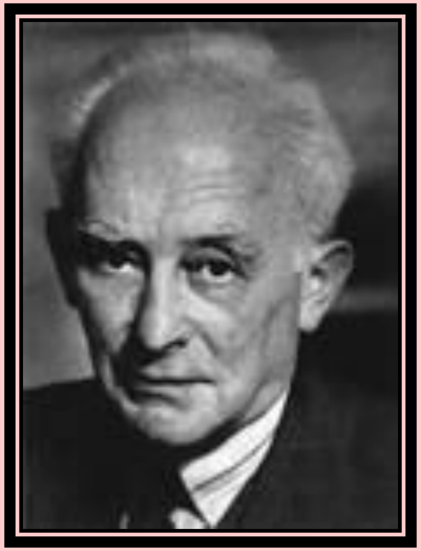
3.Волновая функция. Физический смысл волновой функции. Свойства волновой функции.



Макс Борн
(*1882-1970)*

Основные постулаты квантовой механики.

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

$$\Psi(x,y,z,t)$$

Комплексная функция координат и времени

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

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

A – коэф-т пропорциональности

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

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

Ψ *и* $A\Psi$

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

$$\int_V \Psi\Psi^* dV = 1$$

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…

Волновая функция свободно летящей частицы.

Рассмотрим «частицу» свободно движущуюся вдоль оси ОХ.
E – энергия «частицы»;
p – импульс «частицы».

Сопоставим «частице» плоскую волну:
ω - частота «волны»;
k - волновое число

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

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

$$\lambda_{Б} = \frac{2\pi\hbar}{p} \Rightarrow k = \frac{2\pi}{\lambda_{Б}} = \frac{p}{\hbar}$$

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

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

Частица не локализована…

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

Вероятность обнаружить частицу в любом месте оси ох одинакова.

Согласуется с пр. неопределенности Гейзенберга

4.Уравнение Шредингера. Стационарное уравнение Шредингера.

Эрвин Шредингер
(1887-1961)

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

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

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

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

, где $Ce^{i\alpha}$

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*

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

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

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

Стационарное уравнение Шредингера.

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

Не зависит от времени

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

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

$$\boxed{E_n}$$

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

$$\boxed{\psi_n}$$

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