Лекция 14

ПОНЯТИЕ О КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ

Вопросы:

1. **Гипотеза де Бройля и соотношения неопределенностей Гейзенберга.**
2. **Волновая функция и уравнение Шредингера.**

Возникновение квантовой механики

Теория Бора является внутренне противоречивой, т.к. сочетает в себе и классические, и квантовые представления. Она не может объяснить строение многоэлектронных атомов.

Вернер Гейзенберг (1901 – 1976)

Основы *квантовой (волновой) механики*, последовательно объясняющей строение микромира, были созданы в 1923 – – 1931 г.г.

Эрвин Шредингер (1887 – 1961)

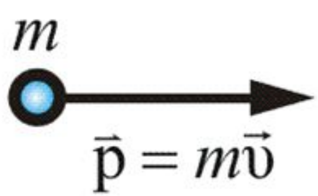
Квантовая механика раскрывает <u>три основных свойства</u> микрообъектов (микрочастиц):

- **их волновую природу («частица-волна»);**
- **вероятностный (статистический) характер явлений микромира;**
- **квантованность внутриатомных процессов и характеристик.**

Гипотеза де Бройля

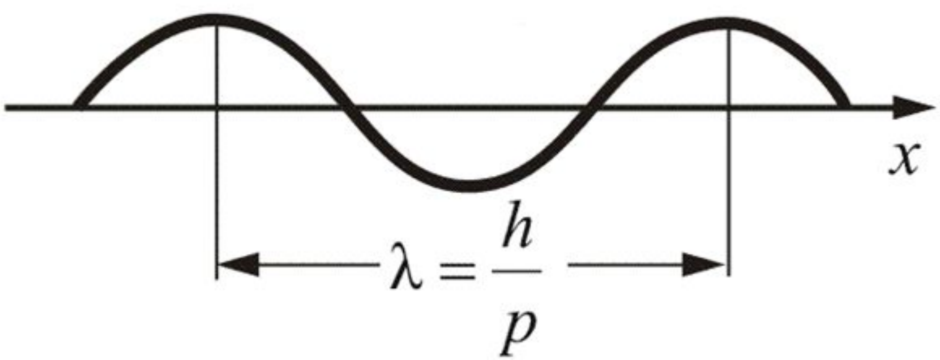
Луи де Бройль (1892 – 1987)

В 1923 г. французский физик Л. де Бройль выдвинул *гипотезу*: с движением электрона или какой-либо другой микрочастицы связан волновой процесс, длина волны которого (*длина волны де Бройля*) равна



$$\lambda_{Б} = \frac{h}{p}, \text{ где } p$$

– *импульс частицы*.



Движущуюся микрочастицу следует рассматривать как объект «частица-волна».

Таким образом, по де Бройлю, дуализм присущ не только оптике, но имеет универсальное значение.

Формулы де Бройля

1. ***Нерелятивистский случай*:**

$$v \ll c \ (\text{или } W_{\text{кин}} \ll W_0)$$

$$\lambda_{\text{Б}} = \frac{h}{m_0 v} = \frac{h}{\sqrt{2 m_0 W_{\text{кин}}}}$$

2. ***Релятивистский случай*:**

$$v \sim c \ (\text{или } W_{\text{кин}} \sim W_0)$$

$$\lambda_{\text{Б}} = \frac{h}{m_0 v} \cdot \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}} = \frac{hc}{\sqrt{W_{\text{кин}} \cdot (W_{\text{кин}} + 2W_0)}}$$

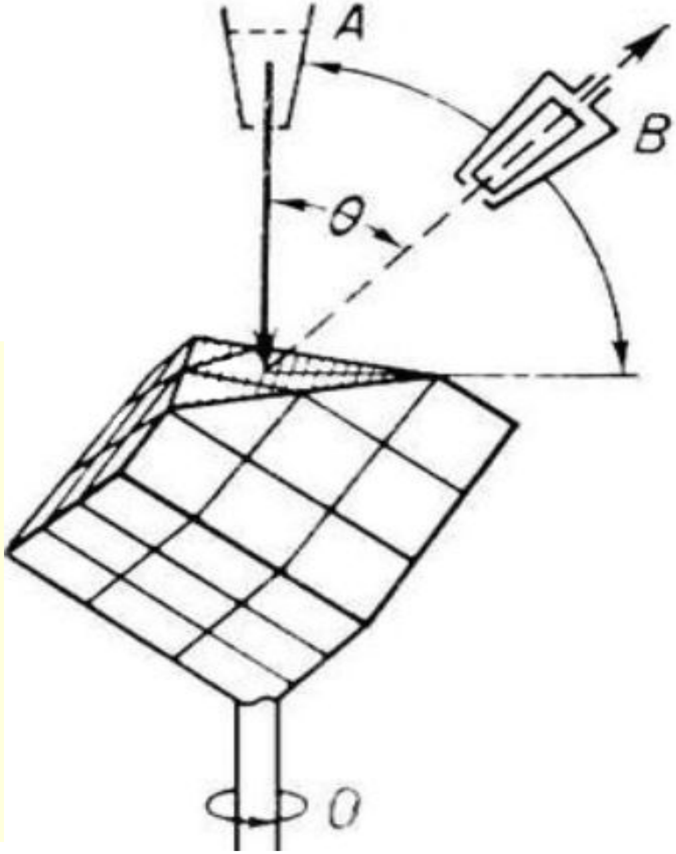
$W_0 = m_0 c^2$ **–** ***энергия покоя*** **(для электрона 0,511 МэВ).**

