



AKADEMIA GÓRNICZO-HUTNICZA
IM. STANISŁAWA STASZICA W KRAKOWIE

Sformułowanie Schrödingera mechaniki kwantowej

Wprowadzenie

Postać funkcji falowej dla fali de Broglie'a

$$\psi(x, t) = \sin 2\pi\left(\frac{x}{\lambda} - \nu t\right) = \sin(kx - \omega t) \quad (1)$$

Jest to przypadek jednowymiarowy

Postać ta została określona metodą zgadywania. Wykorzystano twierdzenie:

Cząstka swobodna ma stały pęd \vec{p} , gdyż nie działa na nią żadna siła. Długość fali stowarzyszonej z cząstką λ

$$\lambda = \frac{h}{p}$$

R. Eisberg, R. Resnick „Fizyka kwantowa”

Wprowadzenie

Równanie (1) jest znaną postacią fali bieżącej o stałej długości λ . Fala ta ma także stałą częstotliwość ν , której wartość otrzymuje się ze związku Einsteina $\nu = E/h$ gdzie E jest energią całkowitą stowarzyszonej z falą cząstki.

Równanie falowe dla struny można wyprowadzić z równania Newtona, równanie falowe dla fal elektromagnetycznych można wyprowadzić z równań Maxwella. Nie należy oczekiwać, by kwantowe równanie falowe otrzymać równań mechaniki klasycznej. Można sądzić, że będą pomocne postulaty de Broglie'a i Einsteina:

$$\lambda = \frac{h}{p} \qquad E = h\nu \Rightarrow \nu = \frac{E}{h}$$

Wprowadzenie

Poszukiwane równanie kwantowe musi spełniać następujące założenia:

1. Równanie musi być zgodne z postulatami de Broglie'a i Einsteina
2. Równanie musi być zgodne ze związkem na całkowitą energię:

$$E = \frac{p^2}{2m} + V$$

pomija się energię spoczynkową

3. Równanie musi być liniowe względem $\psi(x,t)$ czyli jeżeli $\psi_1(x,t)$ oraz $\psi_2(x,t)$ są dwoma rozwiązaniami odpowiadającymi tej samej energii potencjalnej, wówczas dowolna kombinacja liniowa $\psi(x,t) = c_1\psi_1(x,t) + c_2\psi_2(x,t)$ jest też rozwiązaniem.

Wprowadzenie

Kombinacja nazywa się **liniową**, gdyż zawiera pierwsze potęgi funkcji.

$$\psi(\vec{r}, t) = c_1\psi_1(\vec{r}, t) + c_2\psi_2(\vec{r}, t)$$

Kombinacja jest **dowolna**, gdyż stałe c_1 i c_2 mogą przyjmować dowolne wartości; mogą być nawet zespolone.

Żądanie liniowości zapewnia, że będziemy mogli dodawać do siebie funkcje falowe tworząc charakterystyczną dla fal interferencję konstruktywną i destruktywną.

Interferencja fal materii

$c_1\psi_1(\vec{r}, t)$ funkcja falowa elektronu, który przeszedł przez szczelinę 1

$c_2\psi_2(\vec{r}, t)$ funkcja falowa elektronu, który przeszedł przez szczelinę 2

Funkcja falowa elektronu na ekranie dostatecznie daleko od układu szczelin jest **sumą** tych dwóch funkcji.

Kwadrat tej sumy, który jest związany z **prawdopodobieństwem znalezienia elektronu**, zawiera **człony interferencyjne** potrzebne do prawidłowego opisu przejścia nawet pojedynczego elektronu przez układ dwóch szczelin.

