2.5. Уравнение Шредингера.

2.5.1. Уравнение Шредингера.

Вопрос, который встает перед физиками: как определить волновую функцию $\psi(\vec{r},t)$? В предыдущем параграфе для свободной частицы мы определили волновую функцию, но как ее найти в других случаях?

Основное уравнение *нерелятивистской квантовой механики – уравнение Шредингера*. Уравнение Шредингера не выводится, а вводится как новый принцип, или постулат, и затем следствия из него проверяются на эксперименте.

Примем во внимание следующие рассуждения:

1) плоские волны соответствуют свободной частице, следовательно, они должны быть частным решением уравнения для определения $\psi(\vec{r},t)$;
2) для определения волнового движения известно волновое уравнение; однако, оно не годится для описания частиц, т.к. оно справедливо для «чистых» волн, в нем не отражено никаких свойств частицы, оно не содержит фундаментальных констант.

Тогда вопрос состоит в том, какие требования необходимо предъявить к уравнению? Исходя из физических соображений, запишем эти требования:

1) Уравнение должно быть линейным, т.к. должен выполняться принцип суперпозиции.
2) Уравнение должно содержать только фундаментальные константы в качестве коэффициентов, например такие константы как e, m, $\hbar$.
3) В уравнение не должны явно входить параметры движения, например, координата или скорость v.

Продолжим рассуждения: для свободной нерелятивистской частицы имеет связь между энергией и импульсом:

$$E = \frac{p^2}{2m}. \tag{2.5.1}$$

А с другой стороны по гипотезе де Бройля для такой частицы имеем соотношения $E = \hbar\omega$, $\vec{p} = \hbar\vec{k}$ и волновую функцию:

$$\psi(x,t) = A\,exp\left[-i(\omega t - kx)\right] = A\,exp\left[-\tfrac{i}{\hbar}(Et - px)\right] \tag{2.5.2}$$

Далее используем следующие соображения. Возьмем первую производную по времени и вторую производную по координате от $\psi(\vec{r},t)$:

а) $$\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t} = A\left(-\frac{i}{\hbar}E\right)e^{-\frac{i}{\hbar}(Et-px)} = -\frac{i}{\hbar}E\psi(x,t) \tag{2.5.3}$$

б) $$\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial x} = \frac{i}{\hbar}p\psi(x,t); \quad \frac{\partial^2\psi(x,t)}{\partial x^2} = -\frac{p^2}{\hbar^2}\psi(x,t) \tag{2.5.4}$$

И сравнивая эти соотношения с формулой (2.5.1), получаем, что этому выражению можно сопоставить следующее равенство:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(x,t)}{\partial x^2} = i\hbar\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t} \tag{2.5.5}$$

Это уравнение удовлетворяет выше сформулированным условиям.

Это уравнение Шредингера для *свободного одномерного движения*. Проделанная процедура не есть вывод уравнения, а просто наводящие соображения для его написания. Э. Шредингер написал это уравнение в 1926 году, а в 1933 году ему была присуждена Нобелевская премия "за открытие новых плодотворных направлений атомной теории".

Обобщение уравнения на *трехмерный случай*, для которого свободная частица описывается волновой функцией

$$\psi = A\,exp\left[-\tfrac{i}{\hbar}(Et - \vec{p}\vec{r})\right],$$

получается достаточно тривиально:

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

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(x,y,z,t)=i\hbar\frac{\partial\psi(x,y,z,t)}{\partial t} \qquad (2.5.6)$$

Итак, уравнение (2.5.6) – *трехмерное уравнение Шредингера* для определения волновой функции свободного движения.