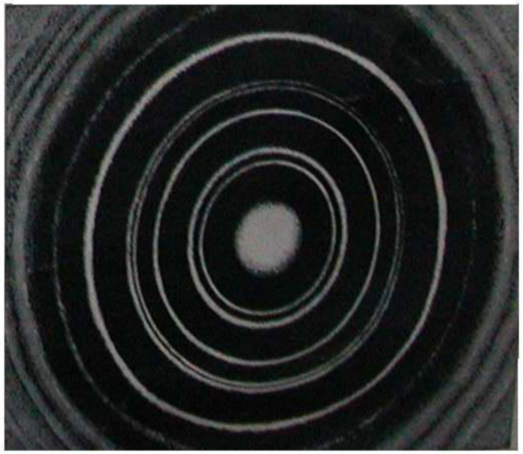
Экспериментальное подтверждение гипотезы де Бройля

Клинтон Джозеф Дэвиссон (1881 – 1958)

Опыты Дэвиссона и Джермера (1927 г.) – опыты по дифракции электронов на монокристаллах никеля.

Лестер Халберт Джермер (1896 – 1971)





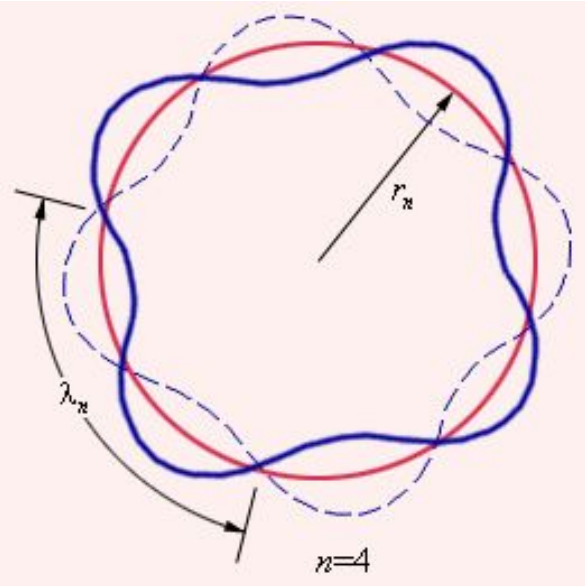
Оценка длины волны де Бройля для макрообъектов и микрообъектов

Пример 1. Пуля массой *m* = 10 г, летящая со скоростью *v* = 100 м/с.

$$\lambda_Б = \frac{h}{mv} = 6{,}6 \cdot 10^{-34}\ \text{м}.$$

Пример 2. Электрон в атоме водорода (для *n* = 4).

$$m_e v_4 r_4 = 4\hbar \;\Longrightarrow\; v_4 = 5{,}5 \cdot 10^5\ \frac{\text{м}}{\text{с}} \ll c$$



$$\lambda_Б = \frac{h}{m_e v_4} = 1{,}3 \cdot 10^{-9}\ \text{м} \sim r_4$$

Соотношения неопределенностей (сформулированы В. Гейзенбергом в 1927 г.)

Вследствие корпускулярно-волнового дуализма в квантовой механике теряет смысл понятие «траектории частицы».
Чем точнее определена координата микрочастицы ($\Delta x \to 0$), тем менее точно определен ее импульс ($\Delta p_x \to \infty$) и наоборот.

