Тема 2. Уравнение Шрёдингера 1926 г.

- 2.1. Уравнение Шрёдингера

Шрёдингер Эрвин (12.VIII.1887–4.I.1961)

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

- уравнение Шрёдингера для одномерного случая

Для трехмерного случая:

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

$$\nabla^2\equiv\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2};\qquad \nabla^2\Psi\equiv\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\Psi}{\partial y^2}+\frac{\partial^2\Psi}{\partial z^2}$$

Стационарное уравнение Шрёдингера

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

- уравнение Шрёдингера для стационарных состояний

Замечания:

- - уравнение Шрёдингера не выводится;
- - приведенная форма является стационарной;
- - приведенная форма является нерелятивистской;
- - для его решения необходимы граничные условия и знание $U(x,y,z)$;
- - пси-функция однозначна, конечна, непрерывна;
- - для пси-функции требуется выполнение условия нормировки;
- - на границах

$$\psi_1(\vec{r}_1) = \psi_2(\vec{r}_2);$$

$$\operatorname{grad}\psi_1(\vec{r}_1) = \operatorname{grad}\psi_2(\vec{r}_2)$$

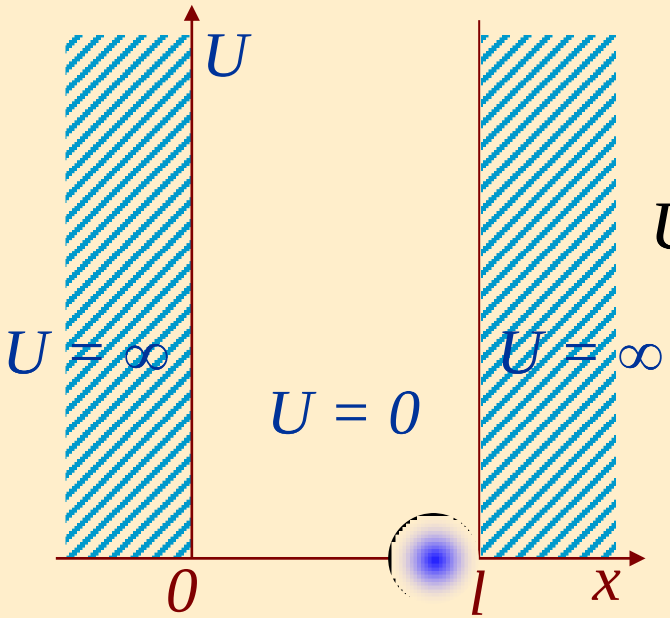
Тема 2. Уравнение Шрёдингера 1926 г.

- 2.1. Уравнение Шрёдингера
- 2.2. Частица в одномерной прямоугольной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками

Шрёдингер Эрвин (12.VIII.1887–4.I.1961)

Уравнение Шрёдингера
для стационарных состояний

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



Одномерная бесконечно глубокая потенциальная яма с вертикальными стенками:

$$U = \infty \;\; \text{в областях} \;\; x<0 \;\; \text{и} \;\; x>l; \; \psi = 0$$

$$U = 0 \;\; \text{в области} \;\; 0 \le x \le l$$

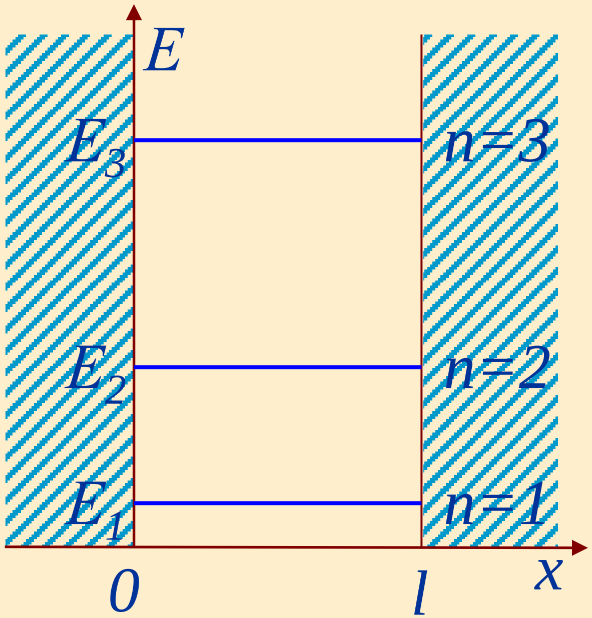
$$\boxed{\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}E\psi = 0}$$

