

ЭЛЕМЕНТЫ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

Некоторые свойства волн де Бройля

Некоторые свойства волн де Бройля

Пусть имеется свободно движущаяся со скоростью v частица массой m . Вычислим для нее фазовую и групповую скорости волн де Бройля.

Фазовая скорость

$$v_{\text{фаз}} = \frac{\omega}{k} = \frac{\hbar\omega}{\hbar k} = \frac{E}{p} = \frac{mc^2}{mv} = \frac{c^2}{v}$$

$$k = \frac{2\pi}{\lambda}$$

Некоторые свойства волн де Бройля

Групповая скорость

$$u = \frac{d\omega}{dk} = \frac{d(\hbar\omega)}{d(\hbar k)} = \frac{dE}{dp}$$

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



$$u = \frac{dE}{dp} = \frac{pc^2}{\sqrt{m_0^2 c^4 + p^2 c^2}} = \frac{pc^2}{E} = \frac{mvc^2}{mc^2} = v$$

групповая скорость равна скорости частицы

Соотношение неопределенностей

Соотношение неопределенностей

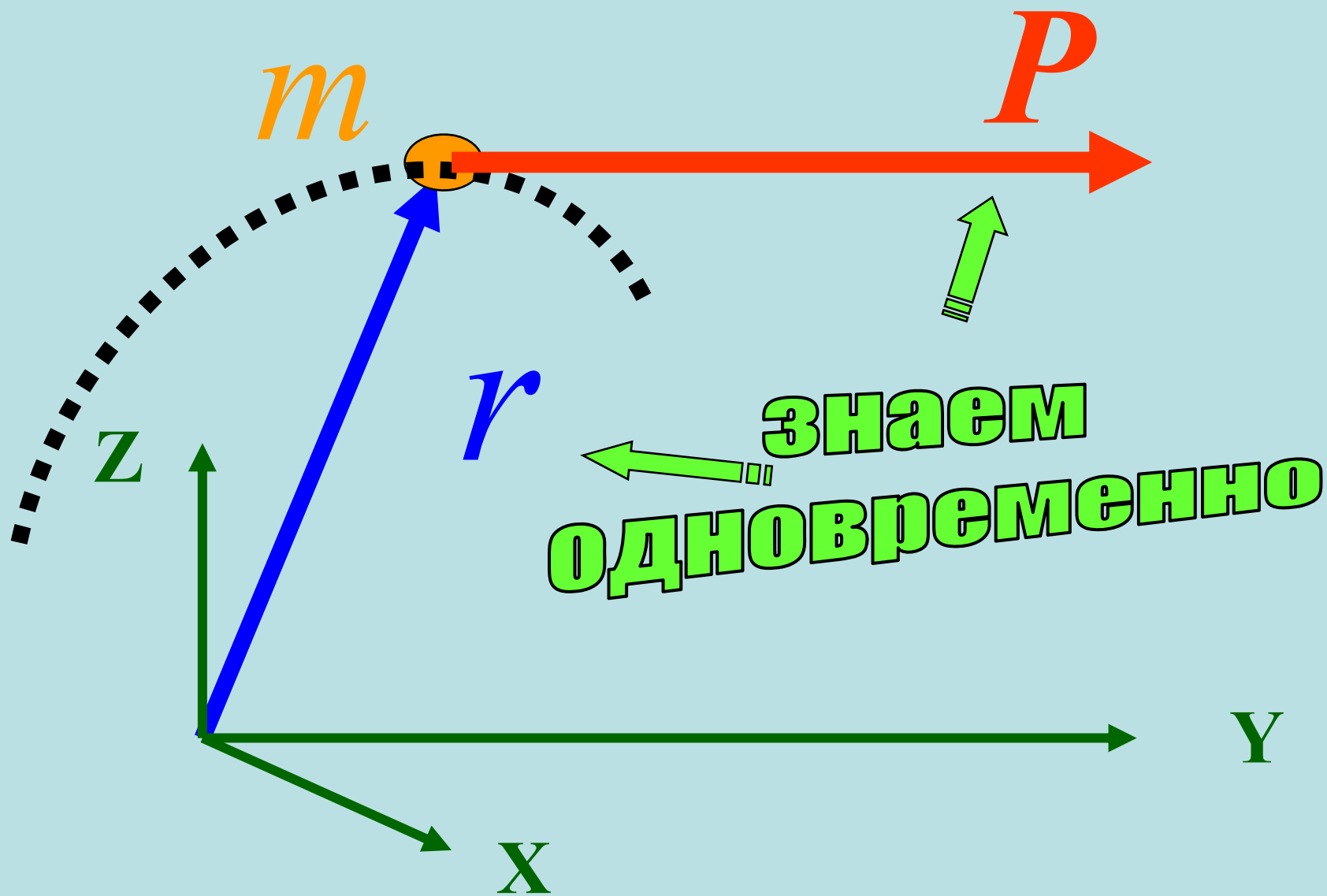
Согласно двойственной корпускулярно-волновой природе частиц вещества, для описания микрочастиц используются то волновые, то корпускулярные представления.

