ОСНОВЫ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

Волны де Бройля.
Опыты Дэвиссона и Джермера.
Соотношение неопределенностей
Гейзенберга.
Волновая функция и ее смысл.
Операторы физических величин.
Уравнение Шредингера.

Волны де Бройля

Луи де Бройль выдвинул гипотезу об универсальности корпускулярно-волнового дуализма. Со всякой свободно движущейся материальной частицей, обладающей энергией $\boldsymbol{E}$ и импульсом $\boldsymbol{p}$, де Бройль связал плоскую волну.

Фотон:

$$\psi(r,t) = C \cdot e^{-i(\omega t - kr)} \qquad k = \frac{2\pi}{\lambda} \qquad \omega = 2\pi\nu$$

$$E = h\nu \qquad p = \frac{E}{c} = \frac{h\nu}{c} = \frac{h}{\lambda}$$

Материальная частица

$$\left.\begin{array}{ll} \lambda = \dfrac{h}{p} & k = \dfrac{2\pi}{\lambda} \\[2ex] \nu = \dfrac{E}{h} & \omega = 2\pi\nu \end{array}\right\} \qquad \psi(r,t) = C \cdot e^{-i(\omega t - kr)}$$

Групповая скорость волн де Бройля

$$u = \frac{d\omega}{dk} = \frac{dE}{dp}$$

$$E = c\sqrt{(m_0 c)^2 + p^2} \longrightarrow u = \frac{pc}{\sqrt{(m_0 c)^2 + p^2}}$$