Funkcja falowa $\psi(\vec{r}, t)$ może być funkcją **zespoloną**

$$\psi(\vec{r}, t) = R(\vec{r}, t) \exp[iS(\vec{r}, t)]$$

Interferencja fal materii

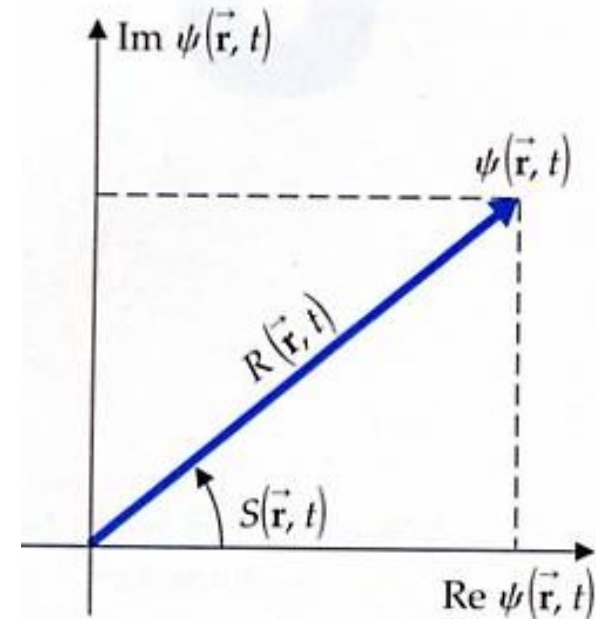
$$\psi(\vec{r}, t) = R(\vec{r}, t) \exp[iS(\vec{r}, t)]$$

część rzeczywista (moduł)
funkcji falowej

część urojona (faza)
funkcji falowej

$$\psi^*(\vec{r}, t) = R(\vec{r}, t) \exp[-iS(\vec{r}, t)]$$

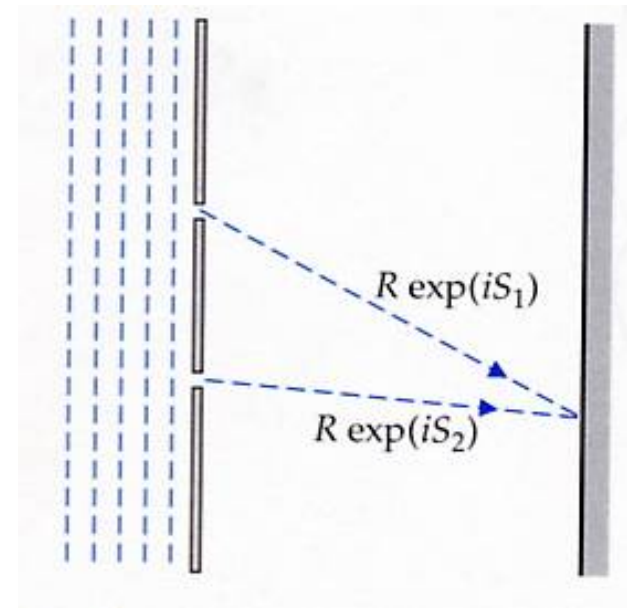
sprzężenie zespolone funkcji falowej



$$\psi(\vec{r}, t)\psi^*(\vec{r}, t) = |\psi(\vec{r}, t)|^2 = [R(\vec{r}, t)]^2$$

Interferencja fal materii

Przykład: Funkcja falowa w punkcie x na ekranie dla elektronu, który przeszedł przez szczelinę 1 wynosi $R(x)\exp(iS_1(x))$. Funkcja falowa w tym samym punkcie ekranu dla elektronu, który przeszedł przez szczelinę oznaczoną 2 wynosi $R(x)\exp(iS_2(x))$. Funkcje $R(x)$, $S_1(x)$ i $S_2(x)$ są rzeczywiste. Pokazać, że gdy obie szczeliny są otwarte, kwadrat modułu funkcji falowej na ekranie ma cechy obrazu interferencyjnego.



