3. При движении вдоль оси x скорость определяется с точностью до 1 см/с. Определить неопределенность координаты: 1) для электрона, 2) для дробинки массой 0,1 г.

Ответ: 1) Δx = 1,15 см, 2) $\Delta x = 10^{-26}$ см.

4. Используя соотношение неопределенностей, оценить ширину одномерного потенциального ящика, в котором минимальная энергия электрона равна 10 эВ.

Ответ: l = 0,123 нм.

5. Электрон с кинетической энергией T = 15 эВ находится в металлической пылинке диаметром d = 1 мкм. Определить относительную неточность $\frac{\Delta\upsilon}{\upsilon}$, с которой может быть определена скорость электрона.

Ответ: $\frac{\Delta\upsilon}{\upsilon} = 1\cdot 10^{-4}$.

6. Сравнить неопределенность при измерении скорости электрона атома водорода с величиной его скорости на первой боровской орбите.

Ответ: $\Delta\upsilon = \upsilon$.

Занятие № 11

Тема: **Уравнение Шредингера.**

Краткая теория

Основное уравнение нерелятивистской квантовой механики сформулировано Э. Шредингером и носит его имя. Уравнение Шредингера, зависящее от времени, имеет вид

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

где $\hbar = \frac{h}{2\pi}$, m – масса частицы, Δ – оператор Лапласа $\left(\Delta\psi = \frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}\right)$, i – мнимая единица $\left(i^2 = -1\right)$, $U(x, y, z, t)$ – потенциальная энергия частицы в силовом поле, в котором она движется, $\psi(x, y, z, t)$ – искомая волновая функция частицы, описывающая ее состояние.

Одномерное уравнение Шредингера для стационарных состояний:

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

где E – полная энергия частицы, $U(x)$ – потенциальная энергия, $\psi(x)$ – координатная (или амплитудная) часть волновой функции.

Волновая функция, описывающая одномерное движение свободной частицы:

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

где A – амплитуда волны де Бройля, p – импульс частицы, E – энергия частицы.

Уравнение Шредингера справедливо для любой частицы, движущейся с малой (по сравнению со скоростью света) скоростью $\upsilon << c$. На волновую функцию ψ накладываются условия: 1) волновая функция должна быть конечной, однозначной и непрерывной, 2) производные $\frac{\partial\psi}{\partial x}$, $\frac{\partial\psi}{\partial y}$, $\frac{\partial\psi}{\partial z}$, $\frac{\partial\psi}{\partial t}$ должны быть непрерывны, 3) функция $|\psi|^2$ должна быть интегрируема (условие нормировки вероятностей).

Квадрат модуля ψ функции $|\psi|^2$ имеет смысл плотности вероятности, т.е. определяет вероятность нахождения микрочастицы в единичном объеме в окрестности точки с координатами (x, y, z). Таким образом, физический смысл имеет не сама ψ-функция, а квадрат ее модуля $|\psi|^2$, которым задается интенсивность волн де Бройля.

Частица на скачке потенциальной энергии (рис. 11.1).

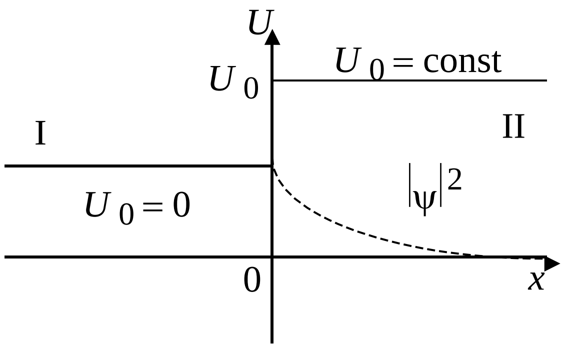

Рис. 11.1

$$U(x)=\begin{cases}0 \text{ при } x<0,\\ U_0=\text{const при } x>0.\end{cases}$$

Уравнение Шредингера для стационарных состояний:

а) в области I ($x<0$):

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{d^2\psi}{dx^2}=E\psi;$$

б) в области II ($x>0$) :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{d^2\psi}{dx^2}+U_0\psi=E\psi\ .$$

Решение уравнения Шредингера (волновая функция)

