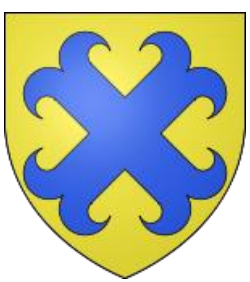
КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА

ЛЕКЦИЯ 2

ВОЛНОВЫЕ СВОЙСТВА МАТЕРИИ

1924, Louis de Broglie

Луи де Бройль



Поток свободных электронов обладающих энергией E и импульсом $\vec{p}$, должен обладать волновыми свойствами.

$$E^{rel.} = \sqrt{c^2 p^2 + m_0^2 c^4}.$$

$$E^{rel.} = mc^2 = \hbar\omega$$

$$\vec{p}^{\,rel.} = m\vec{\upsilon} = \frac{h}{\lambda}\vec{k}_0$$

дебойлевская длина волны

1927, Клинтон Дэвиссон

Клинтон Дэвиссон и Лестер Джермер

Дифракция электронов. Опыты Дэвиссона и Джермера

Американский физик. Окончил Чикагский университет, докторскую степень получил в 1911 году в Принстоне. Работал в Кавендишской лаборатории в Англии ассистентом Дж. Дж. Томсона (первооткрывателя электрона), в 1917 году перешел в лабораторию компании Western Electric в Нью-Йорке, где исследовал излучение электронов металлами. Совместно с Лестером Халбертом Джермером (Lester Halbert Germer, 1896–1971) сделал открытие волновых свойств электрона при рассеянии пучка электронов на монокристалле. За свою работу разделил Нобелевскую премию по физике за 1937 год с Джорджем Томсоном (George Thomson, 1892–1975), сыном Дж. Дж. Томсона, который независимо от американских учёных в том же 1927 году экспериментально открыл дифракцию электронов в Англии.

Дифракция электронов.
Опыты Дэвиссона и Джермера

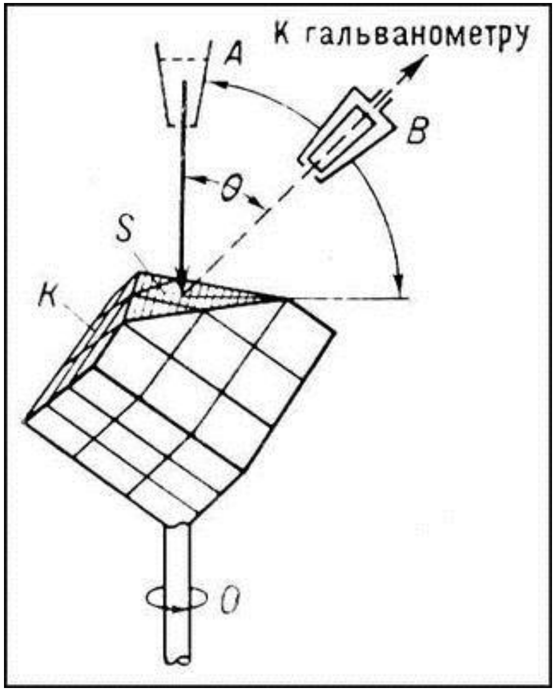
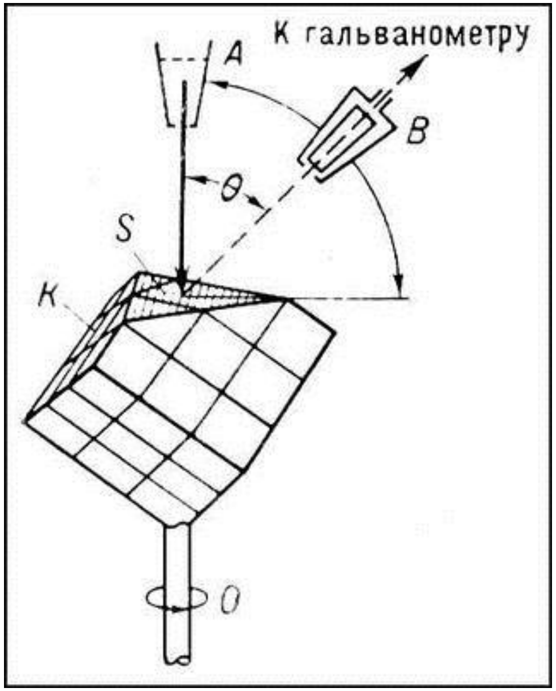


Схема опыта Дэвиссона — Джермера:

К — монокристалл никеля;
А — источник электронов;
В — приёмник электронов;
θ — угол отклонения электронных пучков.