1. Граничные условия: *вследствие непрерывности*

$$\psi - \text{функции}: \; 1) \; \psi(0) = 0; \;\; 2) \; \psi(l) = 0$$

Условиенормировки: $$\int_0^l |\psi(x)|^2 \, dx = 1$$

2. Собственные значения энергии Е



$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ml^2} n^2$$

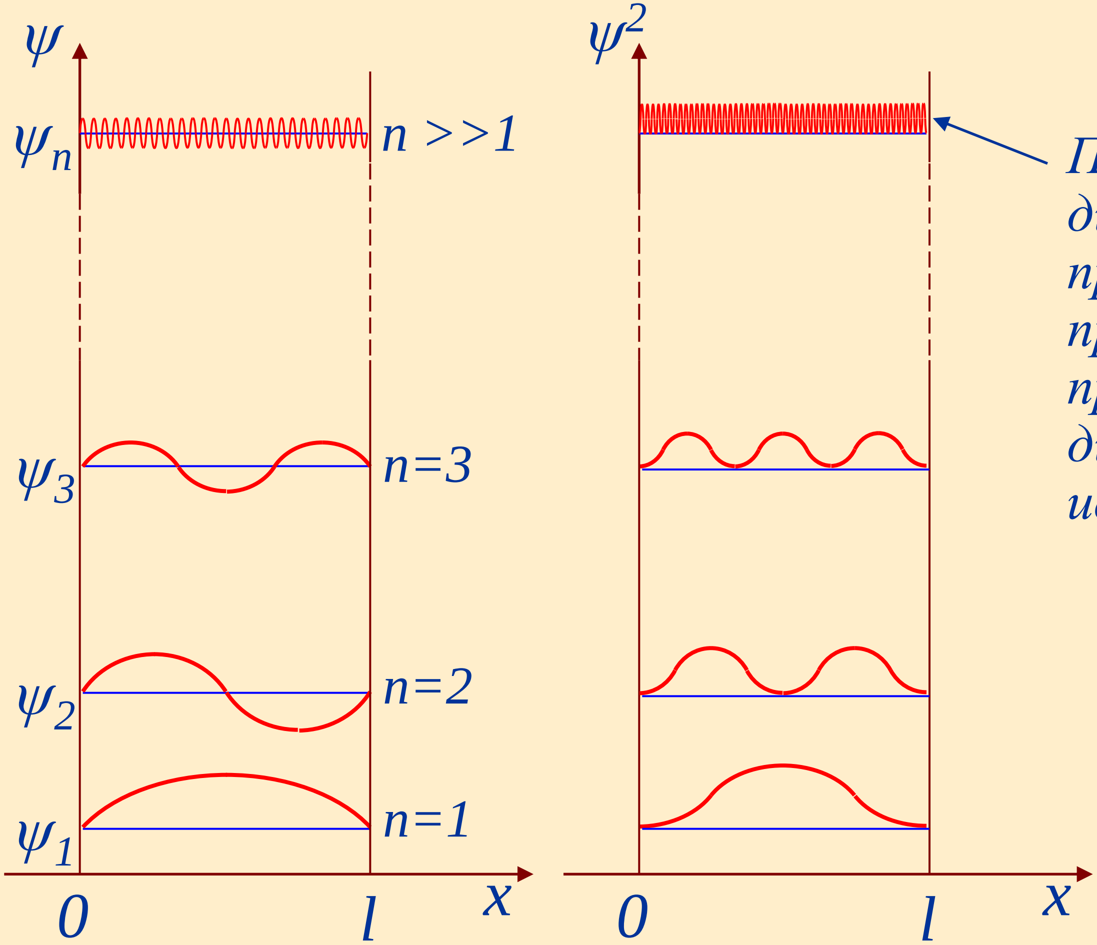
$$n = \cancel{0}, 1, 2, 3, \ldots$$

квантовое число

Волновая функция частицы в потенциальной яме

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{l}}\sin\frac{n\pi}{l}x; \qquad k_n = \frac{n\pi}{l} = \frac{2\pi}{\lambda_n}; \qquad \boxed{l = \frac{\lambda_n}{2}n}$$

$$n = 1, 2, 3, \ldots$$

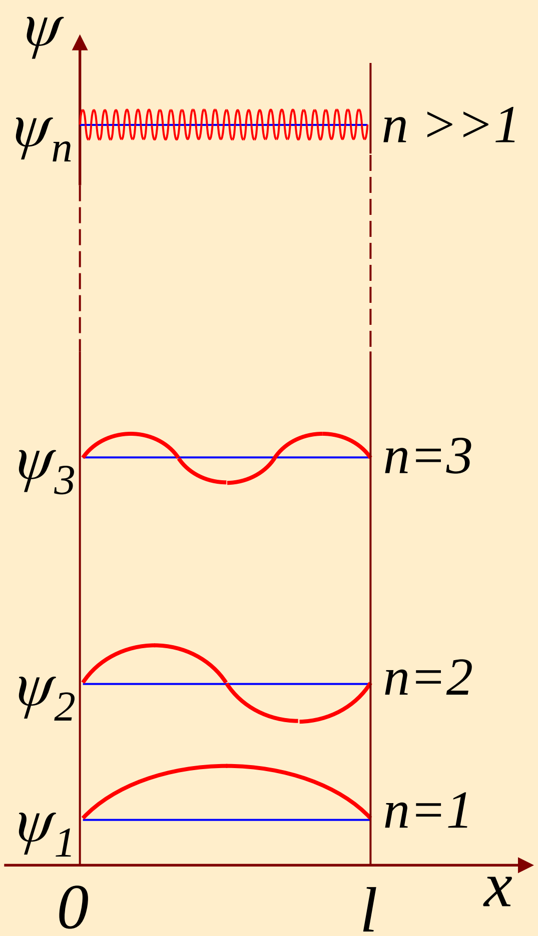


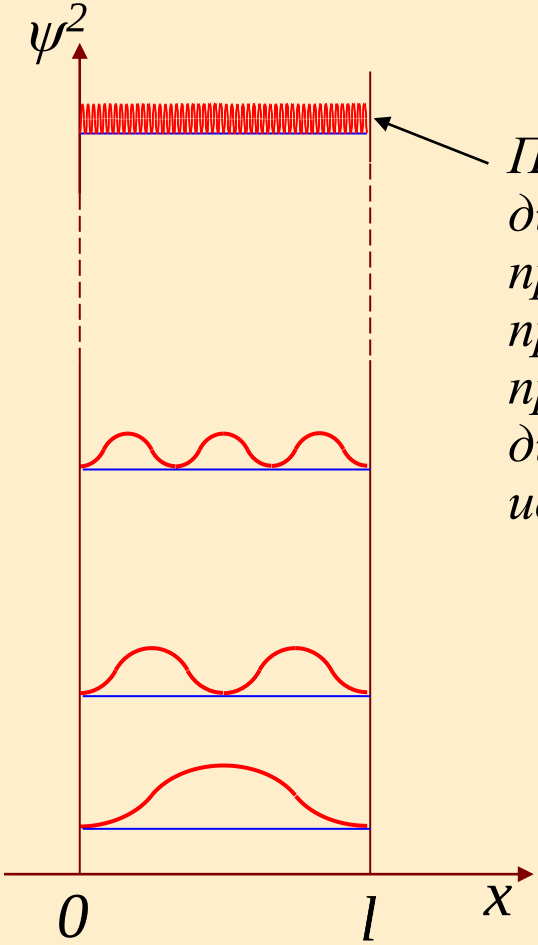
При $n >> 1$ дискретностью практически можно пренебречь, при $n \to \infty$ дискретность исчезает полностью.

