12. Гипотеза де Бройля. Корпускулярно-волновой дуализм

В 1924 г. Луи де Бройль предположил, что не только для фотонов, но и вообще для всех частиц, справедливо соотношение

$$p = \frac{h}{\lambda} \quad \text{и} \quad E = h\nu.$$

Согласно де Бройля пучок частиц любого сорта будет создавать на двойной щели интерференционную картину, характерную для опыта Юнга с двумя щелями.

Три года спустя эксперимент подтвердил гипотезу де Бройля в опытах по дифракции электронов на кристаллах.

С точки зрения атомизма отдельный электрон может пройти лишь через одну из двух щелей (рис. 1.) Распределение электронов на экране должно быть суммой распределений для каждой из щелей.

Однако, вместо этого мы видим стандартную интерференционную картину для двух щелей, изображенную на рис.2.

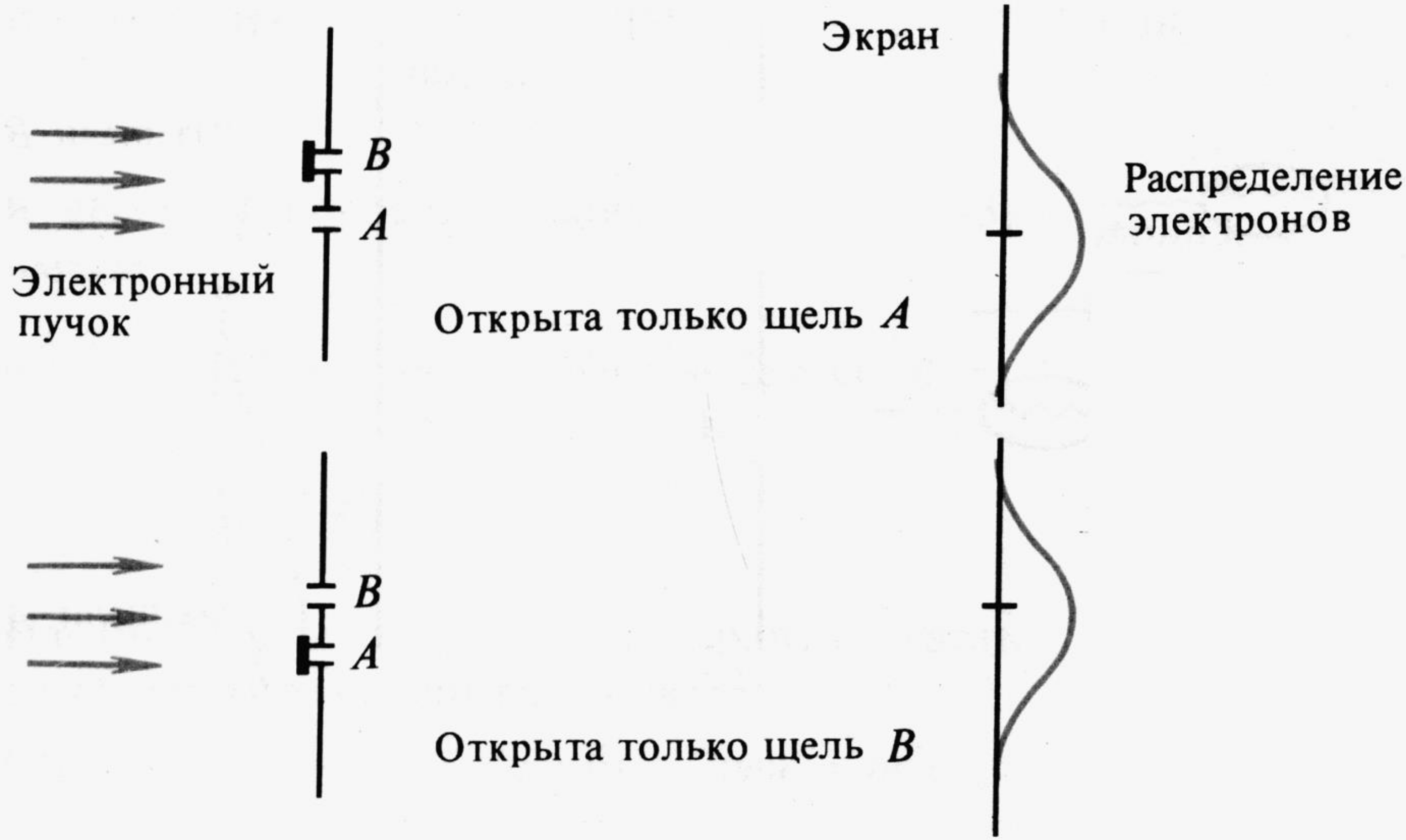


Рис. 1. Распределение интенсивности электронов согласно классической физике

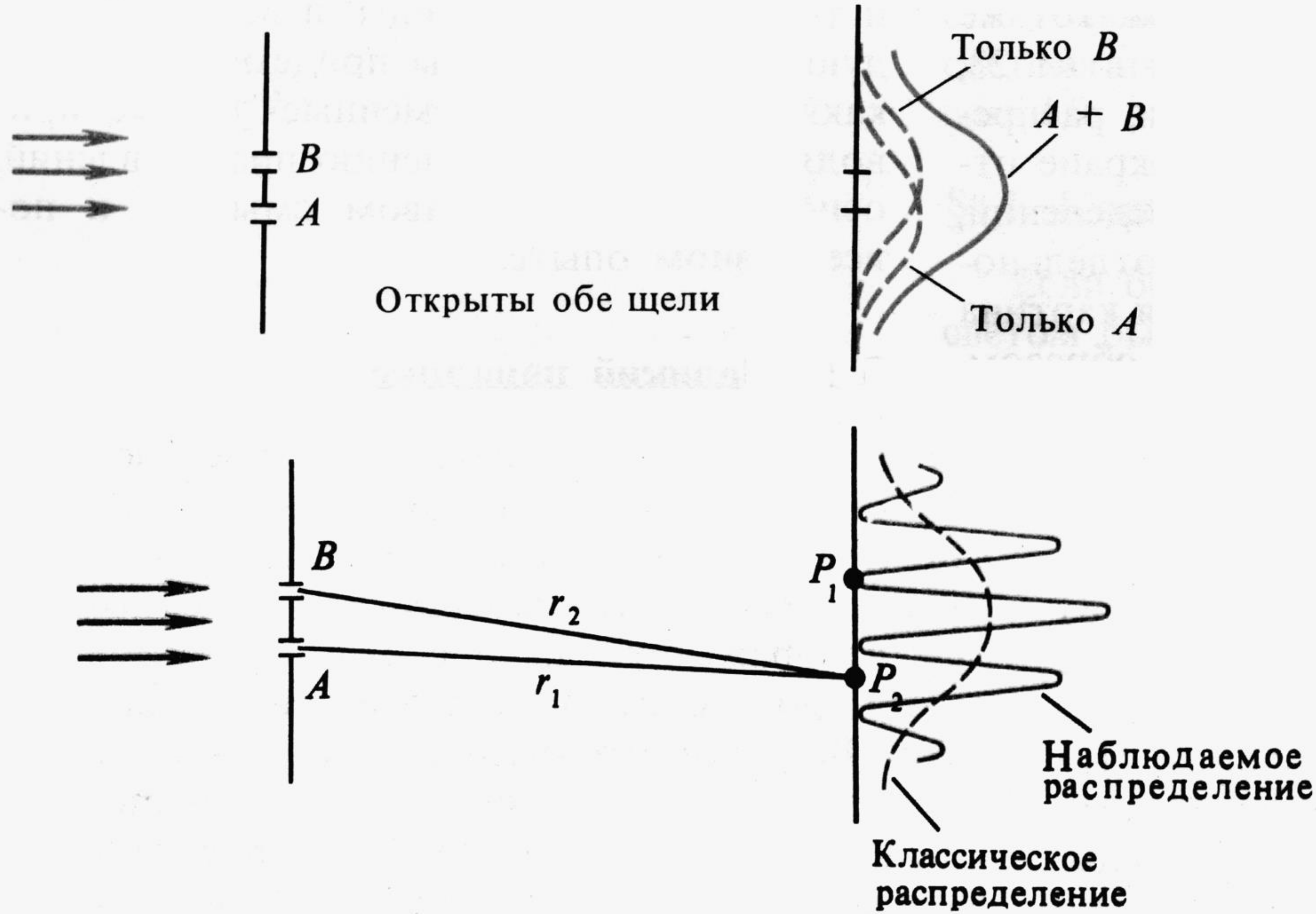


Рис. 2. Распределение интенсивности электронов согласно квантовой теории

Пусть в точке P_1 на рис.2 находится счетчик Гейгера, регистрирующий ежесекундно 100 электронов, когда открыта любая из щелей A или B.

Когда открыты обе щели одновременно, счетчик перестает регистрировать электроны.

Это значит, что точка P_1 попадает в интерференционный минимум ($r_2 - r_1 = \lambda/2$).

Волновая функция

В квантовой механике поведение частицы описывается волновой функцией $\psi(x,y,z,t)$