Поэтому приписывать им все свойства частиц, или все свойства волн нельзя.

Естественно, что **необходимо внести некоторые ограничения в применении к объектам микромира понятий классической механики.**

Соотношение неопределенностей

В классической механике *состояние материальной точки (классической частицы) определяется заданием значений координат, импульса, энергии и т.д. перечисленные величины называются динамическими переменными.*



Поэтому можно записать
уравнение движения в виде:

$$\frac{dP}{dt} = ma = m \frac{d^2 r}{dt^2}$$

**Решение уравнения дает
траекторию движения -
непрерывную линию
в пространстве.**

Соотношение неопределенностей

Микрочастицы из-за наличия у них волновых свойств существенно отличаются от классических частиц.

Одно из основных различий заключается в том, что нельзя говорить о движении микрочастицы по определенной траектории и неправоммерно говорить об одновременных точных значениях ее координаты и импульса.

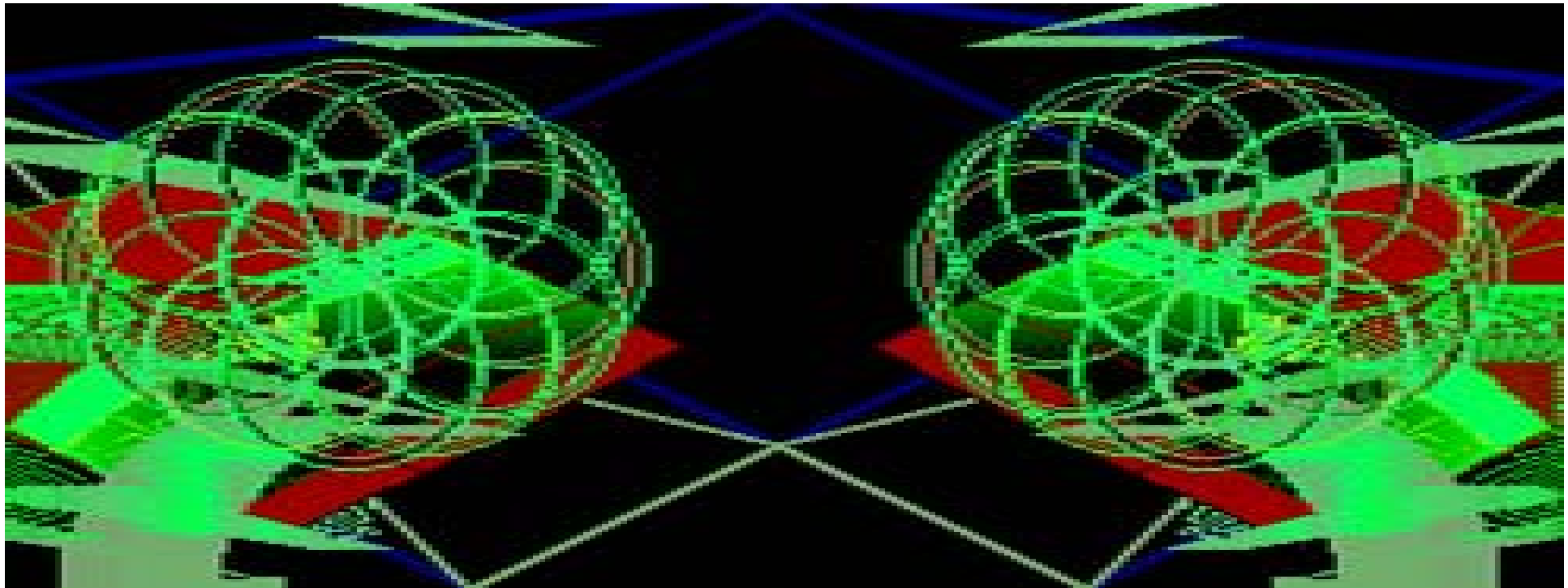
Соотношение неопределенностей

Частица \rightarrow волна

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

НО

Понятие «длина волны в данной точке» лишено физического смысла. И, поскольку импульс выражается через длину волны, то отсюда следует, что микрочастица с определенным импульсом имеет полностью неопределенную координату. И наоборот, если микрочастица находится в состоянии с точным значением координаты, то ее импульс является полностью неопределенным.