Волновая функция частицы в потенциальной яме

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{l}} \sin \frac{n\pi}{l} x; \qquad k_n = \frac{n\pi}{l} = \frac{2\pi}{\lambda_n}; \qquad \boxed{l = \frac{\lambda_n}{2} n}$$

$$n = 1, 2, 3, ..$$





При $n >> 1$ дискретностью практически можно пренебречь, при $n \to \infty$ дискретность исчезает полностью.

Следствия:

1) $E_1 = \dfrac{\pi^2\hbar^2}{2ml^2} > 0$ $\left(\Delta x \Delta p_x \geq \dfrac{\hbar}{2}\right)$

2) $\Delta E_n = E_{n+1} - E_n = \dfrac{\pi^2\hbar^2}{2ml^2}(2n+1)$

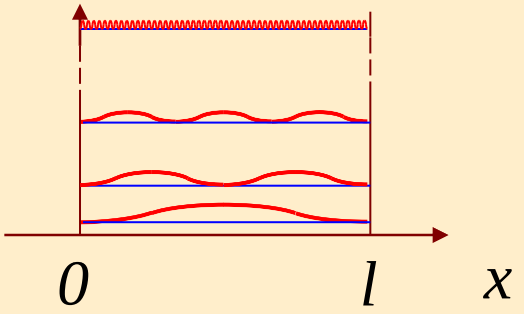
А) для металлов 10^{-15} эВ;

В) для атома 1 эВ.

3) $\dfrac{\Delta E_n}{E_n} = \dfrac{2n+1}{n^2} \xrightarrow[n\to\infty]{} 0$

дискретность исчезает (применимо классическое описание движения частицы)

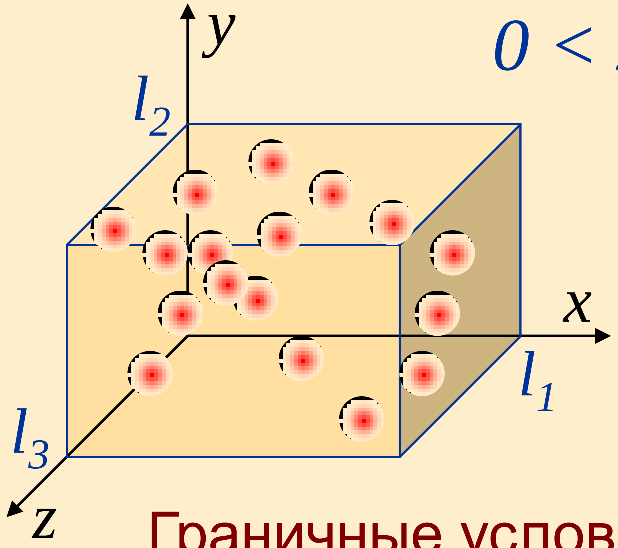
4) При $n \to \infty \quad \Rightarrow \psi^2 = \mathrm{const}$



Тема 2. Уравнение Шрёдингера 1926 г.

- 2.2. Частица в одномерной прямоугольной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками
- 2.3. Частица в трехмерной прямоугольной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками

Шрёдингер Эрвин
(12.VIII.1887–4.I.1961)

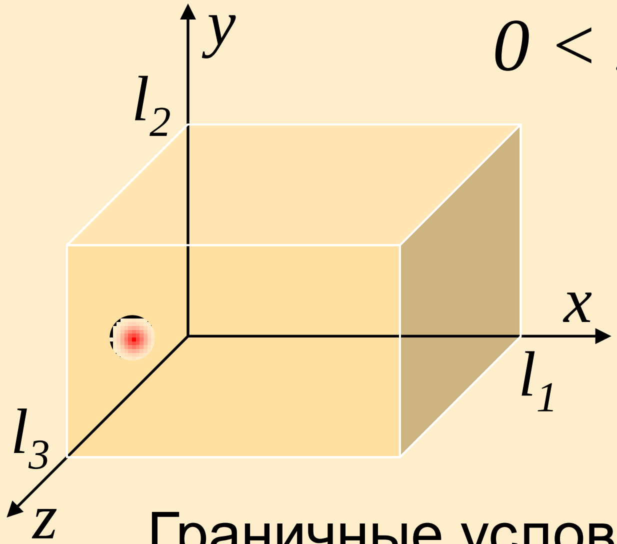


$0 < x < l_1; \quad 0 < y < l_2; \quad 0 < z < l_3$

$$\boxed{\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial y^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}+\frac{2m}{\hbar^2}E\psi=0}$$

$$\psi(0,y,z)=\psi(x,0,z)=\psi(x,y,0)=0;$$

Граничные условия: $\psi(l_1,y,z)=\psi(x,l_2,z)=\psi(x,y,l_3)=0$



$0 < x < l_1; \quad 0 < y < l_2; \quad 0 < z < l_3$

$$\boxed{\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial y^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}+\frac{2m}{\hbar^2}E\psi=0}$$

