

Модификация уравнения Шредингера для частиц с эффективной массой зависящей от координат

Достаточно ли безумна эта идея, чтобы быть верной?

Идея: запишем уравнение Шредингера в виде:

$$(i\hbar) \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) = (i\hbar)^2 \left(\nabla, \frac{1}{2m_{eff}(\vec{r})} \nabla \psi(\vec{r}, t) \right) + f(\vec{r}, t)$$

Такой вид, с точностью до множителя $i\hbar$ соответствует уравнению диффузии с коэффициентом диффузии зависящим от координат. Тут $f(\vec{r}, t) = E_p(\vec{r})\psi(\vec{r}, t)$,

а коэффициент $\frac{1}{2m_{eff}(\vec{r})}$ - аналог коэффициента диффузии, описывающий подвижность частицы, и зависящий от ее эффективной массы. Идея как раз и состоит из двух частей: 1) эффективная масса частицы может зависеть от ее координат (например, масса электрона внутри электронной оболочки атома тяжелого элемента); 2) такую зависимость можно описать аналогом уравнения диффузии для уравнения Шредингера. Ясно, что с такой модификацией уравнение Шредингера усложняется, изменится операторное квантово-механическое рассмотрение и неопределенность Гейзенберга, но преимуществом такой модификации будет новая степень свободы в измерении эффективной массы частицы. Используя новую степень свободы, возможно, удастся точно описать волновые функции для атомов тяжелых элементов. И из такого описания эмпирически получить зависимость $m_{eff}(\vec{r})$, для масс электронов в таких атомах. Возможно, также удастся найти физический смысл и теоретическое обоснование для таких зависимостей, а также осознать физический смысл подобия уравнений диффузии и Шредингера.

Евгений Шульзингер

1 декабря 2010 г.