$$\psi(x) = R(x) \exp[iS_1(x)] + R(x) \exp[iS_2(x)]$$

Interferencja fal materii

Rozwiązanie: Gdy otwarte są obie szczeliny, to funkcja falowa na ekranie ma postać:

$$\psi(x) = R(x) \exp[iS_1(x)] + R(x) \exp[iS_2(x)]$$

Stąd, kwadrat modułu wynosi:

$$|\psi(x)|^2 = |R(x)|^2 [\exp(iS_1) + \exp(iS_2)][\exp(-iS_1) + \exp(-iS_2)]$$

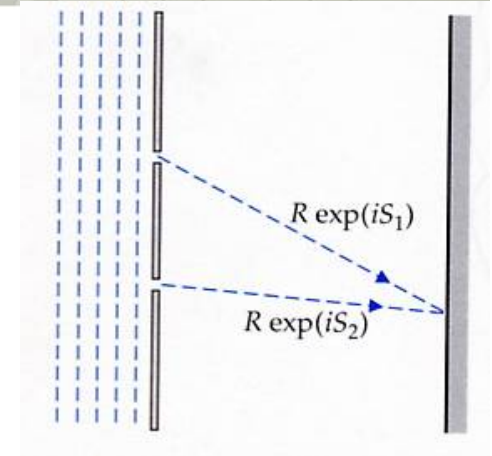
$$|\psi(x)|^2 = 2|R(x)|^2 [1 + \cos(S_1 - S_2)]$$

Interferencja fal materii

Rozwiązanie:

Kwadrat modułu w punkcie x na ekranie wynosi:

$$|\psi(x)|^2 = 2|R(x)|^2 [1 + \cos(S_1 - S_2)]$$



Różnica faz $S_1 - S_2$ zmienia się z położeniem, stąd:

$$0 \leq |\psi(x)|^2 \leq 4|R(x)|^2$$

W ten sposób powstaje standardowy obraz interferencyjny z obszarami osłabienia (interferencja destruktywna) i wzmocnienia (interferencja konstruktywna).

Równanie Schrödingera

Energia potencjalna, przedstawiona dla przypadku ogólnego jako: $V=V(x,t)$, musi być wielkością stałą, niezależną od czasu $V=const$. Dla cząstki swobodnej $V=0$ i wówczas fala stowarzyszona ma stałą częstotliwość ν oraz długość λ .

Energia kinetyczna z uwzględnieniem hipotezy de Broglie'a:

$$E_K = \frac{p^2}{2m} = \frac{h^2}{2m\lambda^2}$$

Całkowita energia E:

$$E = E_k + V = \frac{p^2}{2m} + V$$

Równanie Schrödingera

Wykorzystujemy związki:

$$\omega = 2\pi\nu \quad k = \frac{2\pi}{\lambda} \quad \hbar = \frac{h}{2\pi}$$

i wówczas całkowita energia może być zapisana równaniem:

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + V = \hbar\omega$$

Szukane dla funkcji falowej równanie ma postać:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta\Psi(r,t) + V(r,t)\Psi(r,t) = i\hbar \frac{\partial\Psi(r,t)}{\partial t}$$

Jest to **równanie Schrödingera**

Równanie Schrödingera



1887-1961

Fale materii są opisywane równaniem Schrödingera zaproponowanym w 1926 przez fizyka austriackiego **Erwina Schrödingera**

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\vec{r}, t) + V(\vec{r}) \psi(\vec{r}, t)$$

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

$V(\vec{r})$ potencjał

operator Laplace'a (laplasjan)

$\psi(\vec{r}, t)$ funkcja falowa cząstki

m – masa cząstki

Równanie Schrödingera



1887-1961

Najczęściej używamy **jednowymiarowej** postaci równania Schrödingera:

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x,t) + V(x)\psi(x,t)$$

lub:

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} = \underbrace{\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right]}_{\text{Hamiltonian}} \psi(x,t)$$

Hamiltonian jest operatorem działającym na funkcję falową. Wartości własne tego operatora reprezentują energię zgodnie z klasyczną formułą:

$$E = \frac{p^2}{2m} + V(x)$$

Funkcja falowa i jej interpretacja probabilistyczna



1882-1970

W 1926, niemiecki fizyk teoretyk **Max Born** zaproponował interpretację funkcji falowej $\psi(\vec{r}, t)$ wprowadzonej przez Schrödingera.