$$\psi(0,y,z)=\psi(x,0,z)=\psi(x,y,0)=0;$$

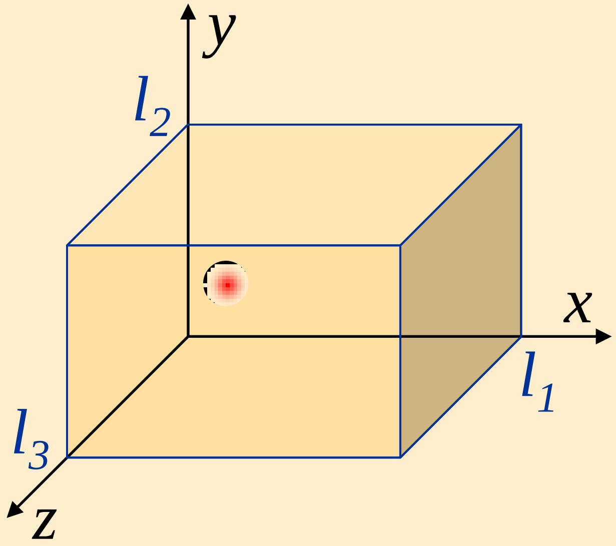
Граничные условия: $\psi(l_1,y,z)=\psi(x,l_2,z)=\psi(x,y,l_3)=0$

$$\psi=\psi_1\ x\ \psi_2\ y\ \psi_3\ z$$

Решение уравнения:

$$\boxed{E=\frac{\pi^2\hbar^2}{2m}\left(\frac{n_1^2}{l_1^2}+\frac{n_2^2}{l_2^2}+\frac{n_3^2}{l_3^2}\right)}$$

