Тема 2. Квантовые свойства частиц

П.1. Моделирование вещества. Волна де Бройля

П.2. Соотношения неопределенностей Гейзенберга.

П.3. Волновая функция (ВФ), ее основные свойства.

П.4. Свободная частица.

П.5 Уравнение Шредингера.

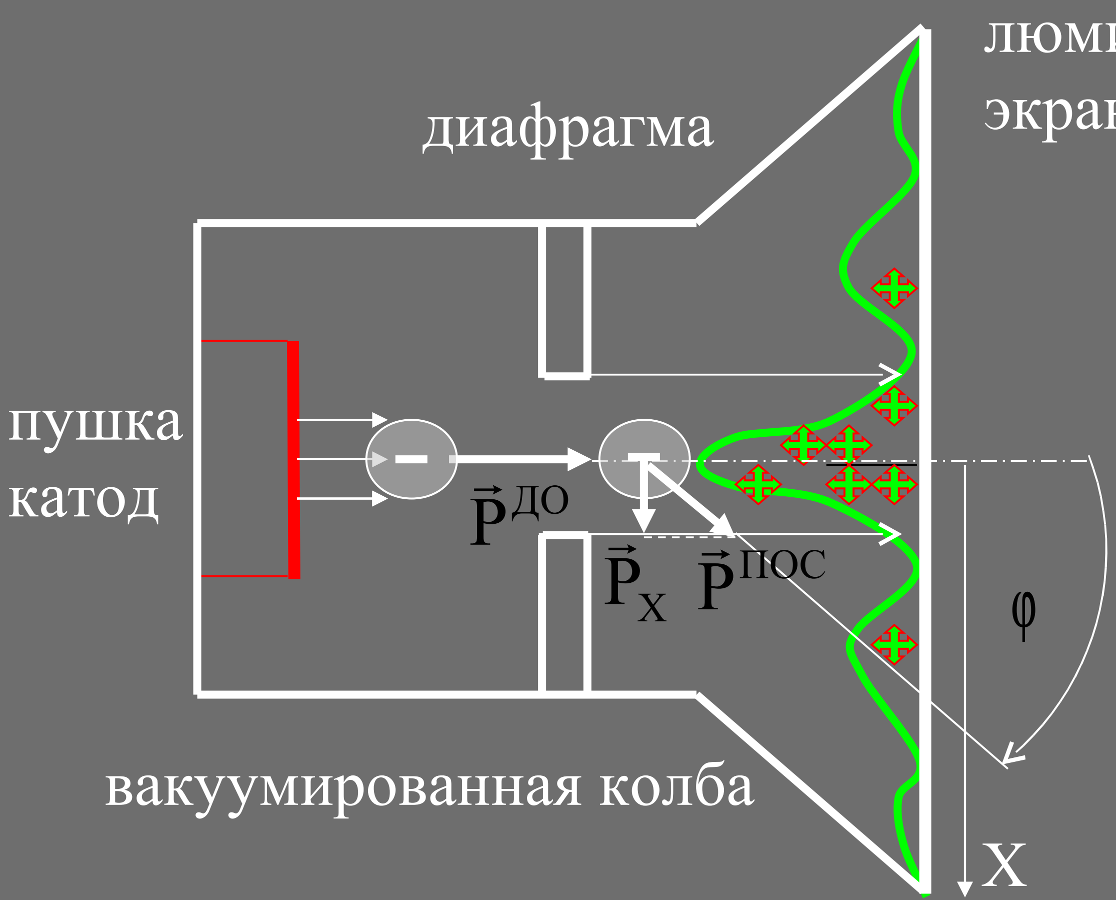
П.1. Моделирование вещества. Волна де Бройля

Проблема: Как моделировать частицы, из которых состоит обычное вещество?

Известно, как моделировать ЭМИ в различных ситуациях.

Дифракция электронов это явление, при котором поток электронов надо моделировать как волну.

Рассмотрим устройство электронно-лучевой трубки, в которой наблюдается явление дифракции электронов.



Такая картина устойчивого перераспределения интенсивности свечения экрана наблюдается в эксперименте.

Волна, описывающая наблюдаемую дифракцию электронов, имеет длину волны

$$\lambda = \frac{h}{m_{эл} V_{эл}}.$$

ТЕСТ

Волна, имеющая $\lambda = \frac{h}{p}$ ***и моделирующая движение частицы через отверстие, получила название <u>волны де Бройля</u>.***

<u>Замечание:</u> Взаимодействие электрона с люминофором требует модели – <u>частица</u>. При попадании электрона на люминофор наблюдается <u>вспышка</u> зерна люминофора.

Модель «поток частиц» применяется для электронов, движущихся от пушки до диафрагмы и от диафрагмы до экрана.

