}.$$

Глубина проникновения под барьер — это глубина, на которой $|\psi_2|^2$ падает в e раз. Найдем искомую глубину проникновения под барьер:

$$\frac{|\psi_2(0)|^2}{|\psi_2(L)|^2} = \frac{1}{\mathrm{e}^{-2\kappa}} = \mathrm{e} \Rightarrow \mathrm{e}^{1-2\kappa L} = 1,$$

где L — глубина проникновения, а κ — коэффициент затухания.

$$\Rightarrow \quad L = \frac{1}{2\kappa} = \frac{h}{2\sqrt{2m(u_2 - \epsilon)}}.$$