Вероятность обнаружить частицу в момент времени t в любой точке x, y, z пропорциональна $|\psi(x,y,z,t)|^2$, т.е. интенсивности.

Если событие может произойти несколькими взаимно исключающими способами (например, прохождение частицы через одну из щелей A или B), то амплитуда вероятности этого события равна сумме амплитуд вероятностей каждого из способов:

$$\psi = \psi_1 + \psi_2$$

(принцип суперпозиции).

В случае (рис.2) ψ_1 описывает волну, проходящую через щель *A*, а ψ_2 –через щель *B*.

На экране обе волновые функции перекрываются и дают классическую интерференционную картину от двух щелей.

Причем ***n***-й максимум определяется выражением $\boldsymbol{\sin\theta_n = n\lambda/d}$.

Этот формализм составляет основу квантовой механики.

Вероятность обнаружить частицу в некоторый момент времени в элементарном объеме dV, окружающем точку P, равна:

$$\boldsymbol{dP = |\Psi|^2 dV = \Psi^* \Psi dV}$$

Вероятностный смысл волновой функции накладывает ограничения на волновые функции в задачах квантовой механики.

Они включают в себя:

1. ***Условие конечности волновой функции.***

Волновая функция не может принимать бесконечных значений.

2. Условие однозначности волновой функции.

Волновая функция должна быть однозначной функцией координат и времени, так как плотность вероятности обнаружения частицы должна определяться в каждой задаче однозначно.