<u>Интенсивность</u> свечения экрана (количество вспышек на единицу площади экрана за 1 сек) пропорциональна <u>плотности</u> <u>вероятности</u> попадания электрона в область <u>вблизи</u> данной точки x на экране трубки.

Вывод:

Волна, моделирующая электрон, есть волна плотности вероятности.

ТЕСТ

П.2. Соотношения неопределенностей Гейзенберга.

Проблема:

Что происходит с корпускулярными характеристиками частицы, когда применима волновая модель?

Известно, что у дифрагировавшего на щели электрона проявляется вертикальная составляющая импульса $\Delta P_X^{\text{ПОСЛЕ}}$, которой не было до щели (см. рисунок).

Ее можно считать неопределенностью импульса, т.к. после щели импульс равен $\vec{P}_{\text{ПОСЛЕ}} = \vec{P}_{\text{ДО}} \pm \Delta \vec{P}_X^{\text{ПОСЛЕ}}$.

Из анализа дифракционной картины можно получить следующее соотношение:

$$\Delta P_X^{\text{ПОСЛЕ}} \geq \frac{\hbar}{d},$$ где ширина щели в диафрагме $d = 2\Delta x$.

Отсюда

$$\Delta P_X^{\text{ПОСЛЕ}} \Delta x \geq \frac{\hbar}{2}$$ - соотношение неопределенностей для проекций импульса и координаты на OX.

Аналогично для трехмерного случая:

$$\Delta P_Y \Delta y \geq \frac{\hbar}{2}, \quad \Delta P_Z \Delta z \geq \frac{\hbar}{2}.$$ Для энергии $$\Delta E \cdot \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}.$$

Соотношения неопределенностей Гейзенберга позволяют сопоставить характеристики волновой и корпускулярной сторон универсальной модели (волна и поток частиц – корпускул).

ТЕСТ

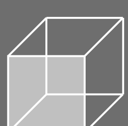
П.3. Волновая функция (ВФ), ее основные свойства.

Любые движущиеся частицы можно моделировать с помощью волновых функций $\psi(\vec{r}, t)$.

<u>Волновая функция</u> есть волна плотности вероятности, моделирующая движение любого материального объекта.

<u>Проблема</u>: Какими свойствами обладает ВФ, каков ее физический смысл?

Для элементарного объема dV



dP – элементарная вероятность попадания туда частицы пропорциональна dV:

$$dP = |\psi|^2 \, dV$$

Физический смысл ВФ: квадрат модуля волновой функции есть плотность вероятности обнаружения частицы вблизи данной точки.

$$|\psi|^2 = \frac{dP}{dV}$$

<u>Условие нормировки волновой функции</u>:

Если частица действительно присутствует в данном объеме V, то имеет место стопроцентная вероятность (полная достоверность) обнаружить ее в этом объеме.

Если частица в объеме V есть, то P(V)=100%=1, или

$$\int_V |\psi|^2 dV = 1$$

- условие нормировки.

<u>Замечание:</u> Волновая функция должна быть непрерывной и гладкой функцией координат и времени.

ТЕСТ ТЕСТ

П.4. Свободная частица.

Задача: построить квантовомеханическое описание наиболее простого объекта.

Решение: наиболее простым объектом является свободная частица, движущаяся в свободном пространстве.

Свободной называется частица, на которую, нет никаких воздействий.

Из классической механики мы знаем, что такая частица в инерциальной системе отсчета движется равномерно и прямолинейно, либо покоится: $\vec{V} = \text{const}, \quad \text{если} \quad \vec{F}_{\text{СУМ}} = 0.$

ЗАМЕЧАНИЕ: Для свободной частицы с неизменной массой не будут меняться также импульс и кинетическая энергия:

$$\vec{P} = \text{const} \quad \text{и} \quad E_{\text{К}} = \text{const}.$$

СЛЕДСТВИЕ: Для свободной частицы $\lambda = \frac{h}{P} = \text{const}$,

и при ***волновом моделировании*** свободная частица выглядит, как гармоническая волна (λ = const). Запишем общий вид гармонической волны:

$$\psi(\vec{r}, t) = A_0 \cos(\omega t - \vec{k}\vec{r}),$$

где $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ – волновое число,

циклическая частота ω, обычная частота $\nu = \frac{1}{T}$.

Длина волны λ - расстояние проходимое волной за период.

<u>Замечание:</u> Гармоническая волна – <u>абстракция</u>, она нигде не начинается и нигде и никогда не заканчивается.

Область, которую занимает волна (частица), равна бесконечности. Получается противоречие со здравым смыслом – частица <u>занимает все пространство</u>, т.е. вероятность найти ее везде одна и та же.