а) в области I ($x<0$):

$$\psi=A_1e^{ikx}+A_2e^{-ikx},$$

где $k^2=\dfrac{2mE}{\hbar^2}$;

б) в области II ($x>0$) решение уравнения зависит от знака разности ($E-U_0$):

1) если полная энергия частицы E больше потенциальной U_0, то уравнение Шредингера имеет вид:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2}+k^2\psi=0\ ,$$

где $k^2=\dfrac{2m}{\hbar^2}(E-U_0)$, решение качественно аналогично решению для области I;

2) если полная энергия E меньше потенциальной, то уравнение Шредингера имеет вид:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2}-\chi^2\psi=0\ ,$$

где $\chi^2=\dfrac{2m}{\hbar^2}(U_0-E)$.

Волновая функция в области II в случае $E<U_0$ монотонна:

$$\psi=B_1e^{-\chi x}+B_2e^{\chi x}\ .$$

В силу требования конечности волновой функции следует положить $B_2 = 0$.

Плотность вероятности $|\psi|^2$:

а) для области I ($x < 0$):

$$|\psi|^2 = \text{const};$$

б) для области II ($x > 0$) :

1) в случае $E > U_0$:

$$|\psi|^2 = \text{const};$$

2) в случае $E < U_0$ экспоненциально убывает

$$|\psi|^2 = B_1^2 e^{-2\chi x} .$$

Примеры решения задач

Задача 11.1. Электрон находится в бесконечно глубоком одномерном прямоугольном потенциальном ящике шириной *l*. Написать уравнение Шредингера и его решение для области II ($0 \le x \le l$).

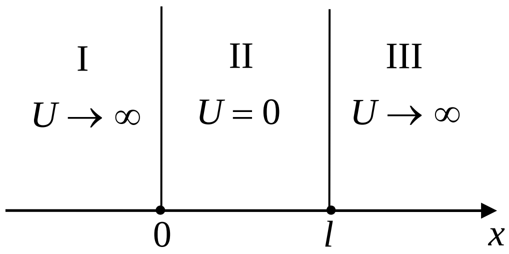

Рис. 11.1

Решение

В области II потенциальная энергия $U = 0$. Одномерное уравнение Шредингера для стационарных состояний при $U = 0$ имеет вид:

$$\psi'(x) + \frac{2m}{\hbar^2} E\psi(x) = 0 .$$

Решение $\psi(x) = C_1 \sin kx + C_2 \cos kx$. Константы C_1 и C_2 определяем следующим образом. На границе «ямы» (при $x = 0$, $x = l$) непрерывная волновая функция должна обращаться в нуль. Граничные условия имеют вид:

$$\psi(0)=\psi(l)=0 .$$

Т.е. $C_2=0$. Тогда $\psi(x)=C_1\sin kx$. Условие $\psi(l)=C_1\sin kl=0$ выполняется при $kl=n\pi$, где n – целые числа, т.е. $k=\frac{n\pi}{l}$.

Постоянную C_1 находим из условия нормировки, которое для данного случая запишется в виде:

$$C_1^2\int_0^l \sin^2\frac{n\pi}{l}x\,dx=1.$$

Делаем преобразования левой части уравнения

$$C_1^2\int_0^l \sin^2\frac{n\pi}{l}x\,dx=C_1^2\int_0^l \frac{1-\cos\frac{2\pi nx}{l}}{2}dx=$$

$$C_1^2\left[\frac{1}{2}x\Big|_0^l-\frac{1}{2}\frac{l}{2n\pi}\sin\frac{2n\pi x}{l}\Big|_0^l\right]=C_1^2\frac{1}{2}l .$$

Получаем

$$C_1^2\frac{1}{2}l=1,$$

отсюда

$$C_1=\sqrt{\frac{2}{l}} .$$

Ответ: $\psi''(x)+\frac{2m}{\hbar^2}E\psi(x)=0$, $\psi(x)=\sqrt{\frac{2}{l}}\sin\frac{n\pi}{l}x$ $(n=1,2,3,...)$.

Задача 11.2. Электрон находится в бесконечно глубоком одномерном прямоугольном потенциальном ящике шириной *l*. Вычислить вероятность того, что электрон, находящийся в возбужденном состоянии (*n* = 2), будет обнаружен в средней трети ящика.