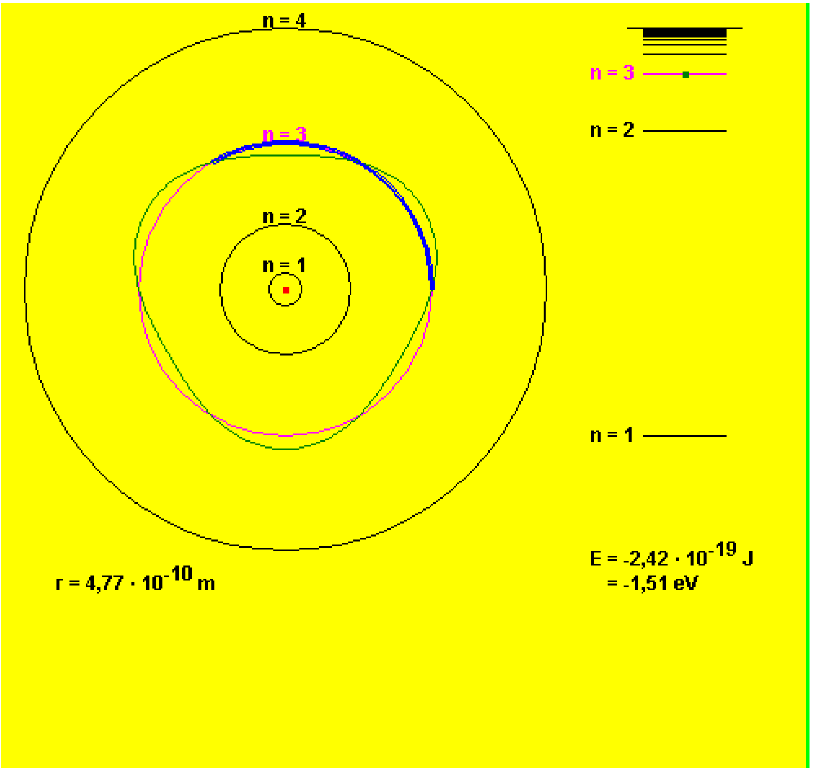
$$\downarrow$$

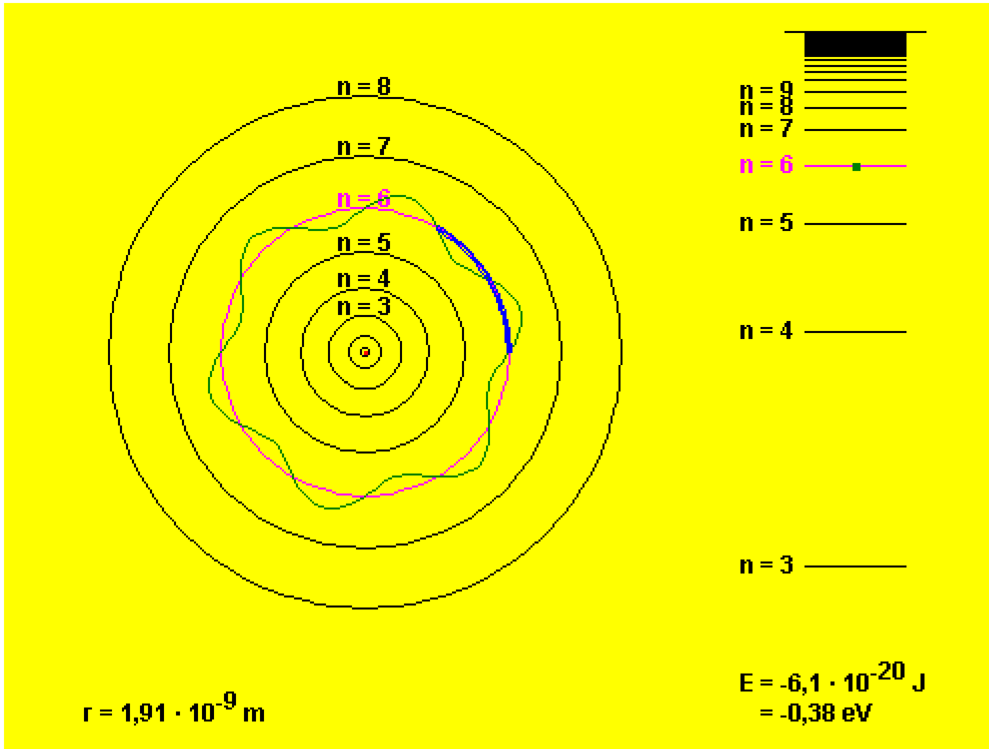
$$p = \frac{m_0 V}{\sqrt{1-(V/c)^2}} \longrightarrow u = \frac{m_0 V c}{\sqrt{(m_0 c)^2\left(1-(V/c)^2\right)+(m_0 V)^2}} = V$$

Групповая скорость (скорость переноса энергии) волн де Бройля совпадает со скоростью материальной частицы.

На боровской орбите укладывается целое число волн де Бройля электрона.

$$m_e V r_n = n\frac{h}{2\pi} \qquad\qquad 2\pi r_n = n\frac{h}{m_e V} = n\lambda$$