3. Условие непрерывности волновой функции.

В любой момент времени волновая функция должна быть непрерывной функцией пространственных координат.

Кроме того, непрерывными должны быть частные производные волновой функции $d\Psi/dx$, $d\Psi/dy$, $d\Psi/dz$.

4. Условия нормировки

$$\int_{V\to\infty} |\Psi|^2 dV = 1$$

Это означает, что пребывание частицы где- либо в пространстве есть достоверное событие и его вероятность должна быть равна единице.

3. Уравнение Шредингера

Для описания поведения микро частиц не пригодны уравнения классической физики (уравнения Ньютона).

Волновая функция $\psi(x)$ находится из решения дифференциального уравнения, сформулированного *Шредингером* в 1926 г.

Временное уравнение Шредингера для движущейся частицы с массой m_0 в потенциальном поле $U(x,y,z,t)$, имеет вид:

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m_0}\Delta\Psi + U\Psi$$

Здесь $i = \sqrt{-1}$;

Δ (набла) - оператор Лапласа, в декартовой системе координат имеет вид

$$\Delta = \nabla^2 = \frac{\partial}{\partial x^2} + \frac{\partial}{\partial y^2} + \frac{\partial}{\partial x^2}$$

Уравнение *Шредингера* решается с учетом начальных и граничных условий на волновую функцию.

Начальное условие задаёт значение волновой функции в момент времени $t = 0$.

Граничные условия формулируются на границах областей, где потенциальная функция U терпит разрывы первого или второго рода.