Для
микрочастиц нельзя одновременно
знать координату и импульс

Вернер Гейзенберг, 1927 г.

В классической физике понятие координаты в ряде случаев тоже непригодно для определения положения объекта в пространстве. Например, не имеет смысла говорить о том, что электромагнитная волна находится в данной точке пространства или что положение фронта волновой поверхности на воде характеризуется координатами x, y, z .

Согласно Гейзенбергу, невозможно одновременно характеризовать частицу ее положением в пространстве (координатами) и скоростью (импульсом). Так, например, электрон (и любая другая микрочастица) не может иметь одновременно точных значений координаты x и импульса p_x . Неопределенности значений x и p_x удовлетворяют соотношению

$$\Delta x \Delta p_x \geq h$$

где h – постоянная Планка.

$$\Delta x \Delta p_x \geq h$$

Отсюда следует, что чем меньше неопределенность одной величины (x или p_x), тем больше неопределенность другой. Возможно, такое состояние, в котором одна из переменных имеет точное значение ($\Delta x=0$). Другая переменная при этом будет совершенно неопределенной ($\Delta p \rightarrow \infty$ – ее неопределенность равна бесконечности), и наоборот. Таким образом, *для микрочастицы не существует состояний, в которых ее координаты и импульс имели бы одновременно точные значения.*

Отсюда вытекает и фактическая невозможность одновременно с любой наперед заданной точностью измерить координату и импульс микрообъекта.

Соотношение неопределенностей получено при одновременном использовании классических характеристик движения частицы (координаты, импульса) и наличии у нее волновых свойств.

Т.к. в классической механике принимается, что измерение координаты и импульса может быть произведено с любой точностью, то

соотношение неопределенностей является квантовым ограничением применимости классической механики к микрообъектам.

Соотношение неопределенностей указывает, в какой мере, возможно, пользоваться понятиями классической механики применительно к микрочастицам, в частности, с какой степенью точности можно говорить о траекториях микрочастиц.

Движение по траектории характеризуется вполне определенными значениями координат и скорости в каждый момент времени.

Подставив вместо p_x произведение mv_x , получим соотношение

$$\Delta x \Delta v_x \geq h / m$$

$$\Delta x \Delta v_x \geq h / m$$

Из этого соотношения следует, что **чем больше масса частицы, тем меньше неопределенность ее координаты и скорости**, следовательно, **с тем большей точностью можно применять к этой частице понятие траектории.**

I. Так, например, уже для пылинки массой 10^{-12} кг и линейными размерами 10^{-6} м, координата которой определена с точностью до 0,01 ее размеров ($\Delta x = 10^{-8}$ м), неопределенность скорости

$$\Delta v_x = \frac{6,62 \cdot 10^{-34}}{10^{-8} \cdot 10^{-12}} \text{ м/с} = 6,62 \cdot 10^{-14} \text{ м/с},$$

$$\Delta v_x = 6,62 \cdot 10^{-14} \text{ м/с},$$

т.е. не будет сказываться при всех скоростях, с которыми пылинка может двигаться. Таким образом, **для макроскопических тел их волновые свойства не играют никакой роли**; координаты и скорости могут быть измерены достаточно точно. Это означает, что для описания движения макротел с абсолютной достоверностью можно пользоваться законами классической механики.