Оценка длины волны де Бройля

Пуля $V = 300\,м/с$ $m = 10г$

$$\lambda = \frac{h}{mV} \approx \frac{10^{-34}}{10^{-2}10^{2}} = 10^{-34}\,м$$

Электрон ускоренный полем $U = 1000B$

$$eU = \frac{1}{2}mV^{2}$$

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2meU}} = 0.04нм$$

Опыты Дэвиссона и Джермера

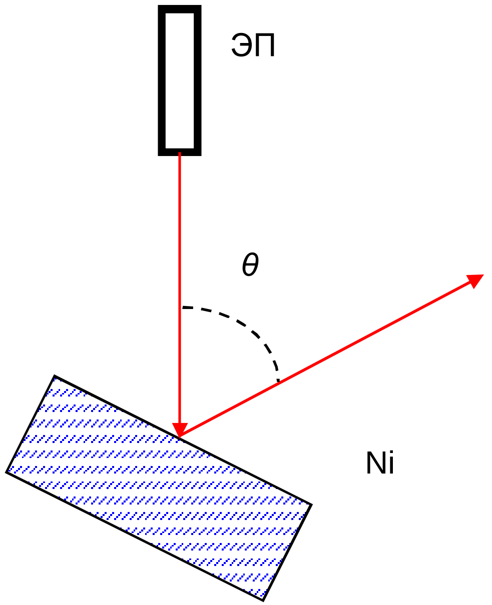
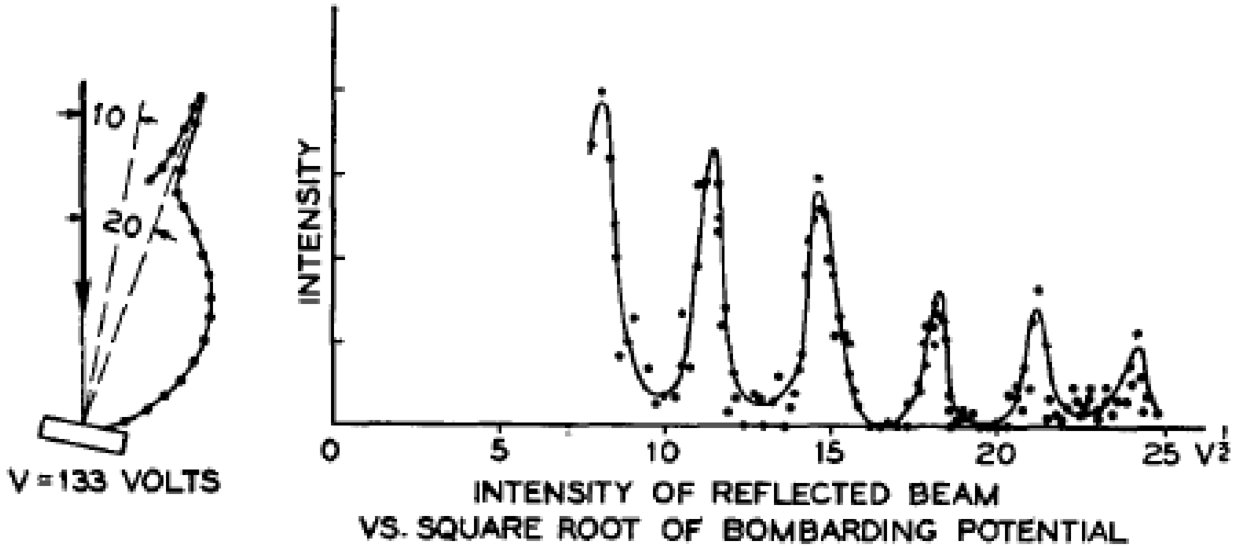


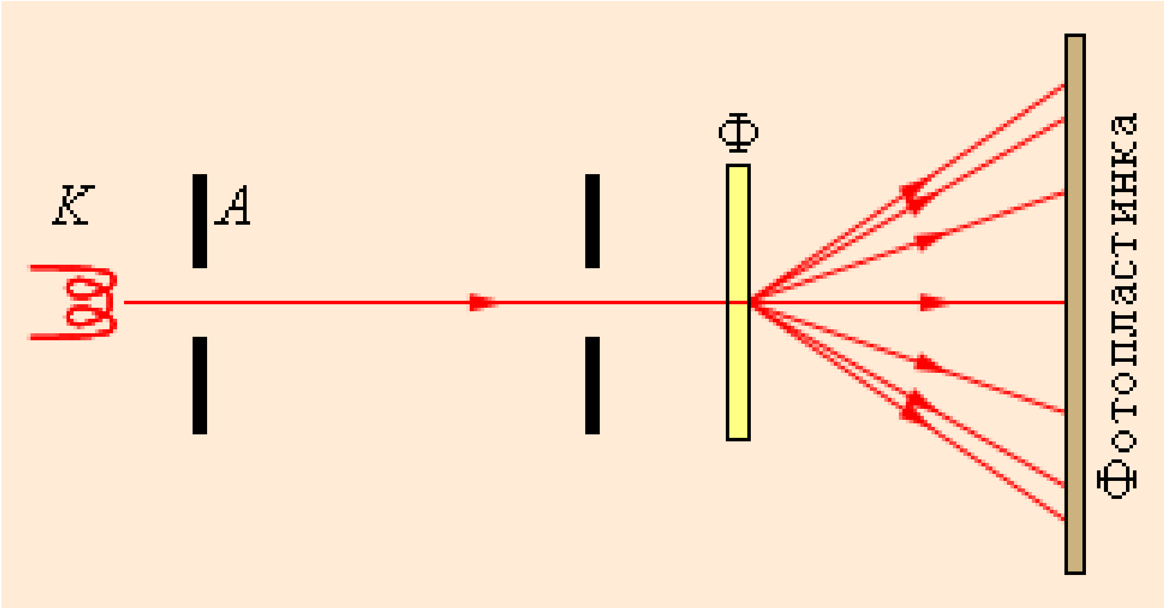
FIG. 2.



