Волновая функция

Наличие у частицы волновых свойств приводит к тому, что в квантовой физике ей сопоставляется волновая функция $\Psi(x,y,z,t)$.

Физический смысл волновой функции. Величина $|\Psi\ (x,y,z,t)|^2 dV$ пропорциональна вероятности того, что частица будет обнаружена в момент времени t в объеме dV в окрестности точки (x,y,z).

Волновая функция системы невзаимодействующих частиц $\Psi\ (r_1,r_2,...r_n,t)$ связана с одночастичными волновыми функциями $\Psi_i(r_i,t)$ соотношением

$$\Psi\ (r_1,r_2,...r_n,t) = \Psi_1(r_1,t) \cdot \Psi_2(r_2,t) \cdot ... \Psi_n(r_n,t).$$

Свободное движение частицы

Волновая функция свободно движущейся частицы с энергией E и импульсом p имеет вид

$$\Psi\ (r,t) = A\exp[i(kr - \omega t)] = A\exp[i(pr - Et)/\hbar\ ]\ .$$

Константа A может быть найдена из условия нормировки волновой функции

$$A = (2\pi\hbar\ )^{-3/2}.$$

Т.е. в тех случаях, когда частица находится в области пространства, где действующие на нее силы равны нулю (свободное движение), энергия частицы может принимать любые значения. Энергетический спектр свободно движущейся частицы непрерывный.

Частица в прямоугольной яме с бесконечными стенками

Если область пространства, в которой может находится частица, ограничена, возникает дискретный спектр энергий. Рассмотрим это на примере одномерной прямоугольной ямы с бесконечными стенками

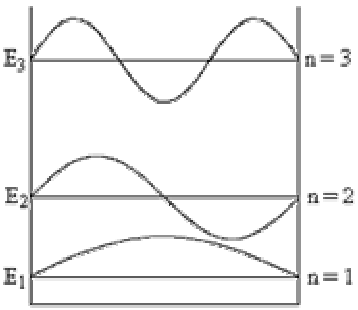
$$V(x) = \begin{cases} 0 & при\ 0 \le x \le a \\ \infty & при\ 0 > x > a \end{cases}$$

Частица всегда находится в области $0 \le x \le a$. Вне ее $\Psi = 0$. Запишем уравнение Шредингера для одномерного случая

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} = -\frac{2mE}{\hbar}\Psi \qquad (1)$$

Его решение

$$\Psi = A\sin kx + B\cos kx, \qquad (2)$$



где $k = (2mE/\hbar^2)^{1/2}$. Из граничных условий и условий непрерывности имеем

$$A\sin ka = 0. \qquad (3)$$

Из (3) получим

$$ka = n\pi,\ n=1,\ 2,\ ..., \qquad (4)$$

т.е. внутри ямы устанавливаются стоячие волны, а энергия состояний принимает дискретные значения

$$E_n = p^2/2m = \hbar\, k^2/2m = \hbar^2\pi^2 n^2/(2ma^2). \qquad (5)$$

Энергии состояний растут квадратично от n.

Каждому значению энергии соответствует волновая функция, которую с учетом условия нормировки

$$\int_0^a |\Psi(x)|^2 dx = \int_0^a \left|A\sin\frac{n\pi}{a}\right|^2 dx = 1, \qquad (6)$$

можно записать в виде

$$\Psi_n = (2/a)^{1/2}\sin\ (n\pi x/a) \qquad (7)$$

(см. рис.1). В отличие от классической частицы, квантовая частица в прямоугольной яме не может иметь энергию $E < \hbar^2\pi^2/(2ma^2)$.

Частица в потенциале гармонического осциллятора

Потенциал гармонического осциллятора (так же, как и в предыдущем примере рассмотрим одномерный случай)

$$\Psi_n = kx^2/2 = m\omega_0 x^2/2. \qquad (8)$$

где $\omega_0 = (k/m)^{1/2}$ - собственная частота колебаний гармонического осциллятора. Решение уравнения Шредингера для этого потенциала можно записать в виде

$$\Psi_n = h_n(x)e^{-b(x)}, \qquad (9)$$

где $h_n(x)$ - полиномы степени n, $b(x) = (km)^{1/2}x^2/2\hbar$. Спектр значений энергий имеет вид

$$E_n = \hbar\,\omega_0(n + 1/2),\ \ n = 0,\ 1,\ .. \qquad (10)$$

Энергетический спектр гармонического осциллятора эквидистантный - уровни находятся на одинаковом расстоянии друг от друга.