Interpretacja ta polega na tym, że wyrażenie

$$|\psi(\vec{r}, t)|^2 d^3\vec{r}$$

jest miarą **prawdopodobieństwa** znalezienia elektronu w chwili t w sześciennym pudełku o objętości $d^3\vec{r}$ wokół punktu \vec{r}

Wyniki eksperymentu z dwoma szczelinami można interpretować jako zwiększone (interferencja konstruktywna) lub zmniejszone (interferencja destruktywna) **prawdopodobieństwo** dotarcia elektronu do pewnego otoczenia punktu na ekranie.

Funkcja falowa i jej interpretacja probabilistyczna

Ze względu na to, że w danej chwili czasu, znalezienia elektronu gdziekolwiek w przestrzeni jest zdarzeniem pewnym, z interpretacji Borna wynika, że:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(\vec{r}, t)|^2 d^3\vec{r} = 1$$

normalizacja

Funkcje falowe stosowane do opisu „cząstek” takich jak elektrony to „**fale prawdopodobieństwa**”. Tam gdzie amplituda funkcji falowej jest mała, prawdopodobieństwo znalezienia cząstki jest małe. Funkcje falowe mają fazy co pozwala im interferować jak wszystkim innym falom.

Funkcja falowa -własności

Funkcja falowa $\psi(\vec{r}, t)$ lub $\psi(x, t)$

musi spełniać następujące warunki:

1. Jest klasy C1 (funkcja i jej pierwsze pochodne są ciągłe)

2. Jest jednoznaczna

3. $\rho(x, t) = \Psi^*(x, t)\Psi(x, t) = |\Psi(x, t)|^2$

oznacza gęstość prawdopodobieństwa (na jednostkę długości x) znalezienia cząstki w pobliżu punktu o współrzędnej x w danej chwili czasu

Stacjonarne równanie Schrödingera-niezależne od czasu

Przyjmując, że energia potencjalna $V(x)$ nie zależy w sposób jawny od czasu t można rozwiązać jednowymiarowe równanie Schrödingera przez separację zmiennych i otrzymać tzw. **niezależne od czasu równanie Schrödingera**

Takie ograniczenie nie jest zbyt drastyczne, gdyż w mechanice kwantowej oraz klasycznej potencjał dla większości układów nie zależy od czasu.

Ta metoda zakłada, że funkcja falowa może być zapisana jako iloczyn dwóch funkcji: $\Theta(t)$ zależnej tylko od czasu t i $\varphi(x)$ zależnej tylko od położenia x :

$$\psi(x, t) = \varphi(x)\Theta(t)$$

Metoda ta prowadzi do zastąpienia cząstkowego równania różniczkowego zbiorem zwyczajnych równań różniczkowych.

Stacjonarne równanie Schrödingera-niezależne od czasu

Równanie Schrödingera przyjmuje postać:

$$i\hbar\varphi(x)\frac{d\Theta(t)}{dt} = \Theta(t)\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\varphi(x) + V(x)\varphi(x)\right)$$

Dzieląc przez $\varphi(x)\Theta(t)$, otrzymujemy

$$i\hbar\frac{1}{\Theta(t)}\frac{d\Theta(t)}{dt} = \frac{1}{\varphi(x)}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\varphi(x) + V(x)\varphi(x)\right)$$

Obie strony tego równania zależą od całkowicie niezależnych zmiennych: lewa strona od x a prawa od t . Jedynym sposobem, aby to równanie było spełnione dla każdej chwili czasu i każdego położenia jest aby każda ze stron była równa stałej (niezależnej od x i t) tej samej dla obu stron. Nosi ona nazwę **stałej separacji** i oznaczamy ją symbolem E . Stała ta będzie miała znaczenie fizyczne (jest to energia cząstki) ale na tym etapie jeszcze nie można nadać jej takiej interpretacji.