1. **Соотношения неопределенностей для координат и импуль-сов:**

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \hbar; \; \Delta y \cdot \Delta p_y \geq \hbar; \; \Delta z \cdot \Delta p_z \geq \hbar$$

Здесь Δx, Δy, Δz, Δp_x, Δp_y, Δp_z – ***неопределенности координат частицы и соответствующих проекций ее импульса.***

2. Соотношение неопределенностей для энергии и времени:

$$\Delta W \cdot \Delta t \geq \hbar,$$

где ΔW – ***неопределенность энергии состояния;*** **Δt –** ***время пребывания системы в данном состоянии.***

Практические применения соотношений неопределенностей

1. Доказательство того, что в ядрах атомов не могут находиться электроны

$$\Delta x \sim r_я = 10^{-15}\ \text{м};\ \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{r_я} \Rightarrow$$

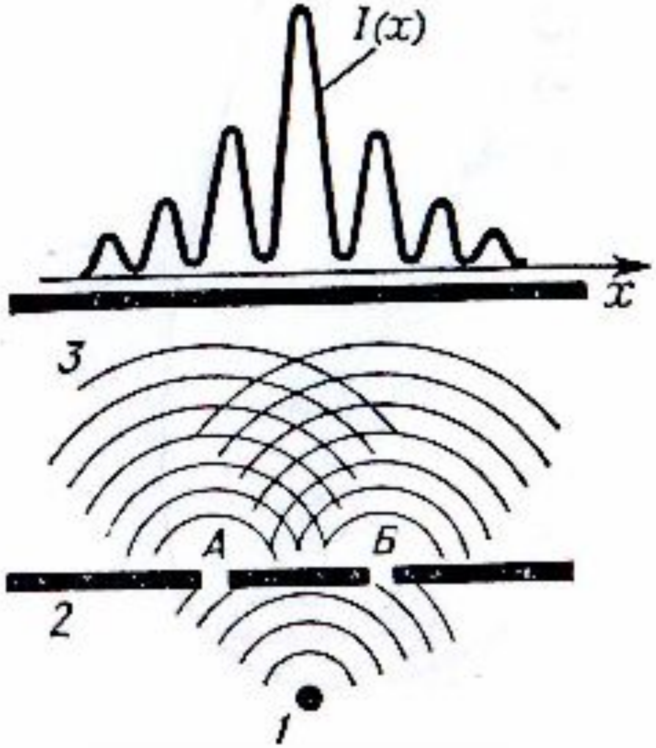
$$\Delta v_x \geq \frac{\hbar}{m_e r_я} = 1{,}2 \cdot 10^{11}\,\frac{\text{м}}{\text{с}} \gg c = 3 \cdot 10^{8}\,\frac{\text{м}}{\text{с}}$$

2. Оценка величины размытости спектральных линий.

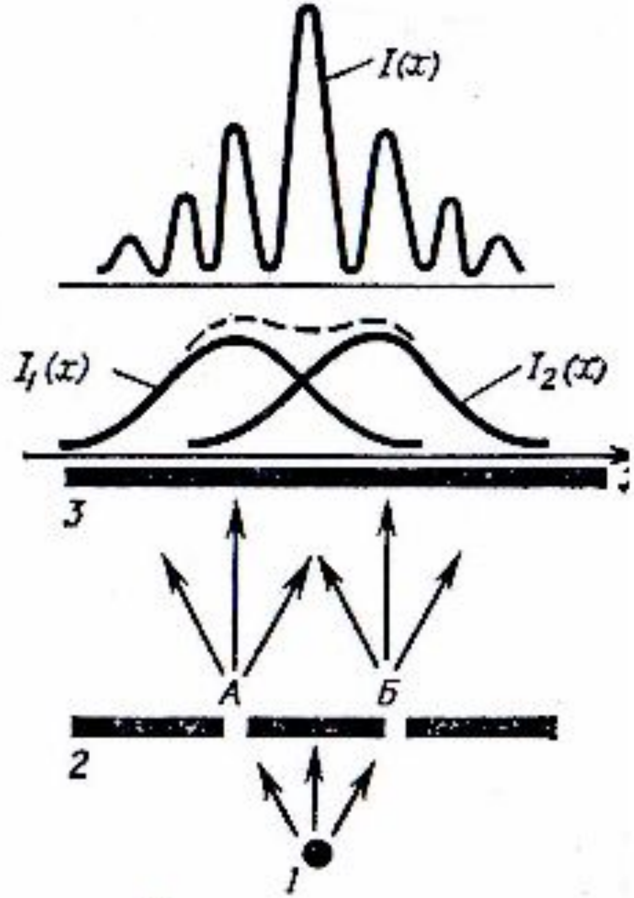
$$\Delta \nu = \frac{\Delta W}{h} \geq \frac{1}{h} \cdot \frac{\hbar}{\Delta t} = \frac{1}{2\pi \Delta t} = 1{,}6 \cdot 10^{7}\,\text{Гц}$$

($\Delta t \sim 10$ нс – *характерное время возбужден. состояния атома*).

Прохождение микрочастицы через две щели



Опыт Юнга



Электроны

Физическая картина для электронов идентична картине дифракции для фотонов.