II. Предположим, что пучок электронов движется вдоль оси x со скоростью $v=10^8$ м/с, определяемой с точностью до 0,01% ($\Delta v_x \approx 10^4$ м/с). Какова точность определения координаты электрона? Получим:

$$\Delta x = \frac{h}{m\Delta v_x} = \frac{6,62 \cdot 10^{-34}}{9,11 \cdot 10^{-31} \cdot 10^4} = 7,27 \cdot 10^{-5} \text{ м}$$

$$\Delta x = \frac{h}{m\Delta v_x} = 7,27 \cdot 10^{-5} \text{ м}$$

Т.о., положение электрона может быть определено с точностью до тысячных долей миллиметра. Такая точность достаточна, чтобы можно было говорить о движении электронов по определенной траектории, иными словами, **описывать их движения законами классической механики.**

III. *Применим соотношение неопределенностей к электрону, движущемуся в атоме водорода.*

Допустим, что неопределенность координаты электрона $\Delta x \approx 10^{-10}$ м (порядка размеров самого атома)

$$\Delta v = \frac{6,62 \cdot 10^{-34}}{9,11 \cdot 10^{-31} \cdot 10^{-10}} = 7,27 \cdot 10^7 \text{ м/с}$$

$$\Delta x = \frac{h}{m \Delta v_x}$$

$$\Delta v = 7,27 \cdot 10^7 \text{ м/с}$$

Используя законы классической физики, можно показать, что при движении электрона вокруг ядра по круговой орбите радиуса $0,5 \cdot 10^{-10}$ м его скорость $v \approx 2,3 \cdot 10^6$ м/с.

Таким образом, **неопределенность скорости в несколько раз больше самой скорости**. Очевидно, что **в данном случае нельзя говорить о движении электронов в атоме по определенной траектории**, иными словами, **для описания движения электронов в атоме нельзя пользоваться законами классической физики**.

Соотношение, аналогичное $\Delta x \Delta p_x \geq h$, имеет место для y и p_y , для z и p_z , а также **для других пар величин.**

В физике такие пары называются канонически сопряженными. Обозначив канонически сопряженные величины буквами A и B , можно написать

$$\Delta A \Delta B \geq h$$

**соотношение неопределенности
Гейзенберга для величин A и B .**

Утверждение о том, что произведение неопределенностей значений двух сопряженных переменных не может быть по порядку меньше постоянной Планка h , называется **принципом неопределенности Гейзенберга**.

Энергия и время являются канонически сопряженными величинами. Поэтому для них **также справедливо соотношение неопределенностей**

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

это соотношение означает, что **определение энергии с точностью ΔE должно занять интервал времени, равный, по меньшей мере**

$$\Delta t \sim \frac{h}{\Delta E}$$

Из данного выражения следует еще один важный вывод:

частота излученного фотона должна иметь неопределенность $\Delta \nu = \Delta E / h$, т.е. линии спектра должны характеризоваться частотой, равной

$$\nu \pm \Delta E / h$$

Опыт действительно показывает, что все спектральные линии размыты; измеряя ширину спектральной линии, можно оценить порядок времени существования микрочастицы в возбужденном состоянии.

