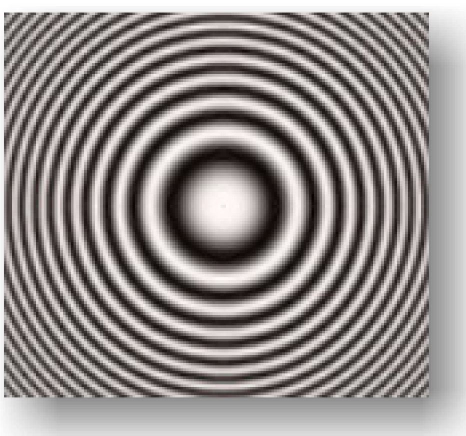
Волны де Бройля. Соотношение неопределенностей. Уравнение Шредингера. Частица в потенциальной яме



Лекция 1.
2 семестр.

Гипотеза де Бройля

В 1924 г. Луи де Бройль выдвинул гипотезу, что дуализм *не является* особенностью только оптических явлений, а имеет универсальный характер. Частицы вещества также обладают волновыми x

Луи де Бройль
(1892 – 1987), французский физик, удостоенный Нобелевской премии 1929 г. по физике за открытие волновой природы электрона.

Если фотон обладает энергией $E = h\nu$ и импульсом $p = h/\lambda$, то и частица (например, электрон), движущаяся с некоторой скоростью, обладает волновыми свойствами, т.е. с ***движением любой микрочастицы связано распространение волны.***

Согласно квантовой механике, свободное движение частицы с массой m и импульсом $p = m\upsilon$ (где υ – скорость частицы) можно представить как плоскую монохроматическую волну (*волну де Бройля*) с длиной волны

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

распространяющуюся в том же направлении (например, в направлении оси x), в котором движется частица. Здесь h – *Планка постоянная*.

x

Поскольку импульс сравнительно медленно движущейся частицы $p = \sqrt{2m_0T}$

то длину волны можно выразить и через энергию:

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2mT}}$$

T – кинетическая энергия частицы

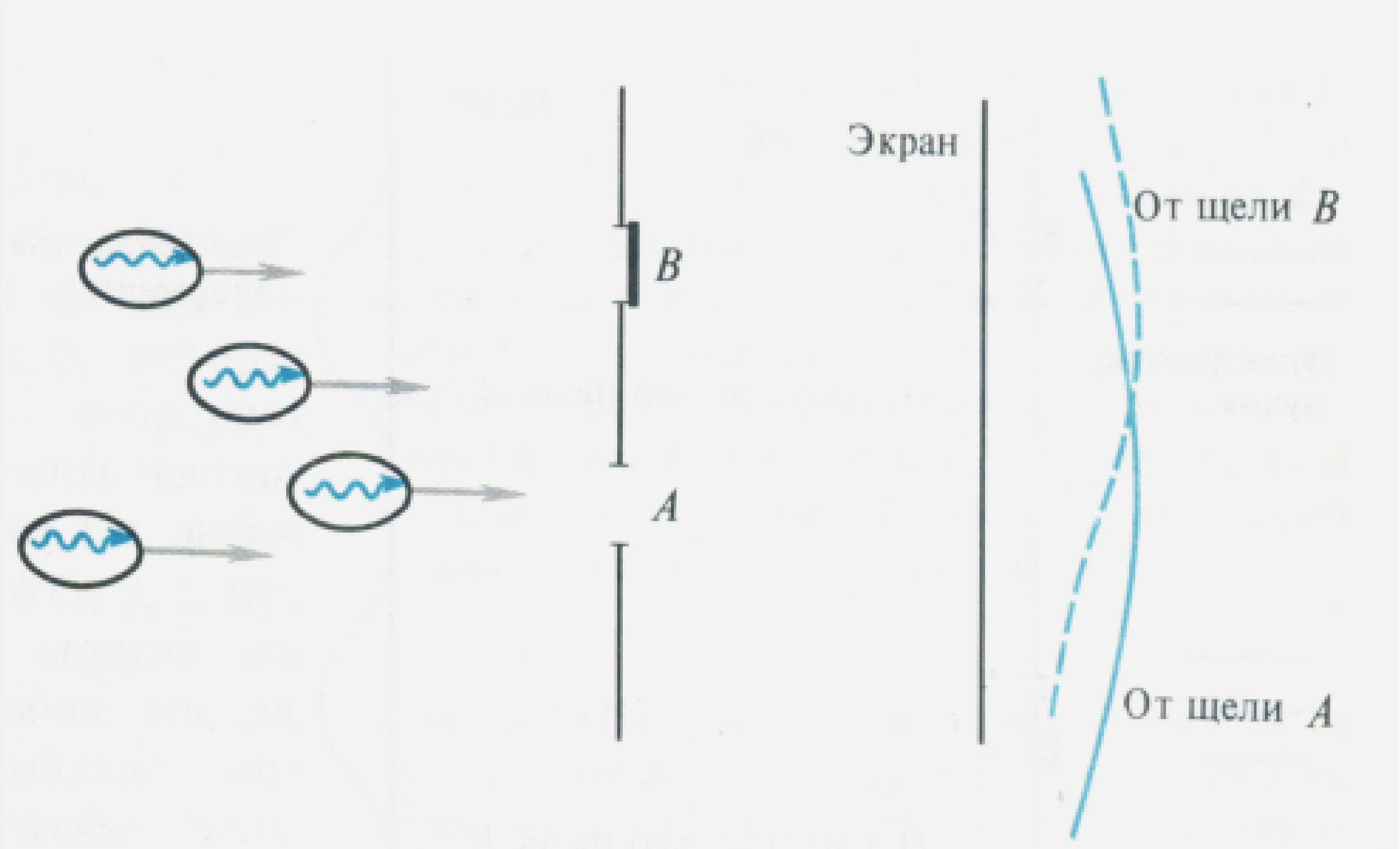
Экспериментальное подтверждение гипотезы де Бройля