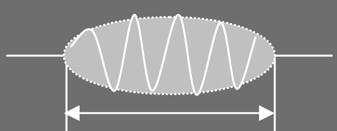
Замечание: В комплексном виде волновая функция для свободной частицы выглядит так:

$$\hat{\psi}(x,t) = \psi_0 e^{-i(\omega t - kx)}.$$

Выход из противоречия: локализация волны и частицы.

Рассмотрим, как моделировать с помощью волны частицу, которая локализована, т.е. находится в определенной области пространства. Попробуем ограничить синусоиду.

Моделью "реальной" частицы является «волновой пакет».



$\Delta x \neq \infty$, $\Delta p \neq 0.$

Частица в данном случае локализована на отрезке Δx.

Неопределенность импульса определяется соотношением (неопределенностей Гейзенберга):

$$\Delta p = \frac{\hbar}{2\Delta x}.$$

ТЕСТ

Это означает, что у частицы нет точной координаты и точного значения скорости. Бессмысленно говорить и о траектории движения частицы. Можно говорить только о вероятности найти частицу в той или иной области.

Ее определяет квадрат модуля волновой функции.

Проблема: Как движется волновой пакет, описывающий локализованную частицу?

Из теоремы Фурье справедливо представление волнового пакета в виде интеграла Фурье по гармоническим волнам:

$$\psi(x,t) = \int_{\omega_0-\Delta\omega}^{\omega_0+\Delta\omega} \psi_0(\omega)\cos(\omega t - kx)\,d\omega .$$

Вывод: Совокупность синусоид с частотами, близкими к ω_0, является моделью, описывающей реальную частицу, локализованную на отрезке Δx .

Ее импульс имеет неопределенность Δp .

Скорость движения частицы есть групповая скорость для волнового пакета.

Противоречие: Фазовая скорость отдельных составляющих оказывается различной, что приводит к дисперсии даже в вакууме. Форма пакета с течением времени «размывается».

П.5 Уравнение Шредингера.

Проблема: Какое уравнение справедливо для ВФ в конкретных случаях?

Решение: Возьмем простой частный случай – свободную частицу (фотон)

$$\hat{\psi}(x,t) = \psi_0 e^{-i(\omega t - kx)}.$$

Преобразуем это выражение: циклическую частоту и волновое число свяжем с энергией Е и импульсом Р.

$$E = h\nu = \frac{h\omega}{2\pi} = \hbar\omega, \quad \omega = \frac{E}{\hbar} = \text{const}.$$

По определению $k = \frac{2\pi}{\lambda}$, $\lambda = \frac{h}{P}$, отсюда: $k = \frac{P}{\hbar} = \text{const}.$

Подставим в ВФ и получим $\hat{\psi}(x,t) = \psi_0 e^{-\frac{i}{\hbar}(Et - Px)}$.

Продифференцируем по t и по x:

$$\frac{d\hat{\psi}}{dt} = -\frac{i}{\hbar}E\hat{\psi}, \quad \frac{d^2\hat{\psi}}{dx^2} = -\frac{1}{\hbar^2}P^2\hat{\psi}.$$ Отсюда

$$E = -\frac{\hbar}{i}\frac{1}{\hat{\psi}}\frac{d\hat{\psi}}{dt} = i\hbar\frac{1}{\hat{\psi}}\frac{d\hat{\psi}}{dt}, \qquad P^2 = -\hbar^2\frac{1}{\hat{\psi}}\frac{d^2\hat{\psi}}{dx^2}.$$

Из механики для МТ имеем: $\frac{P^2}{2m} + U = E$. Подставим и получим

$$U - \frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\hat{\psi}}\frac{d^2\hat{\psi}}{dx^2} = i\hbar\frac{1}{\hat{\psi}}\frac{d\hat{\psi}}{dt}.$$ Домножим на $\hat{\psi}$ слева и справа, перегруппируем

и получим ***нестационарное уравнение Шредингера:*** $$\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\hat{\psi}}{dx^2} + i\hbar\frac{d\hat{\psi}}{dt} - U\hat{\psi} = 0.$$

ЗАДАЧА: Получить уравнение, в котором не было бы времени.

Такие уравнения называются стационарными. Их решения не зависят от времени и описывают неменяющееся, устойчивое состояние частицы.

Частица, движущаяся в потенциальном поле с потенциальной энергией U(x,y,z), имеет ВФ вида

$$\hat{\psi}(x,t) = \psi_0 e^{\frac{i}{\hbar}Px} e^{-\frac{i}{\hbar}Et} = \hat{\psi}(x) \cdot \hat{\psi}(t).$$

У каждого слагаемого в уравнении Шредингера - одинаковый общий множитель, и, если он не равен 0, то на него можно разделить все слагаемые. Получим:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2}(E - U)\psi = 0$$

- ***стационарное уравнение Шредингера.***

ТЕСТ