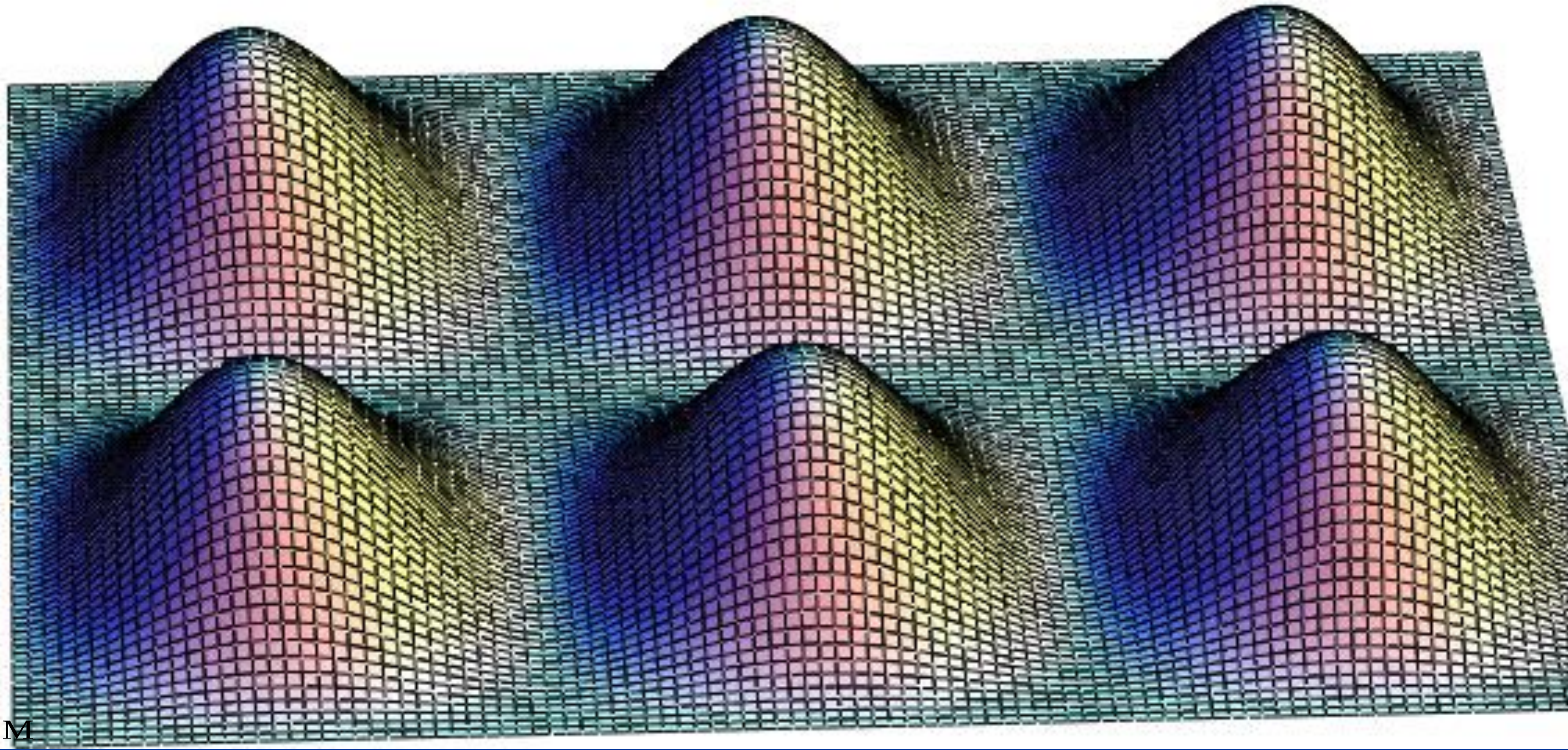
- собственные значения энергии



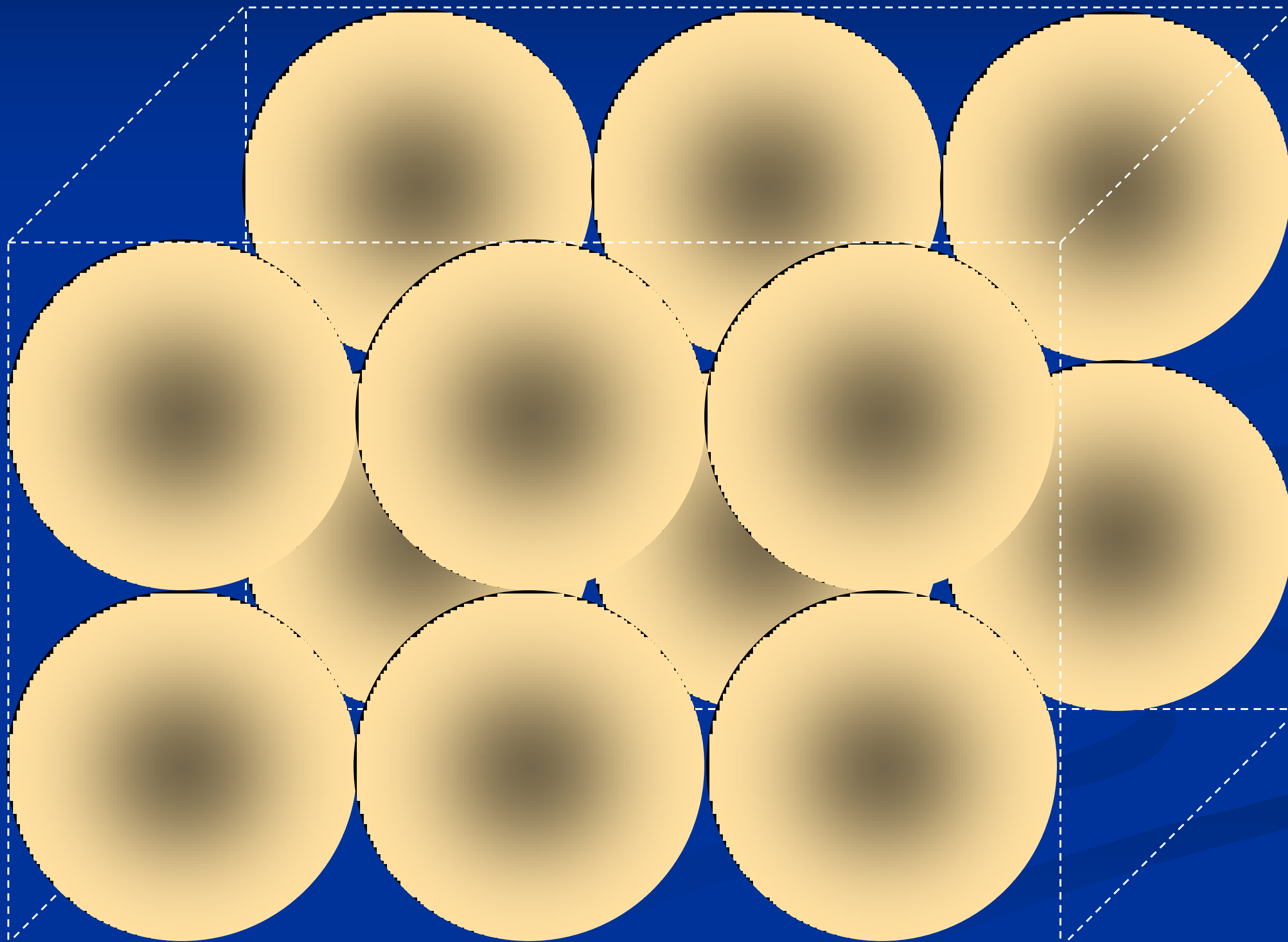
$$\psi = B \sin k_1 x \cdot \sin k_2 y \cdot \sin k_3 z$$

$$\boxed{\psi_{n_1 n_2 n_3} = \sqrt{\frac{8}{l_1 l_2 l_3}} \sin \frac{\pi n_1}{l_1} x \cdot \sin \frac{\pi n_2}{l_2} y \cdot \sin \frac{\pi n_3}{l_3} z}$$

Ψ^2 – функция для частицы в двухмерной яме (n_1=3, n_2=2)



Ψ^2 – функция для частицы в трехмерной яме (n_1=3, n_2=2, n_3=2)



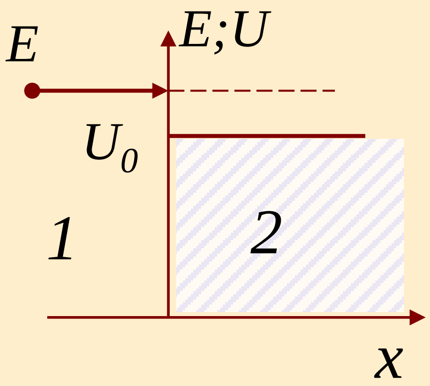
Тема 2. Уравнение Шрёдингера 1926 г.

- 2.3. Частица в трехмерной прямоугольной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками
- 2.4. Прохождение частицы через потенциальные барьеры

Шрёдингер Эрвин
(12.VIII.1887–4.I.1961)

1. Потенциальная ступенька $U \neq \infty$

$E > U_0$



$$\begin{cases} \dfrac{d^2\psi_1}{dx^2} + \dfrac{2m}{\hbar^2} E\psi_1 = 0 \\ \dfrac{d^2\psi_2}{dx^2} + \dfrac{2m}{\hbar^2} \ E - U \ \ \psi_2 = 0 \end{cases}$$