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

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

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

Частица в двухщелевом интерферометре

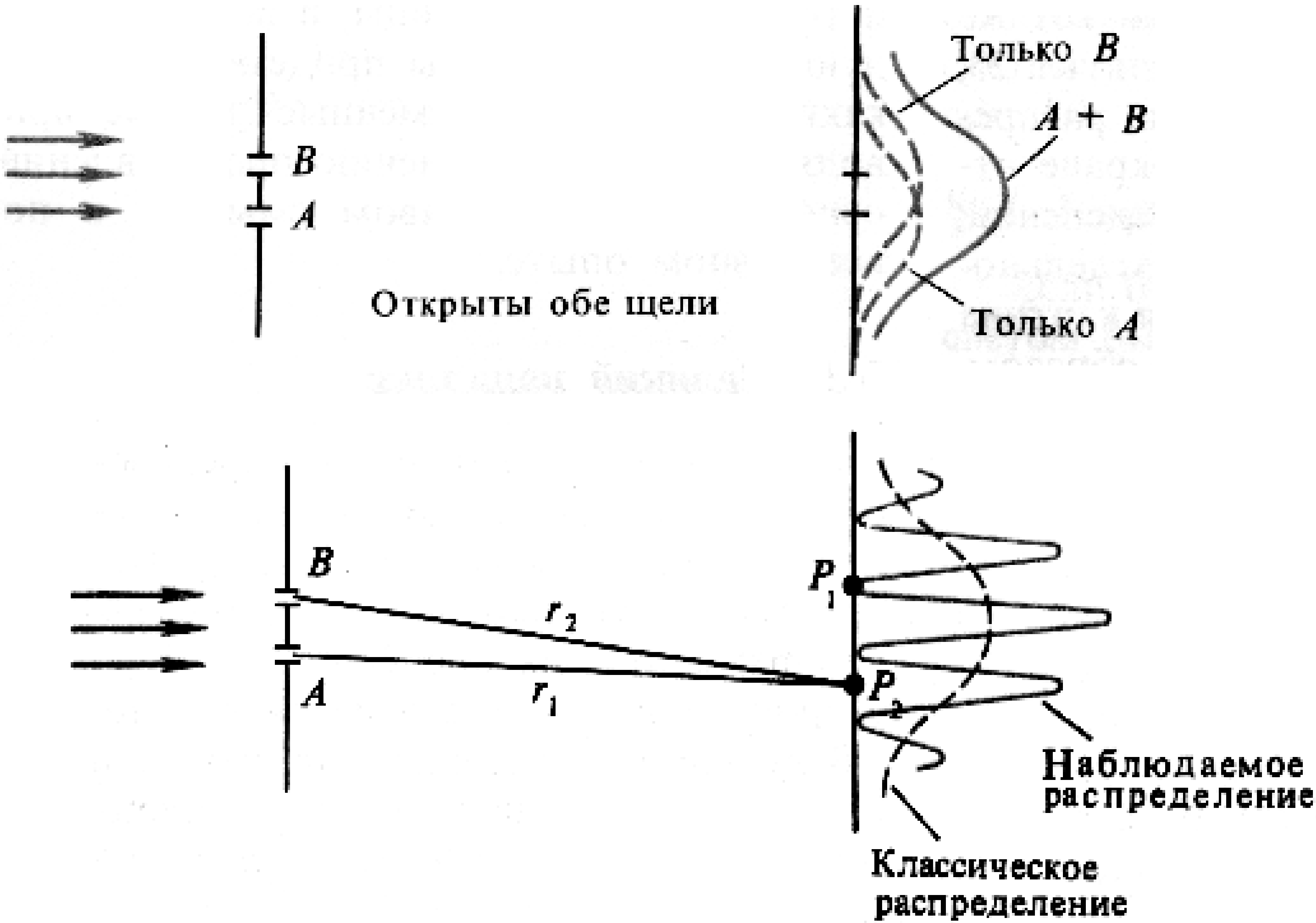


Распределение интенсивности, обусловленное фотонами, прошедшими через щель *A* (либо через щель *B*)

Распределение интенсивности электронов согласно классической физике

Электрон может пройти либо через щель A либо через щель B.

Распределение интенсивности электронов согласно <u>квантовой</u> теории



Пусть в точке P_1 на рисунке 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 ($r_2 - r_1 = \lambda/2$).

Дифракция частиц- рассеяние микрочастиц (электронов, нейтронов, атомов и т.п.) кристаллами или молекулами жидкостей и газов, при котором из начального пучка частиц данного типа возникают пучки этих частиц отклонённые в различных направлениях.

Позже наблюдалась дифракция протонов, а также дифракция нейтронов, получившая широкое распространение как один из методов исследования структуры вещества.

Так было доказано экспериментально, что волновые свойства присущи всем без исключения микрочастицам.

Дифракция частиц, сыгравшая в своё время столь большую роль в установлении двойственной природы материи – корпускулярно-волнового дуализма (и тем самым послужившая экспериментальным обоснованием квантовой механики), давно уже стала одним из главных рабочих методов для изучения строения вещества. На дифракции частиц основаны два важных современных метода анализа атомной структуры вещества – электронография и нейтронография.

Согласно двойственной корпускулярно-волновой природе частиц вещества, для описания микрочастиц используются то волновые, корпускулярные представления. Поэтому приписывать им все свойства волн и все свойства частиц нельзя.