В качестве примера вычислим волновую функцию свободной частицы, с кинетической энергий

$$E = p^2/2m,$$

частица движется в отсутствие силовых полей ($U = 0$, $\mathbf{F} = 0$) в направлении оси x.

Уравнение Шредингера для этого случая записывается в виде:

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m_0}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}$$

Решением уравнения является волновая функция:

$$\Psi(x,t) = A\,exp\left\{-\frac{i}{\hbar}(Et - px\right\}$$

- плоская волна де Бройля. Вероятность найти частицу $|\psi|^2 = A^2$, **не зависит от t и x** и с равной вероятностью обнаруживается в любой точке x.

Итак, временное уравнение Шредингера позволяет:

-найти $\Psi(x,y,z,t)$ как функцию координат и времени;

-определить плотность вероятности нахождения частицы в любой точке пространства в любой момент времени:

-описать квантовое состояние движущейся в силовом поле частицы.

В квантовой механике существует класс задач, для которых ***потенциальное поле*** ***$U(x,y,z,)$*** не зависит от времени, стационарное поле

В стационарных полях квантовая система находится в состояниях с определенным значением энергии E.

Эти состояния называются стационарными состояниями.

Если $U(x,y,z)$ не зависит от времени, то функцию $\Psi(x,y,z,t)$ можно представить в виде произведения двух функций:

$$\Psi(x,y,z,t) = \Psi(x,y,z)\ \varphi(t),$$

$\Psi(x,y,z)$ – зависит только от координат;

$\varphi(t)$ – только от времени.

Подставляя $\Psi(x,y,z)\varphi(t)$ в уравнение Шредингера и разделив обе части уравнения на $\Psi(x,y,z)\varphi(t)$, получаем

$$\frac{i\hbar}{\varphi}\frac{d\varphi}{dt} = \frac{1}{\Psi}\hat{H}\Psi$$

Здесь

$$\hat{H} = \frac{\hbar^2}{2m_0}\Delta + U(x,y,z,t)$$

– оператор полной энергии частицы (оператор Гамильтона).

В полученном уравнении левая часть зависит только от времени, а правая – только от координат.

Такое равенство возможно лишь в случае, если левая и правая части уравнения равны постоянной величине.
Обозначим её буквой E, получаем два уравнения:

$$\hat{\mathrm{H}}\boldsymbol{\Psi} = \boldsymbol{E\Psi}$$

$$\boldsymbol{i}\hbar\frac{\boldsymbol{d\varphi}}{\boldsymbol{\partial t}} = \boldsymbol{E\varphi}$$

Константа E представляет полную энергию квантовомеханической системы.

Перепишем 1- ое уравнение с учетом вида оператора $\hat{H}$

$$\Delta\Psi + \frac{2m_0}{\hbar^2}(E - U) = 0$$

Полученное уравнение называется *уравнением Шредингера для стационарных состояний*.

4. Соотношение неопределенностей Гейнзенберга

Соотношение или принцип неопределенностей Гейзенберга утверждает:

Невозможно одновременно точно определить значения координаты и импульса частицы:

$$\Delta x \Delta p \geq \hbar/2$$

где Δx и Δp_x – неопределённости значений координаты x и компоненты p_x импульса $\mathbf{p}$

Двойственная природа микрочастиц накладывает ограничения на точность определения физических величин.

Ограничения никак не связаны с точностью измерений, достижимой в конкретном эксперименте, а имеют принципиальное значение.

Соотношения неопределенностей – фундаментальные соотношения квантовой механики.

Оно устанавливает предел точности одновременного определения переменных, характеризующих квантовую систему.

5. Частица в потенциальном ящике. Граничные условия.

Рассмотрим частицу в одномерном ящике с абсолютно отражающими стенками, расстояние между ними равно L (рис.).