Пучок электронов падает перпендикулярно отшлифованной плоскости кристалл S. При поворотах кристалла вокруг оси О гальванометр, присоединённый к приёмнику В, даёт периодически возникающие максимумы.

Дифракция электронов.
Опыты Дэвиссона и Джермера



1. Пучок электронов, разгоняют в электронной пушке до определённой энергии.

2. По гипотезе де Бройля, частицы должны обладать определённым импульсом, а, следовательно, определённой длиной волны.

$$\lambda = \frac{h}{p}$$

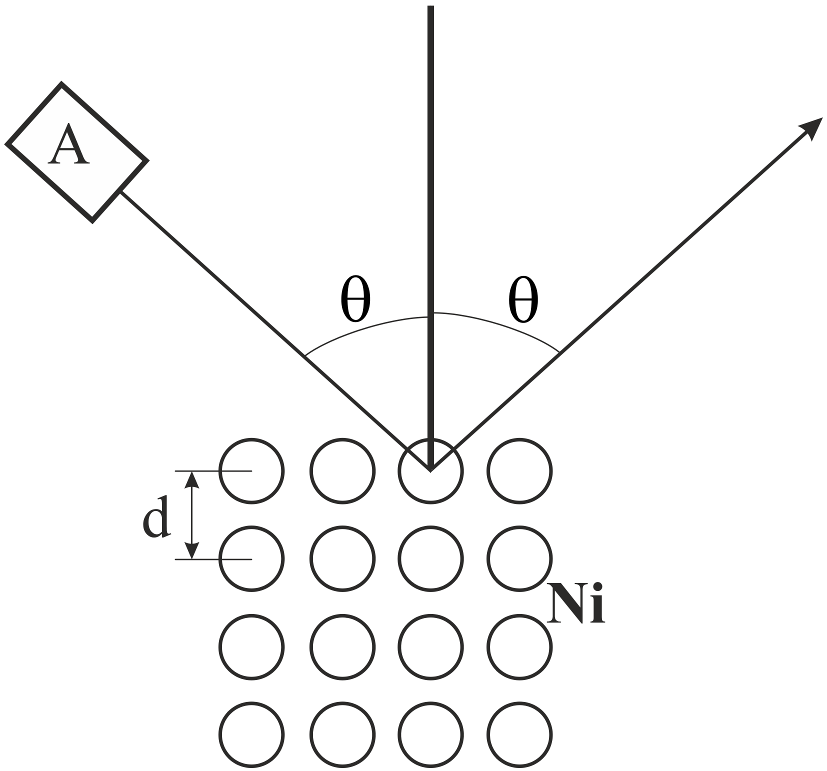
3. Для частиц пролетевших разность потенциалов U кинетическая энергия равна

$$E = eU = \frac{p^2}{2m_e}$$

$$\boxed{\lambda = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2m_e eU}}}$$

Длина волны де Бройля

Дифракция электронов.
Опыты Дэвиссона и Джермера



ОПЫТ ПОКАЗАЛ:

- Наличие пиков на угловой зависимости потока электронов от угла дифракции.
- Максимумы наблюдались для углов, которым соответствуют расстояния между пиками кратное целому числу длин волн :

Условие Брегга-Вульфа

$$2d\sin\theta = n\lambda, \quad n = 0,1,2,3,\ldots$$

$$U = 50V; \quad \lambda \sim 2\,\mathring{A}; \quad d = 4\,\mathring{A}$$

ФАЗОВАЯ СКОРОСТЬ

ФАЗОВАЯ СКОРОСТЬ - скорость перемещения постоянной фазы.