Необходимо ввести некоторые ограничения в применении к объектам микромира понятий классической механики

Классическая механика

Частица движется по траектории

В любой момент времени у частицы можно определить координату и импульс

Квантовая механика

Понятие траектории неприменимо (частица обладает волновыми свойствами)

Невозможно говорить об одновременных значениях координаты и импульса

<u>Для микрочастиц невозможно</u> говорить об одновременных значениях координаты и импульса

Существует принципиальный предел точности, с которым такие переменные как координата, импульс , энергия и другие могут быть указаны и измерены

Соотношение неопределенностей Гейзенберга

Соотношение или принцип неопределенностей Гейзенберга утверждает, что невозможно одновременно точно определить значения координаты и соответствующих проекций импульса частицы:

$$\Delta p_x \cdot \Delta x \geq \hbar$$

где Δx и Δp_x – неопределённости значений координаты x и компоненты p_x импульса **p**

Второе соотношение устанавливает неопределенность измерения энергии ΔE за данный промежуток времени Δt

$$\Delta E \cdot \Delta t \geq \hbar$$

Смысл выражений

$$\Delta p_x \cdot \Delta x \geq \hbar$$

$$\Delta E \cdot \Delta t \geq \hbar$$

Микрочастица не может иметь и определенную координату (x,y,z) и соответствующую проекцию импульса

Невозможно одновременно измерить энергию микрочастицы в определенном состоянии и время пребывания в этом микросостоянии

Если положение микрочастицы определено абсолютно точно, то совершенно невозможно определить проекцию импульса и наоборот

Если значение энергии состояния определено абсолютно точно, то совершенно невозможно определить время пребывания в этом состоянии и наоборот

Эта невозможность не связана с несовершенством измерительных приборов, а является следствием специфики микрообъектов

Соотношение неопределенностей является квантовым ограничением применимости классической механики к микрообъектам

Выводы:

1. Невозможно состояние, в котором частица находилась бы в состоянии покоя.
2. При рассмотрении движения квантового объекта во многих случаях отказываемся от понятия траектории
3. Часто теряет смысл деления энергии на кинетическую и потенциальную (первая зависит от импульса, вторая от координат, которые не могут быть измерены одновременно).

Необходимо задать математический формализм, адекватный поведению микрочастиц.

Принципы построения теории:

1. Должны быть определены величины, задающие состояние частицы
2. Уравнение движения, определяющее изменение состояния частицы во времени
3. Физ. величины, доступные измерению, и способ получения их значений в данном состоянии (для сравнения теории с экспериментом)

Состояние микрочастицы задается $\psi(x,y,z,t)$ – **пси-функцией,** которая является комплексной величиной и формально обладает волновыми свойствами

В квантовой теории постановка вопроса состоит не в точном предсказании событий, а в определении вероятностей этих событий

Волновая функция

Математический формализм, с помощью которого устраняется парадокс, ставит в соответствие каждой частице амплитуду вероятности $\psi(x,y,z,t)$.

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

Функция ψ обладает свойствами классических волн, и поэтому ее называют волновой функцией.

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

$$dP = |\Psi|^2 dV = \Psi^* \Psi \, dV$$

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

Итак, непосредственный физический смысл имеет не сама пси-функция, а квадрат ее модуля, который определяет плотность вероятности. Т.е. вероятность нахождения частицы в единице объема и является измеряемой величиной

Уравнение Шредингера

Для описания поведения микрочастиц, обладающих корпускулярными и волновыми свойствами, не пригодны уравнения классической физики (уравнения Ньютона).

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

В*ременное уравнение Шредингера*, позволяющее определить в любой момент времени волновую функцию Ψ для частицы массы m_0, движущейся 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

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

В задачах квантовой механики дифференциальное уравнение в частных производных решается с учетом начальных и граничных условий на волновую функцию.

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

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

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 частицы, движущейся в силовом поле.

В квантовой механике существует класс задач, для которых силовая функция $U(x,y,z,)$ не зависит от времени и *она* имеет смысл потенциальной энергии частицы.

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

Эти состояния называются стационарными состояниями.

Поскольку $U(x,y,z)$ в уравнении Шредингера не зависит явно от времени, то функцию $\Psi(x,y,z,t)$ следует искать 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.

Константа *E* представляет полную энергию квантовомеханической системы.

