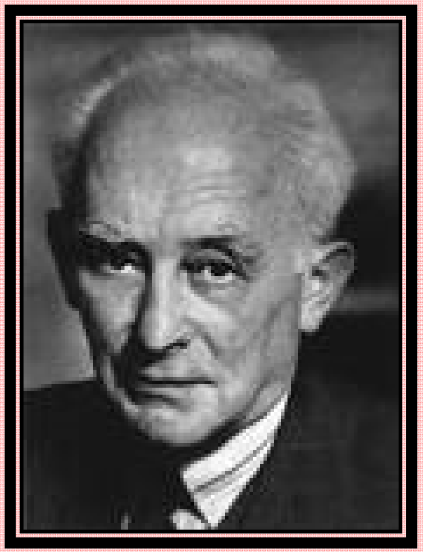
4.Волновая функция.
Физический смысл волновой функции.
Свойства волновой функции.



Макс Борн
(*1882-1970)*

Выше были рассмотрены необычные свойства объектов микромира.

N – плотность потока микрочастиц.

dW – вероятность обнаружить фотон, электрон или др. объект микромира в пределах объема dV, заключающего в себе рассматриваемую точку пространства (например, на экране).

$$dW \sim N\,dV$$

С волновой точки зрения для **фотонов**:

$$N \sim I \sim A^2$$

A - амплитуда световой волны (λ)

$$N \sim A^2$$

С волновой точки зрения для **электронов**:

A - амплитуда волны де Бройля $(\lambda_Б)$; амплитуда вероятности; **волновая функция**.

$$dW \sim A^2 dV$$

Плотность вероятности

$$w = \frac{dW}{dV} \sim N \sim A^2$$

$$w \sim A^2$$

Квадрат амплитуды волны определяет плотность вероятности того, что фотон, электрон или др. объект микромира будет обнаружен в рассматриваемой точке пространства.

Основные постулаты квантовой механики.

Основной элемент для описания состояния микрочастицы в квантовой системе является **волновая функция** (амплитуда вероятности или пси-функция).

$$\boxed{\Psi(x,y,z,t)}$$

Комплексная функция координат и времени

Вероятность обнаружения частицы в объеме dV вблизи точки с координатами x,y,z в момент времени t

$$\boxed{dW(x,y,z,t) = A\left|\Psi(x,y,z,t)\right|^2 dV = A\Psi\Psi^* dV}$$

A – коэф-т пропорциональности

Условие нормировки (вероятность того, что частица находится в одной из точек рассматриваемого пространства)

$$\boxed{\int_V dW(x,y,z,t) = A\int_V \Psi\Psi^* dV = 1}$$

Ψ и $A\Psi$

Описывают одно и то же состояние частицы (см. ниже)…

$$\boxed{\int_V \Psi\Psi^* dV = 1}$$

Ψ -называется **нормированной** функцией

Для нормированной функции:

$$dW(x,y,z,t) = \left|\Psi(x,y,z,t)\right|^2 dV = \Psi\Psi^* dV$$

Плотность вероятности

$$w(x,y,z,t) = \frac{dW}{dV} = \left|\Psi(x,y,z,t)\right|^2$$

Физический смысл волновой функции

Квадрат модуля волновой функции равен плотности вероятности нахождения частицы в соответствующем месте пространства

Свойства волновой функции

1. Однозначная…
2. Непрерывная…
3. Конечная…
4. Имеет непрерывные и конечные производные…

5.Уравнение Шредингера. Стационарное уравнение Шредингера.

Эрвин Шредингер
(1887-1961)

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

1. Волновая функция свободно летящей частицы.

Рассмотрим частицу, свободно движущуюся вдоль оси ОХ. Сопоставим ей плоскую волну:

$$\Psi = ae^{-i(\omega t - kx)}$$

$$\begin{cases} \lambda_Б = \dfrac{2\pi\hbar}{p} \Rightarrow k = \dfrac{2\pi}{\lambda_Б} = \dfrac{p}{\hbar} \\ E = \hbar\omega \Rightarrow \omega = \dfrac{E}{\hbar} \end{cases}$$

$$\Psi(x,t) = ae^{\frac{i}{\hbar}(px - Et)}$$

$$|\Psi(x,t)|^2 = \Psi \cdot \Psi^* = a^2 = const$$

Частица не локализована…

$$\Delta p_x = 0\,;\ \Delta x = \infty$$

Вероятность обнаружить частицу в любом месте оси ох одинакова.

Согласуется с пр.неопределенности Гейзенберга

2. Уравнение Шредингера.

Вероятные рассуждения Шредингера в 1926 г.:

$$\Psi(x,t)=ae^{\frac{i}{\hbar}(px-Et)}$$

$$\frac{\partial\Psi}{\partial t}=-\frac{i}{\hbar}E\Psi\Rightarrow E=\frac{1}{\Psi}i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}$$

$$\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}=\left(\frac{i}{\hbar}\right)^2p^2\Psi\Rightarrow p^2=-\frac{1}{\Psi}\hbar^2\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}$$

Кин. эн-ия ч-цы

Полн.эн-ия ч-цы

Пот.эн-ия ч-цы

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

$$\Downarrow$$

$$\frac{p^2}{2m}=\underbrace{-\frac{1}{\Psi}\cdot\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}=\frac{1}{\Psi}i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}-U}$$

$$\Downarrow$$

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

$$\Leftarrow$$

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

Обобщение для $\Psi(x,y,z,t)\rightarrow$

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

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

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

Оператор Лапласа

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

Ур-ие Шредингера *– дифференциальное ур-ие 2-го порядка в частных производных – основное ур-ие нерелятивисткой квантовой механики.*
Не выводится…
Служит для определения волновой функции (пси-функции) с точностью до множителя

$Ce^{i\alpha}$ *, где*

C и α *- любые действительные числа.*

Начальные и граничные условия, однозначность и непрерывность пси-функции и ее производных плюс условие нормировки образуют совокупность стандартных условий для решения ур-ия Шредингера.

3. Стационарное уравнение Шредингера.

Если силовое поле, в котором движется частица, стационарно, т.е. не зависит от времени, то решение ур-ия Шредингера ищут в виде:

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

$\psi(x,y,z)$ - Координатная часть волновой функции

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

E - Полная энергия частицы

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

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

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

⇦ **Стационарное уравнение Шредингера.**

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

Не зависит от времени

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

*Уравнение Шредингера имеет решения при определенных значениях E – **«собственные значения».***

$$E_n$$

*«Собственным значениям» соответствуют **«собственные функции»,** характерные для определенного состояния частицы (квантово-механической системы).*

$$\psi_n$$

*Квадрат модуля «собственной функции» определяет **вероятность** этого состояния.*