Решение

Дано:	
$n = 2$ $x_1 = \frac{l}{3}$ $x_2 = \frac{2l}{3}$	
$W - ?$	

Вероятность W обнаружить частицу в интервале $x_1 < x < x_2$ определяется равенством:

$$W = \int\limits_{x_1}^{x_2} \left|\psi_n(x)\right|^2 dx,$$

где $\psi_n(x)$ – нормированная собственная волновая функция, отвечающая данному состоянию.

Нормированная собственная волновая функция, описывающая состояние электрона в потенциальном ящике, имеет вид:

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{l}} \sin\frac{n\pi}{l}x.$$

Возбужденному состоянию ($n = 2$) отвечает собственная функция

$$\psi_2(x) = \sqrt{\frac{2}{l}} \sin\frac{2\pi}{l}x.$$

Подставляем $\psi_2(x)$ в подинтегральное выражение для функции W

$$W = \frac{l}{2}\int\limits_{x_1}^{x_2} \sin^2\frac{2\pi}{l}x dx.$$

Согласно условию задачи, $x_1 = \frac{l}{3}$ и $x_2 = \frac{2l}{3}$. Подставим эти пределы интегрирования в выражение для W, произведем замену $\sin^2\frac{2\pi}{l}x = \frac{1}{2}\left(1 - \cos\frac{4\pi}{l}x\right)$ и разобьем интеграл на два:

$$W = \frac{2}{l}\int\limits_{l/3}^{2l/3} \sin^2\frac{2\pi}{l}x dx = \frac{1}{l}\left\{\int\limits_{l/3}^{2l/3} dx - \int\limits_{l/3}^{2l/3} \cos\frac{4\pi}{l}x dx\right\} =$$

$$= \frac{1}{l}\left\{\frac{l}{3} - \frac{l}{4\pi}\sin\frac{4\pi}{l}x\Big|_{l/3}^{2l/3}\right\} = \frac{1}{3} - \frac{1}{4\pi}\left(\sin\frac{8\pi}{3} - \sin\frac{4\pi}{4}\right).$$

Так как $\sin\frac{8\pi}{3} = \sin\frac{\pi}{3}$, а $\sin\frac{4\pi}{3} = -\sin\frac{\pi}{3}$, получим:

$$W=\frac{1}{3}-\frac{1}{4\pi}\left(\sin\frac{\pi}{3}+\sin\frac{\pi}{3}\right)=\frac{1}{3}-\frac{1}{4\pi}\cdot 2\sin\frac{\pi}{3}=\frac{1}{3}-\frac{\sqrt{3}}{4\pi}=0{,}195.$$

Ответ: $W=0{,}195$.

Задача 11.3. Частица находится в возбужденном состоянии (n = 3) в одномерном потенциальном ящике шириной l с абсолютно непроницаемыми стенками ($0<x<l$). Определить вероятность обнаружения частицы в средней трети ящика.

Решение

Дано	
$n = 3$ $x_1=\frac{l}{3}$ $x_2=\frac{2l}{3}$	В одномерном случае вероятность dW обнаружения частицы в интервале dx можно определить по формуле: $$dW=\left|\psi(x)\right|^2 dx\ ,$$
W – ?	

где $\left|\psi(x)\right|^2$ – плотность вероятности.

Вероятность обнаружения частицы в средней трети ящика $\left(l/3<x<2l/3\right)$ выражается через интеграл:

$$W=\int\limits_{l/3}^{2l/3}\left|\psi(x)\right|^2 dx\ .$$

Собственная функция, описывающая возбужденное состояние частицы (n = 3) в потенциальном ящике, имеет вид:

$$\psi(x)=\sqrt{\frac{2}{l}}\sin\frac{3\pi}{l}x\ .$$

Находим искомое значение вероятности W

$$W=\frac{2}{l}\int\limits_{l/3}^{2l/3}\sin^2\frac{3\pi}{l}x\,dx=\frac{2}{l}\int\limits_{l/3}^{2l/3}\frac{1}{2}\left(1-\cos\frac{6\pi x}{l}\right)dx=$$

$$=\frac{1}{l}\left[\frac{l}{3}-\frac{l}{6\pi}(\sin 4\pi-\sin 2\pi)\right]=0{,}33\ .$$

Ответ: W = 0,33.