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

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

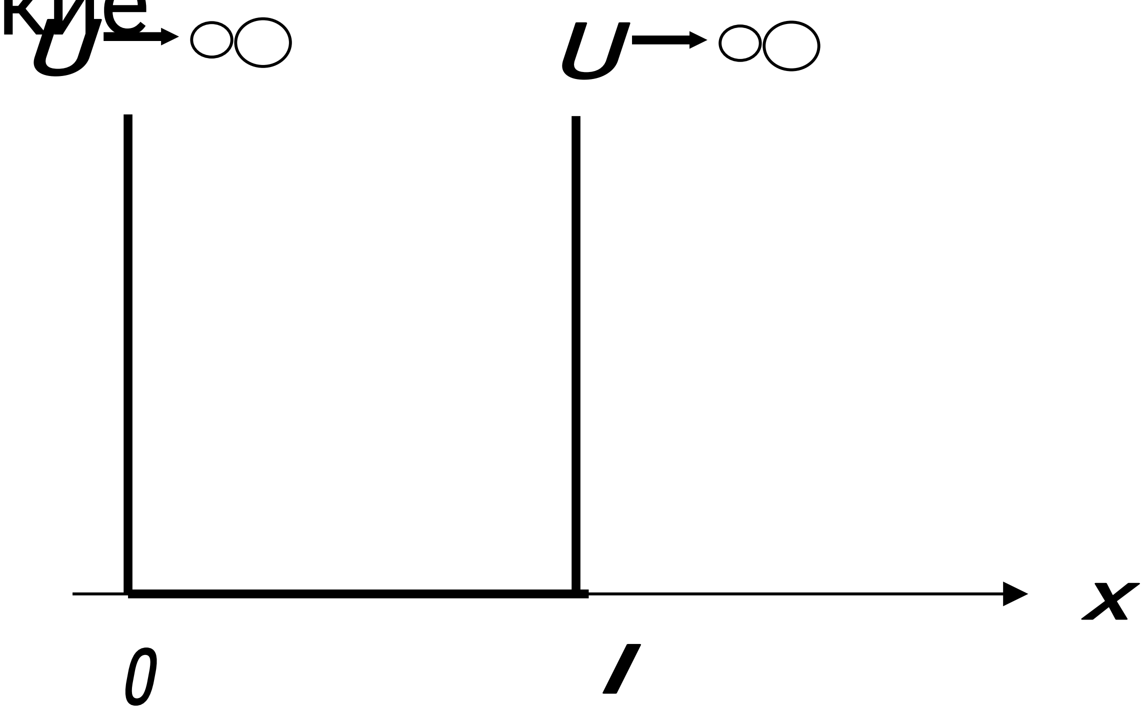
Полученное уравнение называется *уравнением Шредингера для стационарных состояний.*

Стационарным состоянием называется состояние квантовой системы, при котором её энергия и другие динамические величины, характеризующие квантовое состояние, не изменяются с течением времени.

Частица в прямоугольной яме

Рассмотрим поведение частицы в одномерной потенциальной яме U(x). Ширина ямы равна *l*, стенки ямы бесконечно высокие.

$$U(x) = \begin{cases} 0, & 0 < x < l \\ \infty, & l < x < 0, \end{cases}$$



Исходим из уравнения Шредингера. Для одномерного случая в пределах ямы (где U=0) уравнение упрощается:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + k^2 \psi = 0 \quad \text{, где} \qquad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

Общее решение имеет вид:

$$\psi(x) = a \sin(kx + \alpha)$$

a, *α* -произвольные постоянные

Учитывая все граничные условия, получим формулу для нахождения собственных значений энергии частицы в потенциальной яме

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ml^2} n^2, \quad n = 1, 2, 3, \ldots$$

Энергия оказалась квантованной и ее спектр - дискретный

Собственные функции, соответствующие собственным значениям энергии

$$\psi_{T}(x) = \sqrt{\frac{2}{l}} \sin \frac{\pi n x}{l}$$

Конспект

1. Туннельный эффект

2. Понятие о квантовых числах