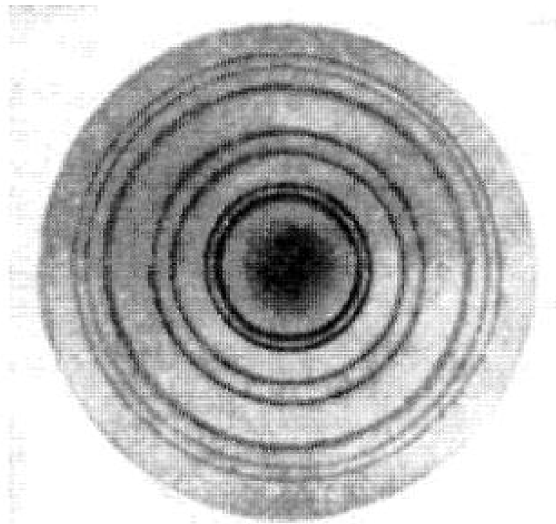
Showing selectivity of electron reflection—angle of incidence 10 degrees.

Формула Вульфа – Брэгга для дифракции рентгеновских лучей на кристаллах

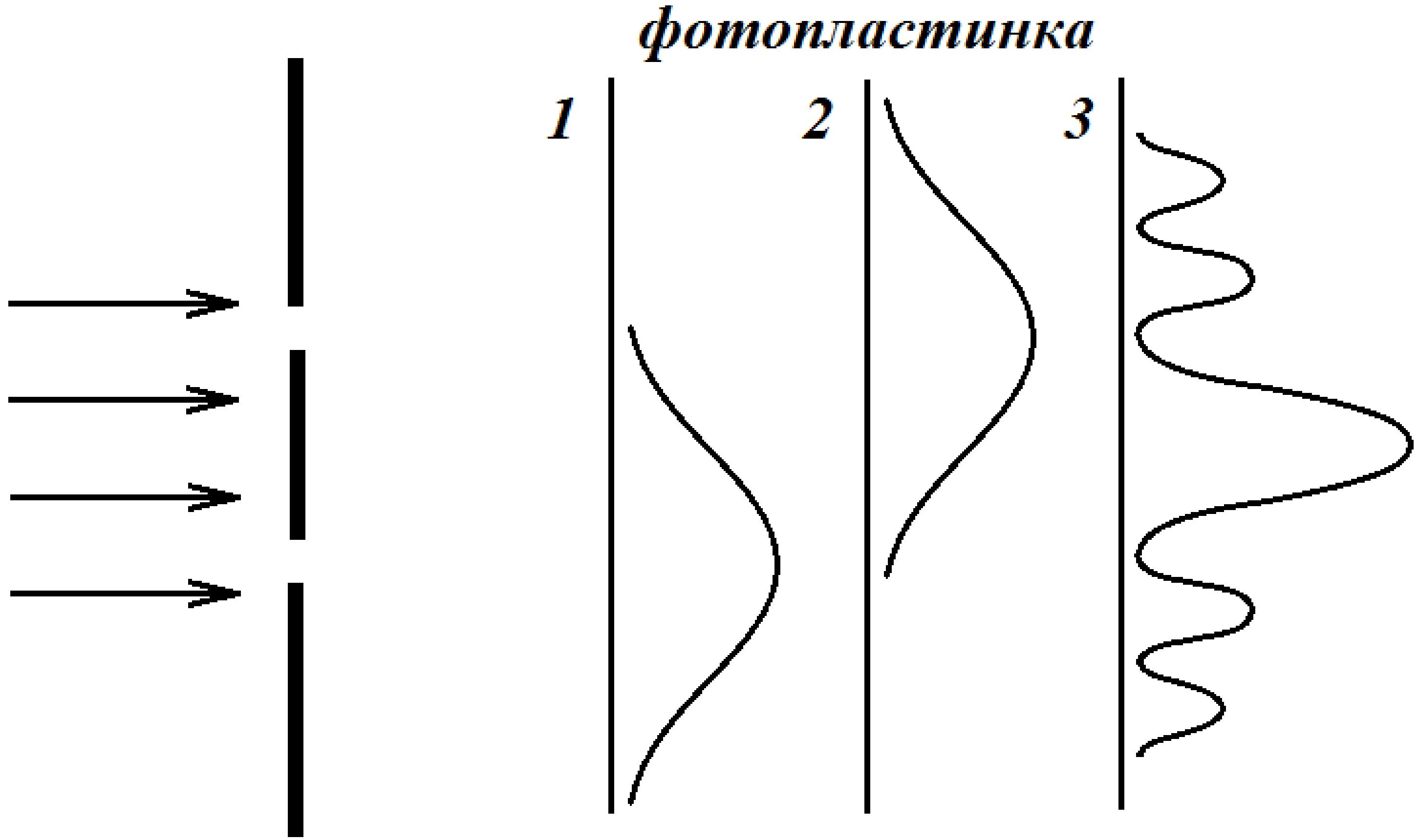
$$n\lambda = 2d \cdot \sin\theta$$



Томсон наблюдал дифракционную картину, возникающую при прохождении пучка электронов через тонкую фольгу из золота.



Дифракция электрона на двух щелях



Волны де Бройля дают статистическое описание движения микрочастиц.

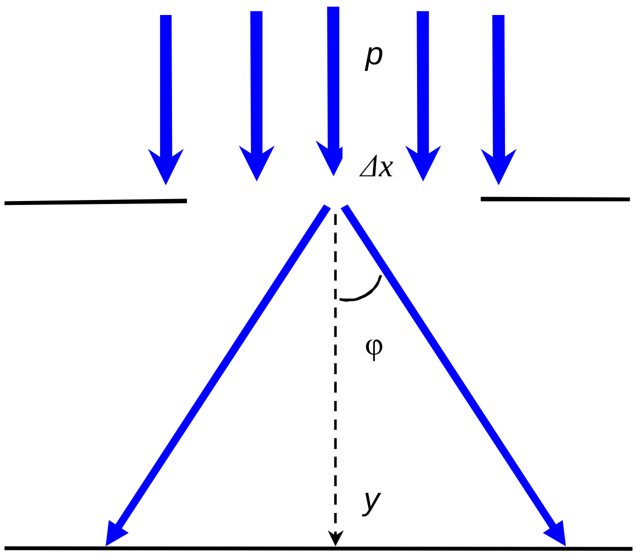
Борн:

интенсивность волн де Бройля в каком-либо месте пространства пропорциональна вероятности обнаружить частицу в этом месте.

Трактовка корпускулярно-волнового дуализма данная Фоком В.А.

Можно сказать, что для атомного объекта существует потенциальная возможность проявлять себя, в зависимости от внешних условий, либо как волна, либо как частица, либо промежуточным образом. Именно в этой потенциальной возможности различных проявлений свойств, присущих микрообъекту, и состоит дуализм волна — частица. Всякое иное, более буквальное, понимание этого дуализма в виде какой-нибудь модели неправильно.