Обобщим теперь уравнение (2.5.6) для описания *движения во внешних полях*. Исходим из того, что полная энергия частицы равна:

$$E=\frac{p^2}{2m}+U(\vec{r},t) \qquad (2.5.7)$$

где $U(\vec{r},t)$ – потенциальная энергия частицы (потенциал). Тогда аналогично (2.5.5) можно написать следующее обобщающее уравнение для определения волновой функции частицы, движущейся во внешнем поле

$$i\hbar\frac{\partial\psi(\vec{r},t)}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(\vec{r},t)+U(\vec{r},t)\psi(\vec{r},t) \qquad (2.5.8)$$

Итак, *уравнение Шредингера – основное динамическое уравнение нерелятивистской волновой механики*, играет такую же важную роль, как уравнения Ньютона в классической механике и уравнения Максвелла в теории электромагнитного поля. Уравнение Шредингера описывает изменение во времени поведения микрообъектов, характеризуемых волновой функцией $\psi(\vec{r},t)$.

Обычно вводят оператор Гамильтона – *гамильтониан*:

$$\hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta+U(\vec{r},t) \qquad (2.5.9)$$

и тогда уравнение Шредингера запишется в символическом виде:

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=\hat{H}\psi \qquad (2.5.10)$$

Уравнения (2.5.9) – (2.5.10) – *нестационарные уравнения Шредингера*.

2.5.2. Уравнение Шредингера для стационарных состояний.

Если силовое поле $U(\vec{r},t)$ не зависит от времени t, то такое поле $U=U(\vec{r})$ называется стационарным. При этом можно разделить уравнение Шредингера на 2 отдельных уравнения – для координатной и временной частей волновой функции. В самом деле, представим волновую функцию в виде произведения:

$$\Psi(\vec{r},t)=\psi(\vec{r})\cdot\varphi(t) \qquad (2.5.11)$$

и будем искать ее в таком виде. Подставим (2.5.11) в уравнение Шредингера:

$$i\hbar\varphi_t'(t)\cdot\psi(\vec{r})=-\frac{\hbar^2}{2m}\varphi(t)\cdot\Delta\psi(\vec{r})+U(\vec{r})\psi(\vec{r})\varphi(t) \qquad (2.5.12)$$

Делим обе части уравнения (2.5.12) на полную функцию Ψ из (2.5.11):

$$i\hbar\frac{\varphi_t'(t)}{\varphi(t)}=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\Delta\psi(\vec{r})}{\psi(\vec{r})}+U(\vec{r})=const=E \qquad (2.5.13)$$

Левая часть уравнения зависит только от времени t, правая часть зависит только от пространственных координат, и поскольку это равенство справедливо при произвольных значениях независимых переменных, то обе части уравнения равны константе – *константе разделения*, которую в (2.5.13) мы обозначили через E. Тогда уравнение (2.5.13) разделяется на 2 уравнения.

Первое уравнение – *временное уравнение*:

$$i\hbar\frac{\partial\varphi(t)/\partial t}{\varphi(t)}=E \qquad (2.5.14)$$

Его общее решение легко получить в следующем виде:

$$\varphi(t)=A\cdot exp\left(-\frac{i}{\hbar}Et\right) \qquad (2.5.15)$$

Второе уравнение – *для координатной части волновой функции*:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(\vec{r})+U(\vec{r})\psi(\vec{r})=E\psi(\vec{r}) \qquad (2.5.16)$$

или иначе

$$\hat{H}\psi(\vec{r})=E\psi(\vec{r}) \qquad (2.5.17)$$

Уравнения (2.5.16) - (2.5.17) и есть *стационарные уравнения Шредингера*.

Итак, полная волновая функция частицы или системы частиц, находящихся в стационарном внешнем поле, имеет вид:

$$\Psi(\vec{r},t)=e^{-\frac{i}{\hbar}Et}\psi(\vec{r}) \qquad (2.5.18)$$

Отсюда видно, что, когда силовое поле $U(\vec{r})$ не зависит от времени, распределение плотности вероятности также не зависит от времени, т.е. оно стационарно.

Примечание 1. *Эрвин Шредингер, австрийский физик-теоретик, 1887–1961, Нобелевская премия 1933г. за создание волновой механики*