$$\varphi = Ae^{-i(\omega t - kx)}$$

$$\omega t - kx = \mathrm{const}$$

За время Δt координата изменится на Δx , фаза останется прежней :

$$\omega(t + \Delta t) - k(x + \Delta x) = \omega t - kx$$

$$\omega \Delta t - k\Delta x = 0$$

$$u = \frac{\Delta x}{\Delta t} = \frac{\omega}{k}$$

ФАЗОВАЯ СКОРОСТЬ

$$u = \frac{\Delta x}{\Delta t} = \frac{\omega}{k}$$

ФОТОН

$$\omega = \frac{E}{\hbar} = \frac{c\sqrt{p^2 + m_0^{\ 2} c^2}}{\hbar},$$

$$k = \frac{p}{\hbar}.$$

фотон – самая релятивистская частица

$$m_0 = 0$$

$$u = \frac{\omega}{k} = c$$

ЭЛЕКТРОН, $\vec{p} = m\vec{\upsilon}$

$$\omega = \frac{E}{\hbar} = \frac{mc^2}{\hbar},$$

$$k = \frac{m\upsilon}{\hbar}.$$

$$u = \frac{c^2}{\upsilon} > c$$

Не соответствует движению частицы, равно как и переносу энергии.

ГРУППОВАЯ СКОРОСТЬ и ВОЛНОВОЙ ПАКЕТ

КОНЦЕПЦИЯ ВОЛНОВОГО ПАКЕТА

- Материальная частица – суперпозиция волн близких по частоте – ***волновой пакет***. Суперпозиция возможна, поскольку волновое уравнение линейно.

$$\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2\varphi}{\partial t^2} - \nabla^2\varphi = 0$$

- Амплитуда волнового пакета отлична от нуля в малой области пространства, её связывают с местоположением частицы.

- Скорость распространения максимума амплитуды волнового пакета – ***групповая скорость*** (соответствует скорости движения частицы в пространстве).

ГРУППОВАЯ СКОРОСТЬ и ВОЛНОВОЙ ПАКЕТ

Волновой пакет из волн с близкими волновыми векторами :

$$k \in \left[k_0 - \frac{\Delta k}{2}, k_0 + \frac{\Delta k}{2} \right]$$

Амплитуда всякой из волн :

$$\frac{A}{\Delta k} = \mathrm{const}$$

Принцип суперпозиции :

$$\varphi(x,t) = \sum_i \mathrm{C}_i \varphi_i(x,t)$$

$$\varphi(x,t) = \frac{A}{\Delta k} \int_{k0-\frac{\Delta k}{2}}^{k0+\frac{\Delta k}{2}} e^{-i(\omega t - kx)} dk$$

ГРУППОВАЯ СКОРОСТЬ и ВОЛНОВОЙ ПАКЕТ

$$\varphi(x,t)=\frac{A}{\Delta k}\int_{k0-\frac{\Delta k}{2}}^{k0+\frac{\Delta k}{2}} e^{-i(\omega t-kx)}dk$$

Частота ω определяется через волновой вектор k :

$$\boxed{\omega(k)=\omega(k_0)+(k-k_0)\omega'(k_0)}+\frac{(k-k_0)^2}{2}\omega''(k_0)+\ldots$$

$$\omega(k)=\omega_0+\omega_1+\omega_2+\ldots$$

Предел точности разложения :

$$\omega_2=\frac{(k-k_0)^2}{2}\omega_0''\sim(\Delta k)^2\omega_0''$$

ГРУППОВАЯ СКОРОСТЬ и ВОЛНОВОЙ ПАКЕТ

$$\varphi(x,t) = Be^{-i(\omega_0 t - k_0 x)}$$

Амплитуда волнового пакета

$$B = \frac{A}{\Delta k} \int_{k_0 - \frac{\Delta k}{2}}^{k_0 + \frac{\Delta k}{2}} e^{-i(k-k_0)(\omega_0' t - x)} dk = A \frac{\sin \xi}{\xi}$$

!!!

$$\xi = \frac{\Delta k}{2}(x - \omega_0' t)$$

Скорость распространения амплитуды волнового пакета

$$\bar{u} = \omega_0' = \left(\frac{d\omega}{dk}\right)_{k=k_0} -$$

групповая скорость.