Соотношение неопределенностей Гейзенберга



интерференционный минимум

$$p_y = p \qquad p_x = 0$$

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

$$p_x = p\sin\varphi = \frac{h}{\lambda}\sin\varphi$$

$$\Delta x \cdot \sin\varphi = \lambda$$

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

Соотношение неопределенностей Гейзенберга

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

$$\Delta p_y \cdot \Delta y \geq h$$

$$\Delta p_z \cdot \Delta z \geq h$$

Для микрочастицы не может быть одновременно сколь угодно точно определены координата и сопряженная ей проекция импульса.

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

Волновая функция

статистически описывает состояние микроскопической системы.

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

- конечна;
- однозначная;
- непрерывная;
- непрерывны производные

Волновая функция не измеряема.

Физический смысл имеет плотность вероятности

$$dW(x, y, z, t) = |\Psi(x, y, z, t)|^2 dV$$

$$|\Psi|^2 = \Psi \cdot \overline{\Psi}$$

Волновая функция

Условие нормировки

$$\int_V \left|\Psi(x, y, z, t)\right|^2 dV = 1$$

Принцип суперпозиции

$$\Psi = c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2$$

Среднее значение

$$\langle r \rangle = \int_V r(x, y, z) \cdot \left|\Psi(x, y, z)\right|^2 dV$$

- ***Свободная частица***

$$E = \frac{p^2}{2m} \qquad U(x,t) = 0 \qquad E = \hbar\omega \qquad p = \hbar k$$

$$\Psi(x,t) = C \cdot e^{-i(\omega t - kx)} \qquad \Psi(x,t) = C \cdot e^{-i(Et - px)/\hbar}$$

$$\left.\begin{aligned} &\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t) = \frac{1}{i\hbar} E \cdot \Psi(x,t) \\ &\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi(x,t) = -\frac{2m}{\hbar^2} E \cdot \Psi(x,t) \end{aligned}\right\} \quad i\hbar \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi(x,t)$$

- ***Операторы***

Оператор - способ, с помощью которого одной функции сопоставляется другая

$$\Psi\left(x,t\right)=C\cdot e^{-i\left(Et-px\right)/\hbar}$$

$$\frac{\partial}{\partial x}\Psi\left(x,t\right)=i\frac{p}{\hbar}C\cdot e^{-i\left(Et-px\right)/\hbar}$$

$$-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\Psi\left(x,t\right)=p\Psi\left(x,t\right)$$

- ***Операторы***

$$-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\Psi\left(x,t\right)= p\Psi\left(x,t\right)$$

$$\hat{P}_x\Psi = p_x\Psi$$

$$\hat{P}_x\left(r,t\right)=-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$$

$$\hat{P}_z\left(r,t\right)=-i\hbar\frac{\partial}{\partial z}$$

$$\hat{P}_y\left(r,t\right)=-i\hbar\frac{\partial}{\partial y}$$

Оператор импульса $\hat{P}=-i\hbar\nabla$

Оператор энергии

$$\frac{\partial}{\partial t}\Psi\left(x,t\right)=\frac{1}{i\hbar}E\cdot\Psi\left(x,t\right) \qquad \hat{E}=i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$$

Оператор кинетической энергии

$$\hat{P}_x^2=\hat{P}_x\hat{P}_x=-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)=-\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial x^2}$$

$$\hat{T}=\frac{1}{2m}\left(\hat{P}_x^2+\hat{P}_y^2+\hat{P}_z^2\right)=-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) \qquad \hat{T}=-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta$$

Оператор потенциальной энергии есть просто умножение на функцию

$$\hat{U}=U\left(r,t\right)$$

Уравнение Шредингера

$$i\hbar\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi(x,t)$$

Оператор полной энергии (оператор Гамильтона)

$$\hat{E}=\hat{T}+\hat{U}$$

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(r,t)=\hat{E}\Psi(r,t)$$

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

Уравнение Шредингера

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

Уравнение Шредингера справедливо для частицы, движущейся со скоростью, много меньшей скорости света.

Уравнение постулируется.
Критерий – согласие с опытом.
Выполняется принцип соответствия.