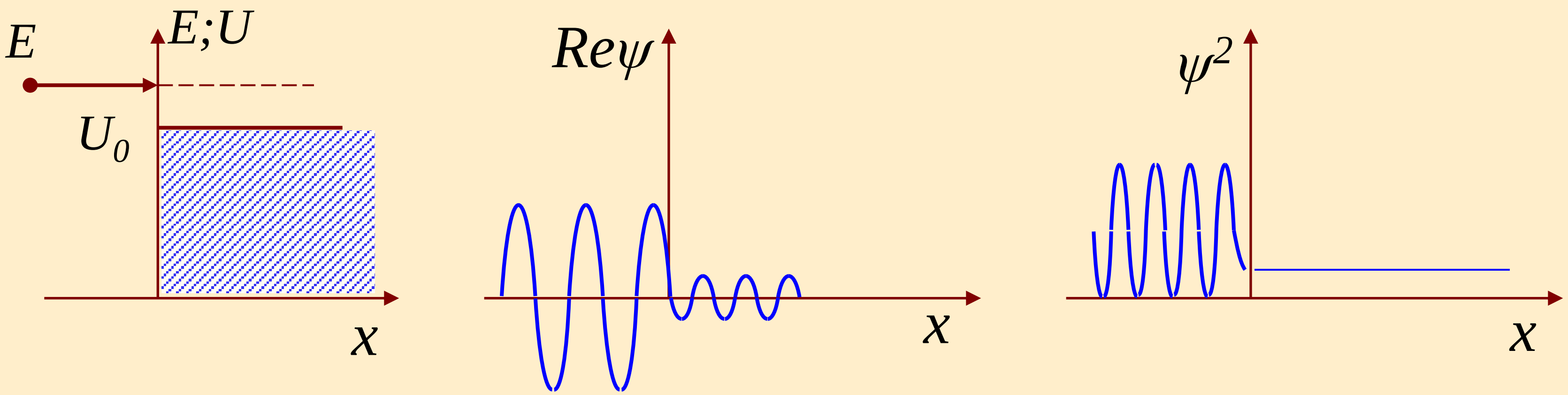
Граничные условия
$$\begin{cases} \psi_1 \ 0 \ = \psi_2 \ 0 \\ \psi_1' \ 0 \ = \psi_2' \ 0 \end{cases}$$

$$\frac{2m}{\hbar^2} E = k_1^2$$

$$\frac{2m}{\hbar^2} \ E - U \ \ = k_2^2$$

1. Потенциальная ступенька $U \neq \infty$

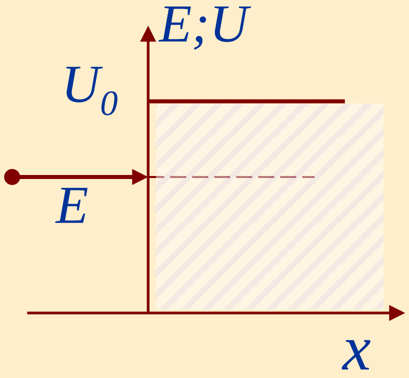
$E > U_0$



$$R = \left(\frac{\sqrt{E} - \sqrt{E-U}}{\sqrt{E} + \sqrt{E-U}} \right)^2$$

$$D = 1 - R; \quad D = 4\frac{\sqrt{E\left(E-U\right)}}{\left(\sqrt{E} + \sqrt{E-U}\right)^2}$$

2. Потенциальная ступенька $U \neq \infty$



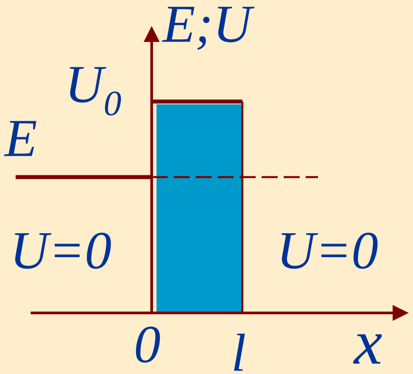
$E < U_0$

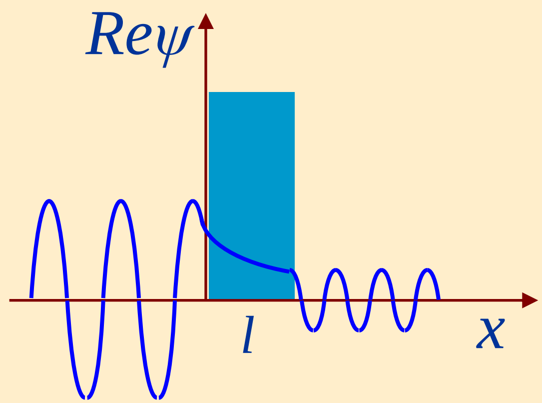
$$\begin{cases} \dfrac{d^2\psi_1}{dx^2} + \dfrac{2m}{\hbar^2} E\psi_1 = 0 \\ \dfrac{d^2\psi_2}{dx^2} + \dfrac{2m}{\hbar^2} \; E - U \;\; \psi_2 = 0 \end{cases}$$

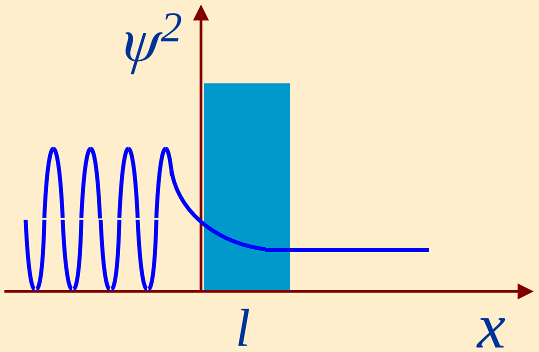
Граничные условия:

$$\begin{cases} \psi_1 \; 0 \; = \psi_2 \; 0 \\ \psi_1' \; 0 \; = \psi_2' \; 0 \end{cases}$$

3. Потенциальный барьер (туннельный эффект)





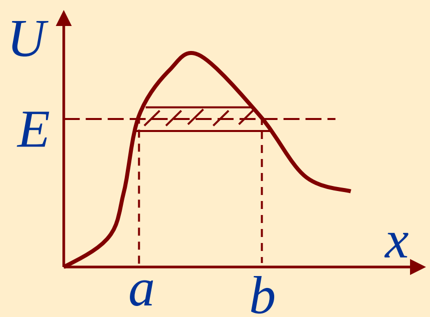


Коэффициент прохождения (коэффициент прозрачности):

$$\boxed{D = \exp\left[-\frac{2}{\hbar}\sqrt{2m(U_0 - E)}\,l\right]}$$

Коэффициент прохождения барьера

произвольной формы:

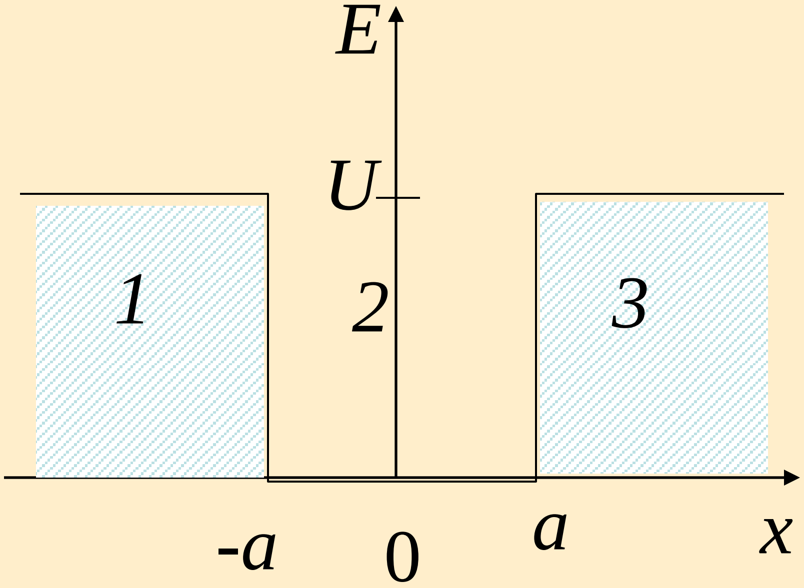


$$\boxed{D = e^{-\frac{2}{\hbar}\int_a^b \sqrt{2m(U_0 - E)}\,dx}}$$

Тема 2. Уравнение Шрёдингера 1926 г.

- 2.4. Прохождение частицы через потенциальные барьеры
- 2.5. Потенциальные ямы конечной глубины

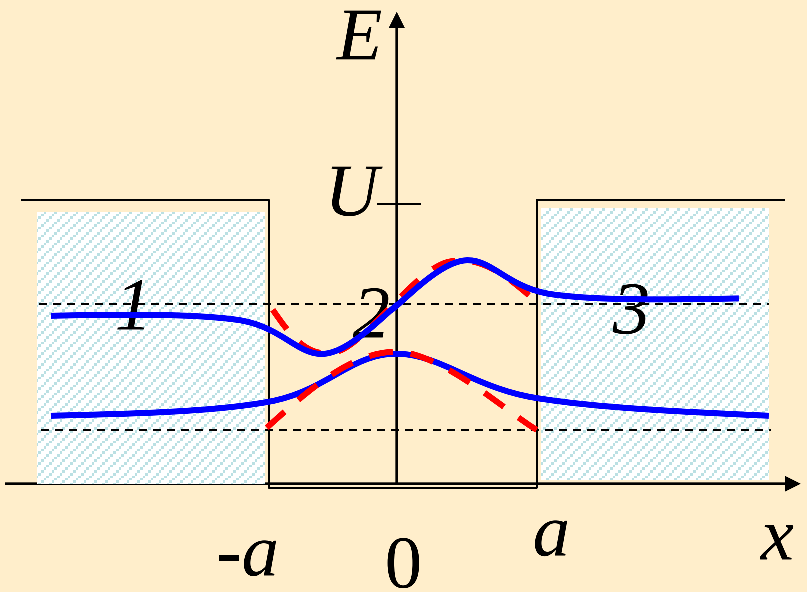
Шрёдингер Эрвин (12.VIII.1887–4.I.1961)



Пример: нуклоны в ядре

$$\begin{cases} \dfrac{d^2\psi_1}{dx^2} + \dfrac{2m}{\hbar^2} \ E - U \ \psi_1 = 0 \\ \dfrac{d^2\psi_2}{dx^2} + \dfrac{2m}{\hbar^2} E\psi_2 = 0 \\ \dfrac{d^2\psi_3}{dx^2} + \dfrac{2m}{\hbar^2} \ E - U \ \psi_3 = 0 \end{cases}$$

При $x \to \infty \Rightarrow \psi \to 0$



$$n\frac{\lambda_{\text{эфф}}}{2} = 2a$$

$$E_n = \frac{\pi^2\hbar^2 n^2}{8ma^2}$$

При $E_n < U$

Тема 2. Уравнение Шрёдингера 1926 г.

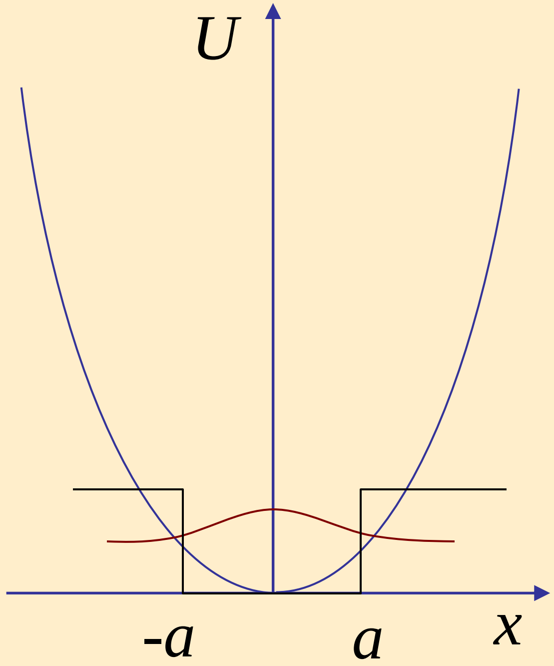
- 2.5. Потенциальные ямы конечной глубины
- 2.6. Квантовый гармонический осциллятор