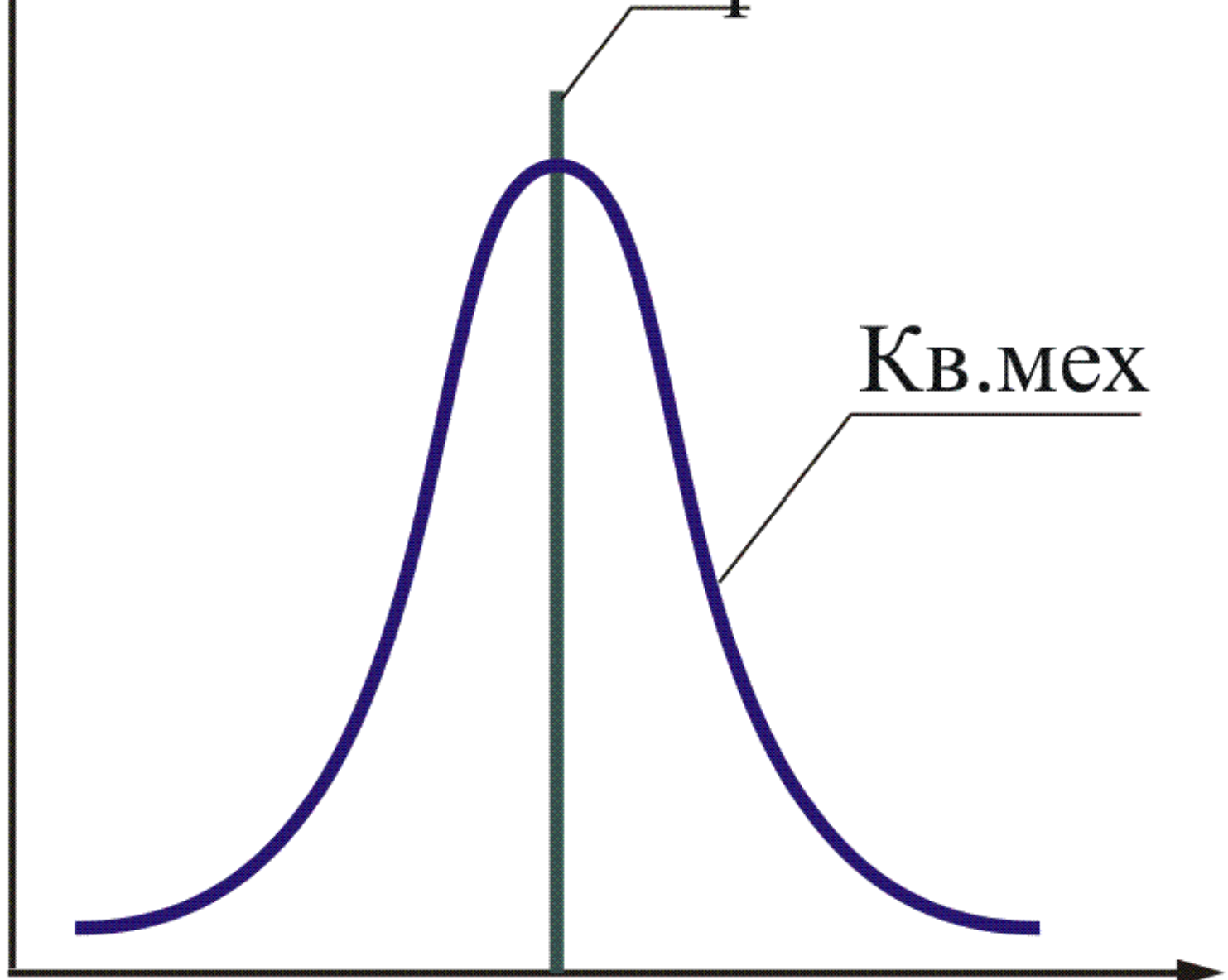
$P(r)$

Бор

Кв. мех

r_0

r





Соотношение неопределенностей Гейзенберга

$$\Delta p \Delta x \geq \frac{h}{2\pi}$$

<http://www.youtube.com/watch?v=ck9fZ4V2IKM>

$$\frac{dP}{dt} = ma_x = m \frac{d^2 X}{dt^2}$$



Чем

заменить?

Как описать движение микрочастиц
с учетом их волновых свойств?



Понятие о волновой функции

Понятие о волновой функции

а). Согласно волновым представлениям о природе света, **интенсивность** дифракционной картины пропорциональна **квадрату амплитуды** световой волны.

б). По представлениям фотонной теории, **интенсивность** определяется **числом фотонов**, попадающих в данную точку дифракционной картины.

в). Следовательно, **число фотонов** в данной точке дифракционной картины задается **квадратом амплитуды** световой волны.

г). Для одного фотона **квадрат амплитуды** определяет **вероятность** попадания фотона в ту или иную точку.

Необходимость вероятностного подхода к описанию микрочастиц, является важнейшей отличительной особенностью квантовой теории.

Можно ли волны де Бройля истолковывать как волны вероятности, т.е. считать, что вероятность обнаружить микрочастицу в различных точках пространства меняется по волновому закону?

Такое толкование волн де Бройля **неверно**, хотя бы потому, что тогда вероятность обнаружить частицу в некоторых точках пространства **может быть отрицательна**, что не имеет смысла.

Чтобы устранить эти трудности *немецкий физик М. Борн в 1926 г. предположил, что по волновому закону меняется не сама вероятность, а величина, названная амплитудой вероятности и обозначаемая*

$$\Psi(x, y, z, t).$$

Эту величину называют также *волновой функцией* (или Ψ – функцией).

Амплитуда вероятности может быть комплексной, и вероятность W пропорциональна квадрату ее модуля:

$$W \sim |\Psi(\tilde{o}, y, z, t)|^2,$$

где $|\Psi|^2 = \Psi\Psi^*$, где Ψ^* – функция комплексно-сопряженная с Ψ .

$$W \sim |\Psi(x, y, z, t)|^2,$$

Таким образом, *описание микрообъекта с помощью волновой функции имеет статистический, вероятностный характер:*

квадрат модуля волновой функции (квадрат модуля амплитуды волн де Бройля) определяет вероятность нахождения частицы в момент времени в области с координатами x и dx , y и dy , z и dz .