ГРУППОВАЯ СКОРОСТЬ и ВОЛНОВОЙ ПАКЕТ

$$\bar{u} = \omega_0' = \left(\frac{d\omega}{dk}\right)_{k=k_0} -$$ групповая скорость.

$$\bar{u} = \frac{dE}{dp}$$

ФОТОН $m_0 = 0$

$$\bar{u} = \left.\frac{d(\sqrt{c^2 p^2 + m_0^2 c^4})}{dp}\right|_{m_0=0}$$

$$\bar{u} = \frac{d(cp)}{dp} = c$$

ЭЛЕКТРОН, $\vec{p} = m\vec{\upsilon}$

$$\bar{u} = \frac{d(\sqrt{c^2 p^2 + m_0^2 c^4})}{dp}$$

$$\bar{u} = \frac{c^2 p}{E} = \upsilon$$

ГРУППОВАЯ СКОРОСТЬ и ВОЛНОВОЙ ПАКЕТ

ПРОСТРАНСТВЕННОЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ВОЛНОВОГО ПАКЕТА

$$\xi = \frac{\Delta k}{2}(x - \omega_0' t) \qquad t = 0$$

Квадрат амплитуды волнового пакета :

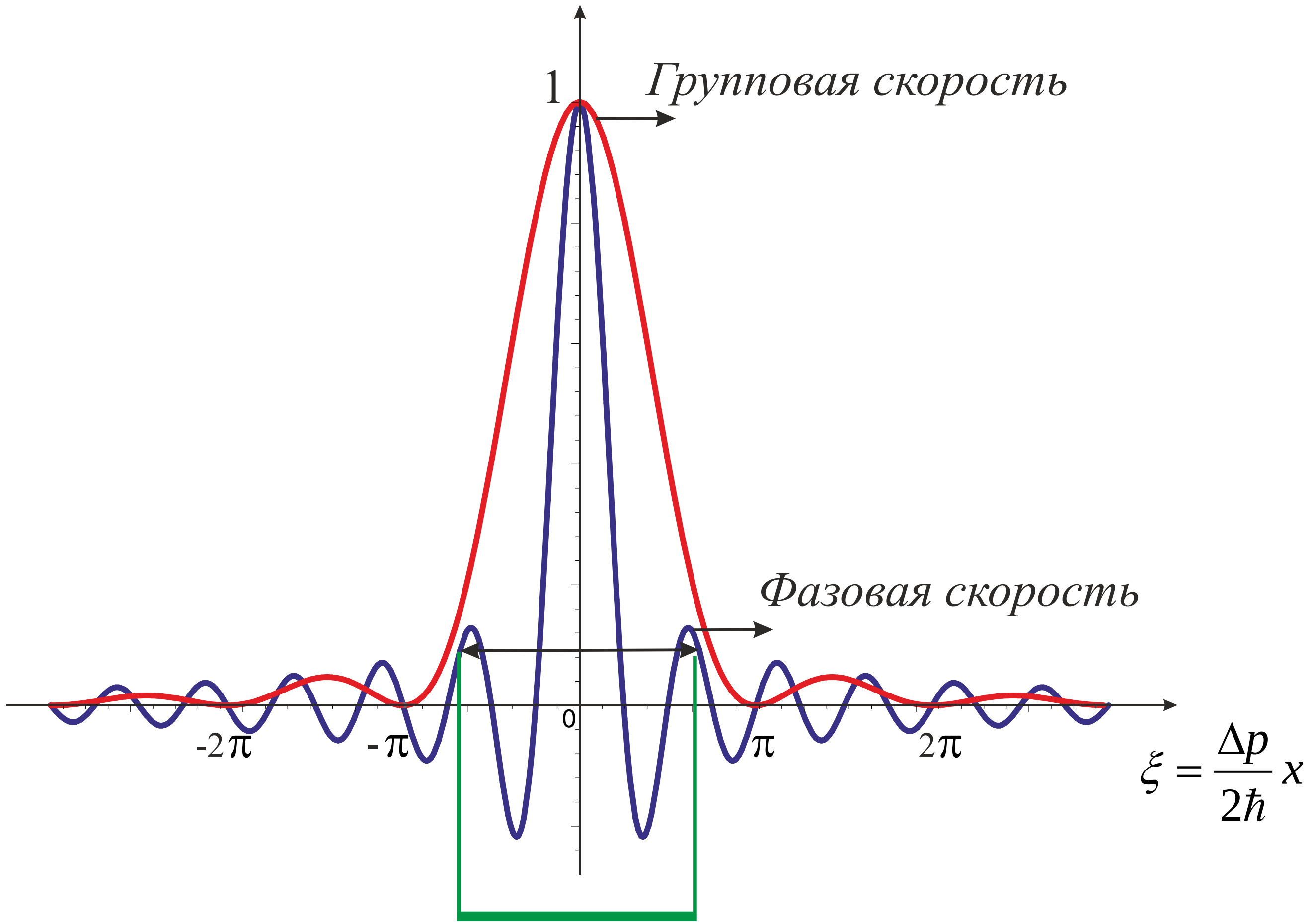
$$\varphi(x,t) = Be^{-i(\omega_0 t - k_0 x)},$$