Потенциальная энергия частицы вне и внутри потенциального ящика имеет следующее значения:

$$U=0 \qquad (0< x < L)$$

$$U=\infty \qquad (x=0, <0, \quad x=L, >L)$$

Задача о движении частицы в одномерном ящике с бесконечно высокими стенками сводится к решению уравнения Шредингера:

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2}=\frac{2m_0}{\hbar^2}(U_0-E)\Psi$$

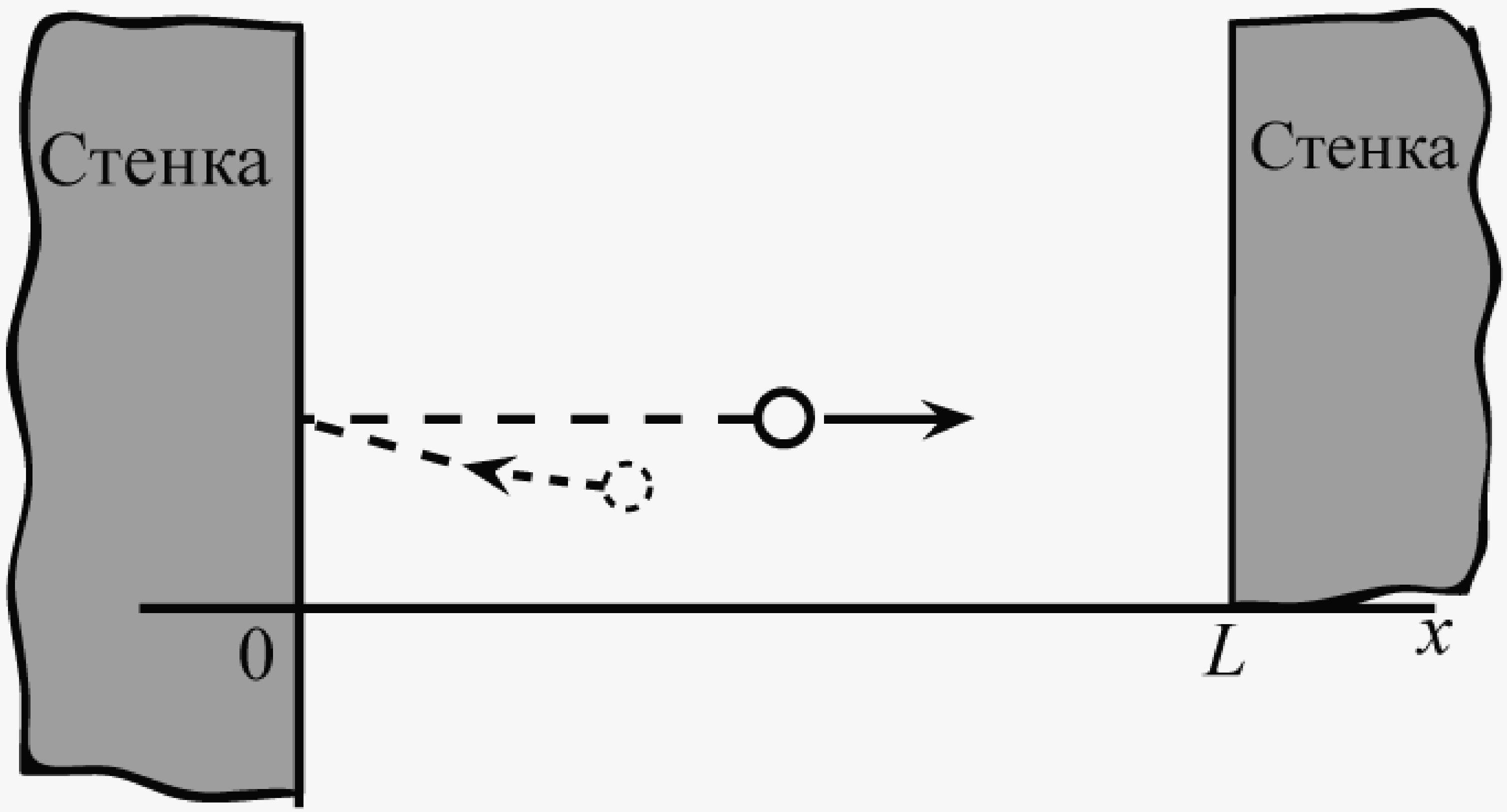


Рис. Если U=∞ при x = L и x = 0, то функция ψ(x) должна обращаться в нуль при этих значениях x.