В квантовой механике состояние частицы описывается принципиально по-новому –

с помощью волновой функции, которая является основным носителем информации об ее корпускулярных и волновых свойствах.

Вероятность нахождения частицы в объеме V равна:

$$dW = |\Psi|^2 dV$$

Величина $|\Psi|^2=dW/dV$ (квадрат модуля Ψ – функции) имеет смысл плотности вероятности, т.е. определяет вероятность нахождения частицы в единице объема в окрестности точки, имеющей координаты x, y, z .

Таким образом, **физический смысл имеет не сама Ψ – функция, а квадрат ее модуля $|\Psi|^2$, которым определяется интенсивность волн де Бройля.**

Вероятность найти частицу в момент времени t в конечном объеме V , согласно теореме о сложении вероятностей, равна:

$$W = \int_V dW = \int_V |\Psi|^2 dV$$

Т.к. $|\Psi|^2 dV$ определяется как вероятность, то необходимо волновую функцию Ψ представить так, чтобы вероятность достоверного события **обращалась в единицу**, если за объем V принять бесконечный объем всего пространства.

Это означает, что при данной условии частица должна находиться где-то в пространстве.

Условия нормировки вероятностей:
$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi|^2 dV = 1$$

Условия нормировки вероятностей:

(7)

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi|^2 dV = 1,$$

где данный интеграл вычисляется *по всему бесконечному пространству*, т.е. по координатам x, y, z *от $-\infty$ до ∞* .

Таким образом, *условие нормировки говорит об объективном существовании частицы во времени и пространстве.*

**Вместо непрерывных
траекторий
волновая модель
предлагает**

**картину распределения
электронной плотности
по всему пространству.**

$$|\Psi|^2$$

**определяет вероятность нахождения
электрона в данной точке
пространства**

**Квадрат
волновой**

$$|\Psi|^2$$

**модуля
функции**

ВЕРОЯТНОСТЬ!



Чтобы волновая функция являлась объективной характеристикой состояния микрочастицы, **она должна удовлетворять ряду ограничительных условий.**

Функция Ψ , характеризующая вероятность обнаружить действия микрочастицы в элементе объема, **должна быть:**

- **конечной** (вероятность не может быть больше единицы);
- **однозначной** (вероятность не может быть неоднозначной величиной);
- **непрерывной** (вероятность не может меняться скачком).

Волновая функция удовлетворяет принципу суперпозиции: если система может находиться в различных состояниях, описываемых волновыми функциями $\Psi_1, \Psi_2, \dots, \Psi_n$, то она может находиться в состоянии, описываемом линейной комбинацией этих функций

$$\Psi = \sum_n C_n \Psi_n$$

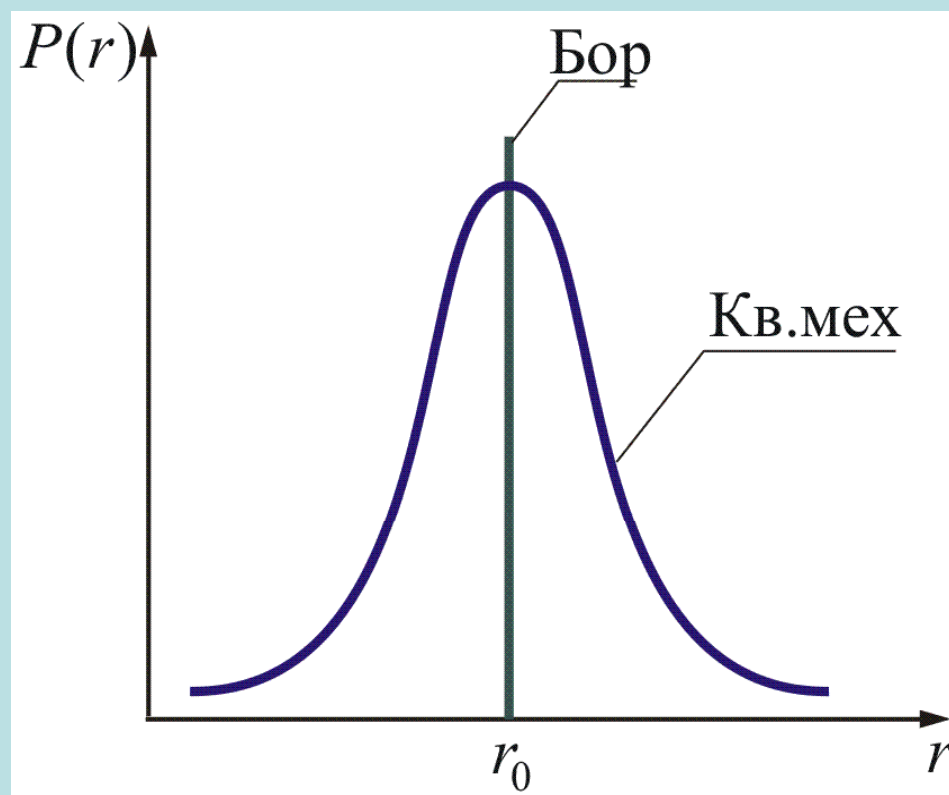
где C_n ($n = 1, 2, 3, \dots$) – произвольные, комплексные числа.