где $B = A\dfrac{\sin\xi}{\xi}$

$$B^2 = A^2 \frac{\sin^2\xi}{\xi^2}$$

ГРУППОВАЯ СКОРОСТЬ и ВОЛНОВОЙ ПАКЕТ

Форма волнового пакета при $t=0$ **для дебройлевских волн** $\left(\Delta k = \dfrac{\Delta p}{\hbar}\right)$.



Область локализации волнового пакета

ГРУППОВАЯ СКОРОСТЬ и ВОЛНОВОЙ ПАКЕТ

Область пространственной локализации волнового пакета

$$\xi = \frac{\Delta p}{2\hbar}\Delta x \sim \pi$$

$$\Delta p \ \Delta x \geq h$$

Область временной локализации волнового пакета

$$\xi = \frac{\Delta k}{2}(x - \omega_0 ' t)\Big|_{x=0} = -\frac{\Delta k}{2}\frac{d\omega}{dk}t = -\frac{\Delta \omega}{2}t$$

$$\Delta \omega \ \Delta t \geq 2\pi$$

$$\Delta E \ \Delta t \geq h$$

ГРУППОВАЯ СКОРОСТЬ и ВОЛНОВОЙ ПАКЕТ

$$\boxed{\Delta p \;\; \Delta x \geq h}$$

Соотношение неопределённостей Гейзенберга

Чем лучше частица локализована в пространстве импульсов, тем хуже она локализована в пространстве координат.

$$\Delta p \to 0; \;\; \Delta x \to \infty$$

Чем хуже частица локализована в пространстве импульсов, тем лучше она локализована в пространстве координат.

$$\Delta p \to \infty; \;\; \Delta x \to 0$$

$$\boxed{\Delta E \;\; \Delta t \geq h}$$

Четвёртое соотношение неопределённостей

ГРУППОВАЯ СКОРОСТЬ и ВОЛНОВОЙ ПАКЕТ

$$\Delta E\ \Delta t \geq h \quad / \quad \Delta\omega\ \Delta t \sim 2\pi$$

Предел точности разложения :

$$\omega_2 \sim (\Delta k)^2 \omega_0''$$

$$(\Delta k)^2 \omega_0'' \Delta t \sim 2\pi$$

$$(\Delta k)^2 \frac{d^2\omega}{dk^2} \Delta t \sim 2\pi$$

$$\Delta k \cdot \Delta x \sim 2\pi$$

$$\Delta k^2 \cdot \Delta x^2 \sim 4\pi^2$$

$$\boxed{\Delta t \sim \frac{(\Delta x)^2}{2\pi\hbar \dfrac{d^2 E}{dp^2}}}$$

время жизни волнового пакета

ГРУППОВАЯ СКОРОСТЬ и ВОЛНОВОЙ ПАКЕТ

ВРЕМЯ ЖИЗНИ ВОЛНОВОГО ПАКЕТА $$\Delta t \sim \frac{(\Delta x)^2}{2\pi\hbar}\left(\frac{d^2E}{dp^2}\right)^{-1}$$

ФОТОН $m_0 = 0$

I. $E = cp \Rightarrow \dfrac{d^2E}{dp^2} = 0 \Rightarrow \Delta t \to \infty$

II. $\left.\begin{array}{l}\Delta k = 0 \\ \Delta k \cdot \Delta x \sim 2\pi\end{array}\right\} \Rightarrow \Delta x \to \infty$