В этом состоит смысл граничных условий.

Частица отражается от стенок ящика

Решением этого уравнения при U= 0

$$\boldsymbol{\Psi(x) = A \sin kx}$$

где

$$k = \sqrt{2mE / \hbar^2}$$

Функция $\psi(x)$ должна обращаться в нуль и на границе при $x = L$, $x = 0$.

Подставляя в $\psi(x)$ вместо x величину L, получаем

$$0 = \sin(kL) = \psi(kL)$$

Это справедливо при

$$kL = n\pi,$$

где n – целое число. Разрешены только дискретные значения волнового числа k_n: $k_n = n\pi / L$

Это означает, что в ящике укладывается целое число полуволн и совпадает с условием возникновения стоячей волны на струне:

$$L = n(\lambda/2).$$

На рис. изображены волновые функции $\psi_n(x) = A \sin(n\pi/L)x$ для $n = 1, 2, 3, 4$.

Значения импульса:

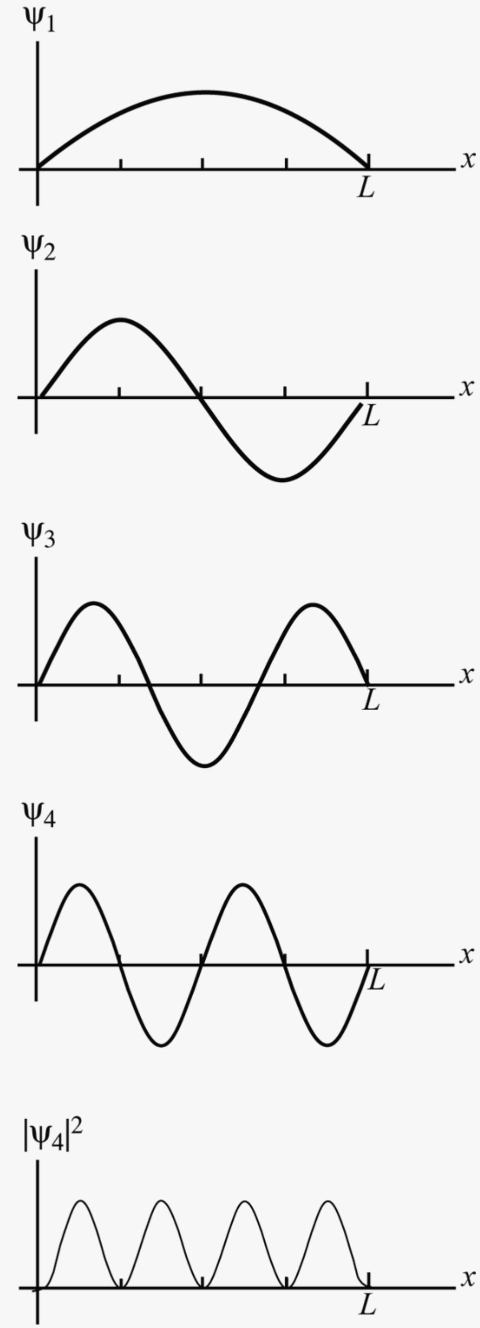
$$p_n = \hbar k_n \quad \text{или} \quad p_n = n(\pi\hbar / L)$$

Значения кинетической энергии

$$E_n = \frac{p_n^2}{2m} = n^2 \frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}$$

Рис. Первые четыре стоячие волны, соответствующие частице в ящике;

на нижнем рисунке – плотность вероятности для частицы в состоянии с n = 4



Значения E_n называются собственными значениями

Соответствующие волновые функции – собственными функциями.

Наинизшая возможная энергия отвечает $n = 1$, волновая функция - половину синусоиды.
Эта энергия основного состояния.

В квантовой механике частица в ящике не может иметь энергию меньше E_1 (ψ в ящике не должна быть нулевой функцией), в классической же физике частица может иметь нулевую энергию.