Stacjonarne równanie Schrödingera-niezależne od czasu

Otrzymujemy dwa niezależne równania:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \varphi(x) + V(x)\varphi(x) = E\varphi(x)$$

To równanie jest tzw. **niezależnym od czasu równaniem Schrödingera**. Można je rozwiązać jeśli znana jest postać $V(x)$.

Drugie równanie:

$$i\hbar \frac{d\Theta(t)}{dt} = E\Theta(t)$$

jest prostym zwyczajnym równaniem różniczkowym pierwszego rzędu i możemy zaproponować proste rozwiązanie standardowe w postaci

$$\Theta(t) = \exp(\alpha t)$$

Interpretacja stałej separacji

Podstawiamy: $\Theta(t) = \exp(\alpha t)$ do równania:

$$i\hbar \frac{d\Theta(t)}{dt} = E\Theta(t)$$

i otrzymujemy: $i\hbar \alpha \exp(\alpha t) = E \exp(\alpha t) \Rightarrow \alpha = \frac{E}{i\hbar} = -i \frac{E}{\hbar}$

Ostatecznie, rozwiązanie ma postać: $\Theta(t) = \exp\left(-\frac{iE}{\hbar}t\right)$

$$\Theta(t) = \cos\left(\frac{E}{\hbar}t\right) - i \sin\left(\frac{E}{\hbar}t\right)$$

i jest funkcją oscylującą z częstością $\frac{E}{\hbar}$

A zatem zgodnie z postulatem Einsteina $E = \hbar\omega$ stała E jest to energia całkowita cząstki i jej jednostką jest 1J

Problem własny

Rozwiązaniem niezależnego od czasu jest :

$$\psi(x, t) = \varphi_E(x) \exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right)$$

Możemy zapisać:

$$\hat{H}\varphi_E(x) = E\varphi_E(x)$$

Hamiltonian, operator \hat{H}

$\varphi_E(x)$ jest funkcją własną operatora Hamiltona, E jest odpowiadającą mu wartością własną

Problem rozwiązania równania Schrödingera sprowadza się do znalezienia funkcji własnych i wartości własnych Hamiltonianu.

Fala płaska jako rozwiązanie równania Schrödingera dla cząstki swobodnej

Cząstka swobodna $V(x)=0$, przypadek jednowymiarowy.

Zgodnie z mechaniką klasyczną cząstka swobodna porusza się ze stałym pędem lub jest w spoczynku.

W obu przypadkach jej całkowita energia E jest stała.

Równanie Schrödingera dla takiego zagadnienia ma postać:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \varphi(x)}{dx^2} = E \varphi(x)$$

Szukamy rozwiązania w postaci:

$$\varphi(x) = A \exp(\alpha x)$$



Fala płaska jako rozwiązanie równania Schrödingera dla cząstki swobodnej

Po wstawieniu propozycji $\varphi(x)$ do równania różniczkowego otrzymujemy:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\alpha^2 = E \Rightarrow \alpha = \pm i\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

a ponieważ:

$$\varphi(x) = A \exp(\alpha x)$$

to:

$$\varphi(x) = A \exp\left(i\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}x\right) + B \exp\left(-i\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}x\right)$$

Fala płaska jako rozwiązanie równania Schrödingera dla cząstki swobodnej

np. dla rozwiązania „+” mamy:

$$\varphi(x) = A \exp\left(i \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} x\right)$$

$$\varphi(x) = A \left[\cos\left(\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} x\right) + i \sin\left(\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} x\right) \right]$$

Korzystamy z zależności: $\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} = \frac{p}{\hbar} = k$