Волновая функция и ее статистический смысл

Вывод из опыта с электронами: поскольку электрон неделим и локализован в одной точке при попадании на фотопластинку, то движение частиц подчиняется *статистической (вероятностной) закономерности*, согласно которой они попадают в те точки, где интенсивность волн де Бройля наибольшая.

$$\psi(\vec{r},t)=\psi(x,y,z,t)$$ – ***волновая функция.***

$$dw=|\psi|^2dV=|\psi|^2dxdydz$$ – ***вероятность нахождения частицы в объеме dV.***

Физический смысл волновой функции **состоит в том, что квадрат ее модуля задает плотность вероятности обнаружения частицы в данный момент времени в данной точке:**

$$|\psi(x,y,z,t)|^2=\frac{dw}{dV}$$

Свойства волновой функции

1. *Конечность* (волновая функция не может обращаться в бесконечност

$$w = \int_V |\psi|^2 dV \leq 1)$$

2. *Однозначность* (вероятность не может быть неоднозначной величиной).

3.Непрерывность (вероятность не может изменяться скачком).

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi|^2 dV = 1$$

– *условие нормировки волновой функции* (физич. смысл: условие объективного существования частицы).

Уравнение Шредингера

Уравнение, определяющее поведение микрообъектов, должно выполнять ту же роль, что и законы Ньютона для макроскопических тел. Оно должно быть уравнением относительно волновой функции $\psi(x, y, z, t)$.

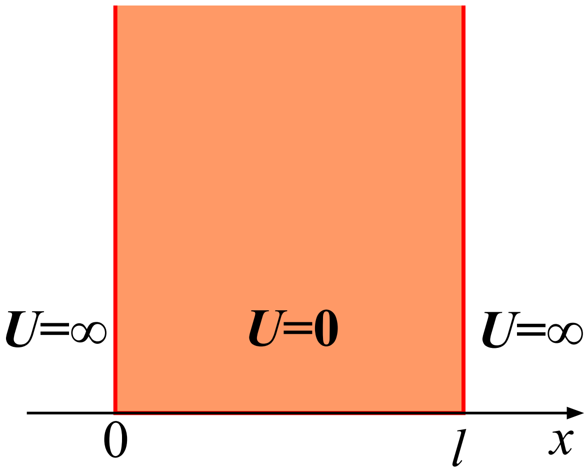
Если задача не зависит от времени: $\psi = \psi(x, y, z)$,
то выполняется *уравнение Шредингера для стационарных состояний*:

$$\Delta\psi + \frac{2m}{\hbar^2} \cdot (W - U) \cdot \psi = 0$$

Здесь $\Delta\psi \equiv \frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}$ **– *оператор Лапласа*;**

$U = U(x, y, z)$ ***– потенциальная энергия частицы в силовом поле.***

Задача о частице в одномерной прямоугольной потенциальной яме



$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(W - U)\,\psi = 0$$

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

Граничные условия: $\psi(0) = \psi(l) = 0$ **(вытекают из св-ва непрерывности** $\boldsymbol{\psi}$**).**

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}W\psi = 0 \quad \Rightarrow \quad \frac{d^2\psi}{dx^2} + k^2\psi = 0, \quad k^2 = \frac{2mW}{\hbar^2}$$

Общее решение: $\psi(x) = A\sin kx + B\cos kx$

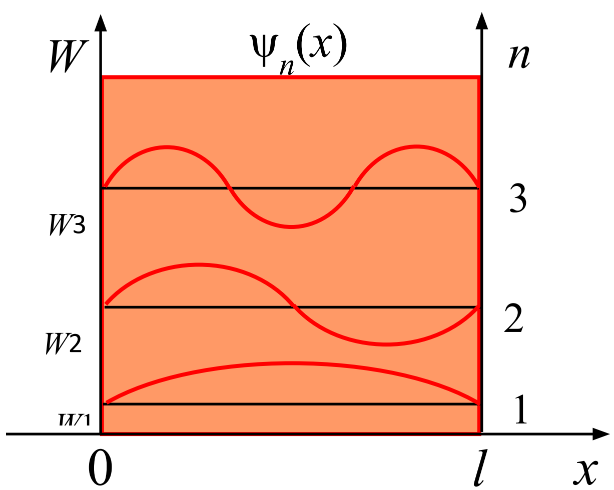
$$\psi(0) = 0 \quad \Rightarrow \quad B = 0$$

$$\psi(l) = A\sin kl = 0 \quad \Rightarrow \quad k = \frac{n\pi}{l},\ n = 1, 2, 3, \ldots$$

$$W_n = \frac{k^2\hbar^2}{2m} = n^2\frac{\pi^2\hbar^2}{2ml^2}$$ **(т.е. энергия частицы квантуется)**

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{l}}\sin\frac{n\pi}{l}x \quad (n = 1, 2, 3, \ldots)$$ ***– собственные функции.***

Собственные функции



Плотность вероятности