ЭЛЕКТРОН, $\vec{p} = m\vec{\upsilon}$

III. $E = \sqrt{c^2p^2 + m_0^2c^4}$

$$\Downarrow$$

$$\frac{dE}{dp} = \frac{c^2p}{E} = \frac{c^2p}{mc^2} = \left.\frac{p}{m}\right|_{\substack{non-\\relativistic\\particle}} = \frac{p}{m_0}$$

$$\frac{d^2E}{dp^2} = \frac{1}{m_0} \Rightarrow \Delta t \sim \frac{m_0}{h}(\Delta x)^2$$

ГРУППОВАЯ СКОРОСТЬ и ВОЛНОВОЙ ПАКЕТ

ВРЕМЯ ЖИЗНИ ВОЛНОВОГО ПАКЕТА

$$\Delta t \sim \frac{(\Delta x)^2}{2\pi\hbar}\left(\frac{d^2E}{dp^2}\right)^{-1}$$

ДЛЯ ЭЛЕКТРОНА :

$$\Delta t \sim \frac{m_0}{h}(\Delta x)^2$$

$$h \sim 10^{-27}\,Erg\cdot s$$

$$m_0 \sim 10^{-27}\,g \quad \Rightarrow \quad \Delta t \sim 10^{-17}\,s$$

$$\Delta x \sim 10^{-8}\,cm$$

ДЛЯ МАКРО ЧАСТИЦЫ ВЕСОМ 1грамм :

$$m_0 \sim 1\ g$$

$$\Rightarrow \quad \Delta t \sim 10^{25}\,s$$

$$\Delta x \sim 0.1\ cm$$

ГРУППОВАЯ СКОРОСТЬ и ВОЛНОВОЙ ПАКЕТ

ВЫВОДЫ

- Все микро частицы демонстрируют дуальную природу, т.е. обладают и корпускулярными и волновыми свойствами.

- Всякой микро частице можно сопоставить определённую длину волны. Волна де Бройля.

- Всякая микро частица может быть представлена в виде волнового пакета, имеющего пространственную локализацию и определённое время жизни.

- Свойства всякой микро частицы могут быть определены из решения волнового уравнения.

ОСНОВНОЕ УРАВНЕНИЕ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

УРАВНЕНИЕ ШРЕДИНГЕРА

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m_0}\nabla^2\psi + \hat{V}\psi,$$

$$-i\hbar\frac{\partial\psi^*}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m_0}\nabla^2\psi^* + \hat{V}\psi^*.$$

где ψ – волновая функция.

ОСНОВНОЕ УРАВНЕНИЕ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m_0}\nabla^2\psi + V\psi$$

ПРЕДЕЛЬНЫЕ УСЛОВИЯ НА УРАВНЕНИЕ ШРЕДИНГЕРА

1. При $\hbar \to 0$ уравнение Шредингера должно переходить в уравнение Гамильтона - Якоби.

Для волновой функции $\psi(\vec{r},t) = Ae^{\frac{i}{\hbar}S(\vec{r},t)}$

$$-\frac{\partial S}{\partial t} = \frac{1}{2m_0}(\nabla S)^2 - \frac{i\hbar}{2m_0}\nabla^2 S + V$$

При $\hbar \to 0$ уравнение на S - классическое уравнение Гамильтона – Якоби,

где S – функция действия.

ПРЕДЕЛЬНЫЕ УСЛОВИЯ НА УРАВНЕНИЕ ШРЕДИНГЕРА

2. При $V = 0$ уравнение Шредингера

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \nabla^2 \psi$$

имеет точное решение $\psi(\vec{r}, t) = Ae^{-\frac{i}{\hbar}(Et - \vec{p}\vec{r})}$.

$$\frac{p}{\hbar} = \frac{2\pi}{\lambda}$$

$$\Downarrow$$

Для плоской волны: $\psi = Ae^{-i(\omega t - kx)} = Ae^{-i2\pi\left(\nu t - \frac{x}{\lambda}\right)}$,

$$E = \hbar\omega = h\nu,$$

$$\vec{p} = \hbar\vec{k}.$$

$$\boxed{\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{m_0 \upsilon}}$$

длина волны де Бройля

ОСНОВНОЕ УРАВНЕНИЕ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

ПРЕДЕЛЬНЫЕ УСЛОВИЯ НА УРАВНЕНИЕ ШРЕДИНГЕРА

3. Если потенциальная энергия не зависит от t, т.е. $V(x)$, то

$$E\psi(\vec{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m_0}\nabla^2\psi(\vec{r}) + \hat{V}(x)\psi(\vec{r})$$ – стационарное уравнение Шредингера

$$\psi(\vec{r},t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Et}\psi(\vec{r})$$ – волновая функция стационарных состояний

ФИЗИЧЕСКИЙ СМЫСЛ ВОЛНОВОЙ ФУНКЦИИ

ПЛОТНОТСЬ ТОКА ВЕРОЯТНОСТИ

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \vec{j} = 0 \quad -$$

Уравнение непрерывности

плотность заряда

плотность тока

2).