Otrzymujemy:

$$\varphi(x) = A(\cos kx + i \sin kx)$$

Fala płaska jako rozwiązanie równania Schrödingera dla cząstki swobodnej

Rozwiązanie dla równania Schrödingera zależnego od czasu ma postać:

$$\Psi(x, t) = \varphi(x) \exp\left(-i \frac{E}{\hbar} t\right)$$

lub zgodnie z postulatem Einsteina: $\frac{E}{\hbar} = \omega$

rozwiązanie jest w postaci:

$$\Psi(x, t) = \varphi(x) \exp(-i \omega t)$$

Fala płaska jako rozwiązanie równania Schrödingera dla cząstki swobodnej

Korzystając ze znanego rozwiązania równania stacjonarnego w postaci:

$$\varphi(x) = A \exp(ikx)$$

otrzymujemy:

$$\Psi(x, t) = A \exp[i(kx - \omega t)]$$

lub: $\Psi(x, t) = A \cos(kx - \omega t) + iA \sin(kx - \omega t)$

Jest to równanie fali bieżącej

Fala płaska jako rozwiązanie równania Schrödingera

Falę płaską można zapisać, jako:

$$\psi(x, t) = A[\cos(kx - \omega t) + i \sin(kx - \omega t)]$$

$$\psi(x, t) = A \exp[i(kx - \omega t)]$$

lub:

$$\psi(x, t) = A \exp\left[\frac{i(px - Et)}{\hbar}\right]$$

gdzie:

$$k = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{p}{\hbar}$$

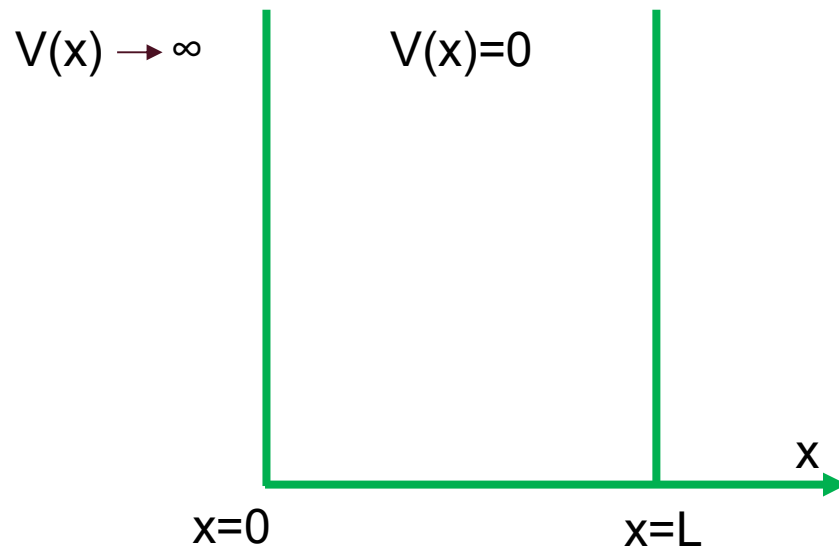
k jest liczbą falową

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

ω jest częstością (pulsacją)

Nieskończona studnia potencjału

Nieskończenie duży potencjał na krawędziach studni nie pozwala elektronom opuścić obszaru $0 < x < L$; w tym obszarze elektron jest swobodny.



Potencjał wynosi zero wewnątrz i zmierza do nieskończoności na zewnątrz studni

$\varphi(x)=0$ na zewnątrz studni, gęstość prawdopodobieństwa znalezienia elektronu wynosi zero

W obszarze wewnątrz studni, tj. dla $0 < x < L$, niezależne od czasu równanie Schrödingera ma postać:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \varphi(x) = E \varphi(x)$$

Warunki brzegowe:

$$\varphi(0) = \varphi(L) = 0$$

Nieskończona studnia potencjału

Proponowane rozwiązanie:

$$\varphi_E(x) = A \sin(kx)$$

A jest stałą

Jest to rozwiązanie o ile:

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

Stosując warunki brzegowe: dla $x=L$, $\varphi_E=0$

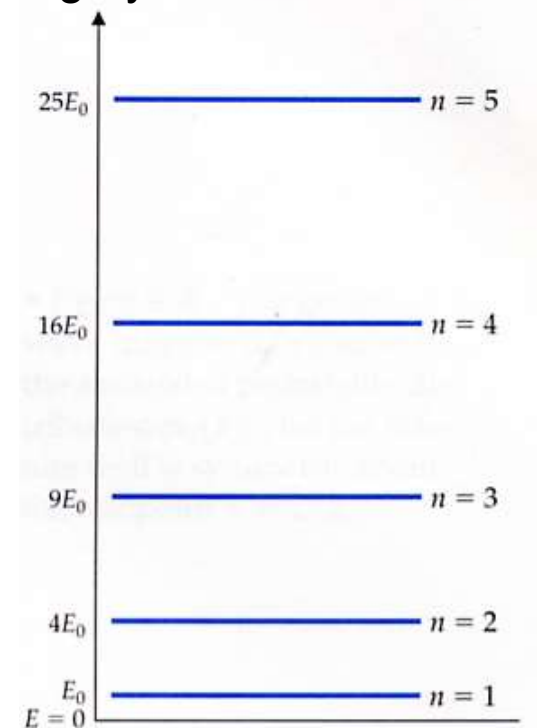
Stąd: $\sin(kL) = 0 \implies kL = n\pi$ dla $n=1,2,\dots$

Energia elektronu przyjmuje tylko wartości dyskretne

Energia jest skwantowana

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi n}{L} \right)^2$$

dyskretne poziomy energetyczne

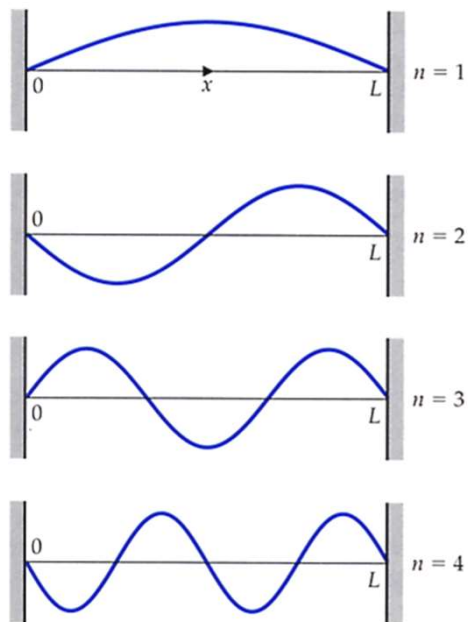


Nieskończona studnia potencjału

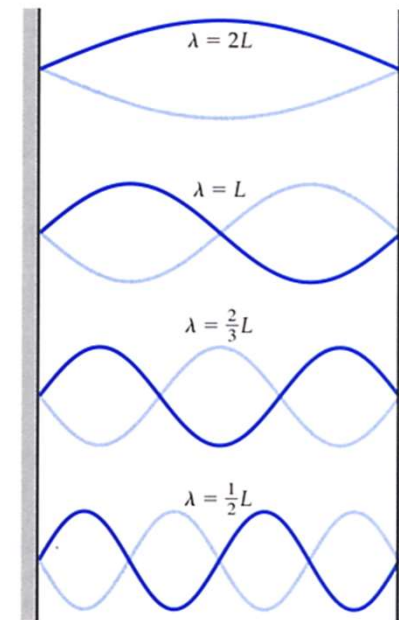
Rozwiązania

$$u_n(x) = A \sin\left(\frac{n\pi}{L} x\right)$$

odpowiadają falom stojącym z różną liczbą n węzłów wewnątrz studni



Funkcje własne $\varphi_n(x)$ dla nieskończonej studni



Dozwolone mody drgań dla klasycznej struny z węzłami na końcach