Сложение волновых функций (амплитуд вероятностей определяемых квадратами модулей волновых функций) **принципиально отличает квантовую теорию от классической статической теории**, в которой для независимых событий справедлива теорема сложения вероятностей.

Волновая функция Ψ является основной характеристикой состояния микробъектов.

Например, среднее расстояние $\langle r \rangle$ электрона от ядра вычисляется по формуле

$$\langle r \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} r |\Psi|^2 dV$$



Уравнение Шредингера

Уравнение Шредингера

Толкование волн де Бройля и соотношение неопределенностей Гейзенберга привели к выводу, что уравнением движения в квантовой механике, описывающей движение микрочастиц в различных силовых полях, должно быть уравнение, из которого бы вытекали наблюдаемые на опыте волновые свойства частиц.

Основное уравнение должно быть уравнением относительно волновой функции $\Psi(x, y, z, t)$, т.к. именно величина $|\Psi|^2$, осуществляет вероятность пребывания частицы в момент времени t в объеме dV , т.е. в области с координатами x и $x+dx$, y , и $y+dy$, z и $z+dz$.

Т.к. искомое уравнение должно описывать волновые свойства частиц, то оно должно быть волновым уравнением, подобно уравнению, описывающему электромагнитные волны.

Основное уравнение нерелятивистской квантовой механики сформулировано в 1926 г. Э.Шредингером.



Шредингер Эрвин (1887 – 1961) – австрийский физик-теоретик, один из создателей квантовой механики. Основные работы в области статистической физики, квантовой теории, квантовой механики, общей теории относительности, биофизики.

Разработал теорию движения микрочастиц – волновую механику, построил квантовую теорию возмущений – приближенный метод в квантовой механике. За создание волновой механики удостоен **Нобелевской премии**.

Уравнение Шредингера не
выводится, а *постулируется.*

Правильность этого уравнения
подтверждается согласием с опытом
получаемых с его помощью результатов,
что в свою очередь, придает ему
характер *закона природы.*

Уравнение Шредингера в общем виде записывается так:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi + U(x, y, z, t) \Psi = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t},$$

где $\hbar = \frac{h}{2\pi}$ - постоянная Планка,

Δ — оператор Лапласа $\left(\Delta \Psi = \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} \right),$

i — мнимая единица,

$U(x, y, z, t)$ — потенциальная функция частицы в силовом поле, в котором она движется,

Ψ — искомая волновая функция.

m — масса частицы.

Если силовое поле, в котором движется частица -- потенциальное, то **функция U не зависит явно от времени** и называется **потенциальной энергией**.

В этом случае решение уравнения Шредингера распадается на два сомножителя, один из которых зависит только от координаты, а другой – только от времени.

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

Здесь E – полная энергия частицы, которая в случае стационарного поля остается постоянной.

Уравнение Шредингера для стационарных состояний

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

E - полная энергия электрона

U - потенциальная энергия

Ψ - волновая функция электрона

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

Уравнение Шредингера для стационарных состояний

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

можно переписать в виде:

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

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U = \hat{H} \quad \text{– оператор Гамильтона, равный сумме операторов}$$

Гамильтониан является оператором энергии E .

В квантовой механике энергии и другим динамическим переменным сопоставляются *операторы*.

Соответственно рассматривают *операторы координат, импульса, момента импульса* и т.д.

<http://www.youtube.com/watch?v=P7n4tLA0azI>