1).

$$\psi^{*}\cdot \quad \Big| \qquad i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m_0}\nabla^2\psi + \hat{V}\psi$$

"–"

$$\psi\cdot \quad \Big| \qquad -i\hbar \frac{\partial \psi^{*}}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m_0}\nabla^2\psi^{*} + \hat{V}\psi^{*}$$

ФИЗИЧЕСКИЙ СМЫСЛ ВОЛНОВОЙ ФУНКЦИИ

ПЛОТНОТСЬ ТОКА ВЕРОЯТНОСТИ

$$e\cdot \quad \Big| \qquad \frac{\partial \psi^*\psi}{\partial t}+\frac{i\hbar}{2m_0}\operatorname{div}\left(\psi\ \operatorname{grad}\psi^*-\psi^*\operatorname{grad}\psi\right)=0$$

$\rho = e\psi^*\cdot\psi$ – плотность вероятности нахождения частицы в точке пространства с радиус-вектором $\vec{r}$.

$\psi^*\cdot\psi\ d^3x$ – вероятность нахождения ….

$\frac{i\hbar}{2m_0}\left(\psi\ \operatorname{grad}\psi^*-\psi^*\operatorname{grad}\psi\right)$ – плотность тока вероятности.

$$\frac{d}{dt}\int\psi^*\cdot\psi\ d^3x=0 \quad \Rightarrow \quad \int\psi^*\cdot\psi\ d^3x=\text{const}=1$$

ФИЗИЧЕСКИЙ СМЫСЛ ВОЛНОВОЙ ФУНКЦИИ

ТРЕБОВАНИЯ НА ВОЛНОВУЮ ФУНКЦИЮ

$\psi -$ функция должна быть однозначна и непрерывна на всей области определения;

$\dfrac{\partial \psi}{\partial x_\alpha} -$ производная должна быть непрерывна на всей области определения;

$\psi -$ функция должна быть квадратично интегрируема, т.е.

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* \cdot \psi \ d^3x \neq \infty.$$

ЛИНЕЙНЫЕ ОПЕРАТОРЫ В ТЕОРИИ ШРЕДИНГЕРА

В квантовой механике всем физическим величинам сопоставляются операторы :

Уравнения движения (Уравнение Гамильтона-Якоби).

Интегралы движения.

$$H = E$$

$$\vec{p} \to \hat{\vec{\mathrm{p}}} = -i\hbar\vec{\nabla}$$

$$E \to \hat{\mathrm{E}} = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$$

$$H \to \hat{\mathrm{H}} = \frac{\hat{\vec{\mathrm{p}}}^{2}}{2m_0} + \hat{V}(\vec{r})$$

$$\vec{J} \to \hat{\vec{\mathrm{L}}} = \left[\hat{\vec{\mathrm{p}}} \times \hat{\vec{r}}\right]$$

Уравнения на собственные значения и собственные функции операторов :

$$\hat{E}\psi = \hat{H}\psi$$

$$\hat{\mathrm{p}}\psi = p\psi$$

$$\hat{\mathrm{L}}^2\psi = l(l+1)\psi$$

$$\hat{\mathrm{M}}(\alpha\psi_1 + \beta\psi_2) = \alpha\ \hat{\mathrm{M}}\psi_1 + \beta\ \hat{\mathrm{M}}\psi_2$$

ОСНОВНОЕ УРАВНЕНИЕ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

ВЫВОДЫ

- Основное уравнение квантовой механики - уравнение Шредингера
- Состояние квантовой системы описывается волновой функцией.
- Принимается вероятностная интерпретация для волновой функции.
- Физическим величинам соответствуют линейные операторы.