Шрёдингер Эрвин
(12.VIII.1887–4.I.1961)

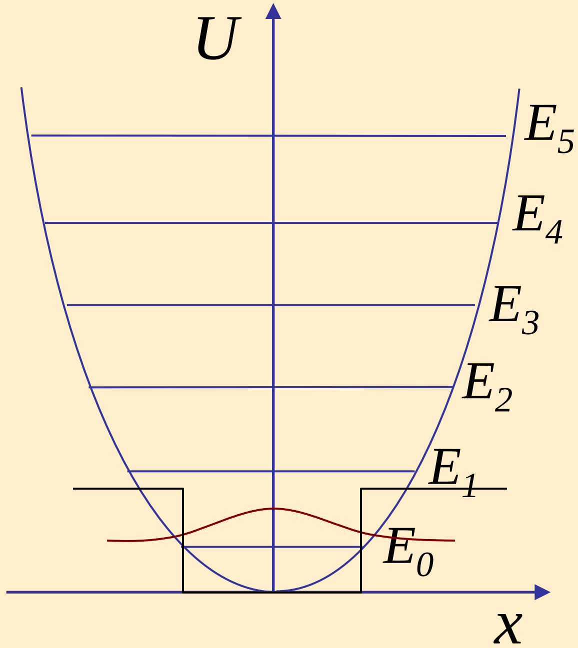
$$F = -kx; \qquad \omega_0 = \sqrt{\frac{k}{m}}$$

$$U = \frac{kx^2}{2}; \quad U = \frac{m\omega_0^2 x^2}{2}$$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E - \frac{m\omega_0^2 x^2}{2}\right)\psi = 0$$



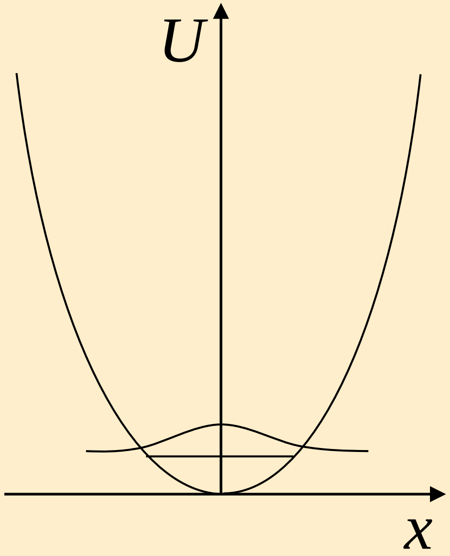
$a = f(n)$!!!



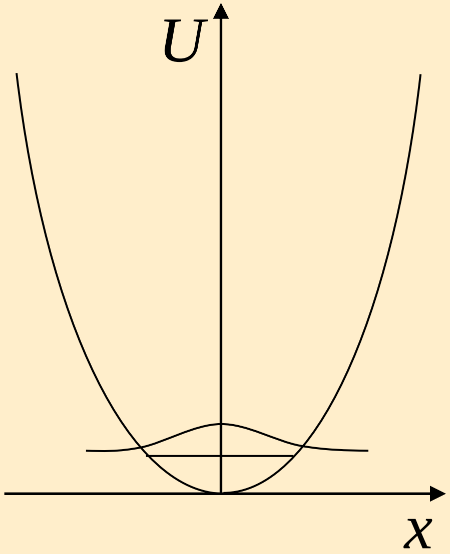
$$E^2 = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2 \omega_0^2}{8} \approx n^2 \hbar^2 \omega_0^2$$

$$\Delta E = \hbar \omega_0$$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2}+\frac{2m}{\hbar^2}\left(E-\frac{m\omega_0^2x^2}{2}\right)\psi=0$$



Ищем решение в виде: $\psi_1 = A_1 e^{-\frac{x^2}{b^2}}$



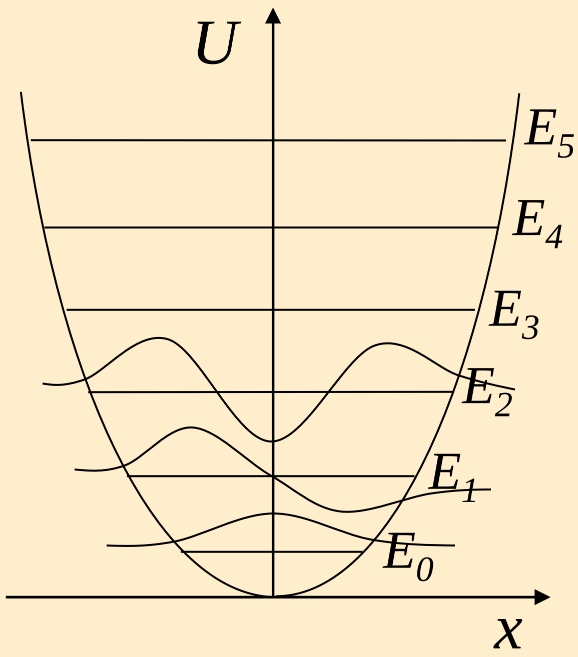
$$\boxed{E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega_0}$$

$$\psi_1 = A_1 e^{-\frac{m\omega_0 x^2}{2\hbar}}$$

$$\Delta E = \hbar\omega_0$$

$$\boxed{E_n = (n - \frac{1}{2})\hbar\omega_0 \qquad (n = 1, 2, 3, ..)}$$

Выводы:



1) $$\boxed{E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega_0}$$

2) $$\Delta E = \hbar\omega_0$$

3) $$\boxed{E_n = (n - \frac{1}{2})\hbar\omega_0 \qquad (n = 1, 2, 3, ..)}$$

4) Правило отбора: $\Delta n = \pm 1$

5) $$\varepsilon_{ф} = \hbar\omega_0$$