Уравнение Шредингера, пси-функция, частица в яме

Состояние микрочастицы характеризуется т.н. пси-функцией. Ее вид получается через решение уравнения Шредингера:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi + U\Psi = i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} \tag{1}$$

Если силовое поле, в котором движется частица, стационарно, то U не зависит явно от времени. В этом случае решение уравнения распадается на два множителя:

$$\Psi(x, y, z, t) = \psi(x, y, z)e^{-i\frac{E}{\hbar}t} \tag{2}$$

Подставив это решение в уравнение, получим:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + U\psi = E\psi \tag{3}$$

Это т.н. стационарное уравнение Шредингера. Его часто пишут в виде:

$$\nabla^2\psi + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U)\psi = 0 \tag{4}$$

Квадрат модуля пси-функции определяет вероятность dP того, что частица будет обнаружена в пределах объема dV:

$$dP = A|\Psi|^2 dV = A\Psi\Psi^* dV \tag{5}$$

Решим уравнение Шредингера для частицы, находящейся в одномерной бесконечно глубокой потенциальной яме. Уравнение упрощается следующим образом:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U)\psi = 0 \tag{6}$$

Вероятность обнаружить частицу вне ямы равна нулю. Из условия непрерывности следует, что ψ должна быть равна нулю и на границах ямы:

$$\psi(0) = \psi(l) = 0 \tag{7}$$

Таким образом, уравнение внутри ямы имеет вид:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}E\psi = 0 \tag{8}$$

Вводя обозначение $k^2 = \frac{2m}{\hbar^2}E$, придем к уравнению $\psi'' + k^2\psi = 0$, решение которого имеет вид:

$$\psi(x) = a\sin(kx + \alpha) \tag{9}$$

Из граничных условий следует, что $\alpha = 0$ и $\sin kl = 0$, т.е.

$$kl = \pm\pi n \quad (n = 1, 2, 3, ...) \tag{10}$$

$$E_n = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ml^2}n^2 \tag{11}$$

Легко найти $\psi_n(x)$:

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{l}}\sin\frac{\pi n x}{l} \quad (n = 1, 2, 3, ...) \tag{12}$$

(a находится из нормировки суммы всевозможных вероятностей на единицу).

Для гармонического осциллятора с потенциальной энергией $U = \frac{kx^2}{2}$ и $\omega = \sqrt{k/m}$, решения уравнения Шредингера соответствуют энергиям:

$$E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega \quad (n = 0, 1, 2, ...) \tag{13}$$

Для водородоподобного атома уравнение Шредингера имеет однозначные, конечные и непрерывные решения при любых положительных энергиях, а также при дискретных отрицательных:

$$E_n = -\frac{m_2 e^4}{2\hbar}\frac{Z}{n^2} \quad (n = 1, 2, 3, ...) \tag{14}$$