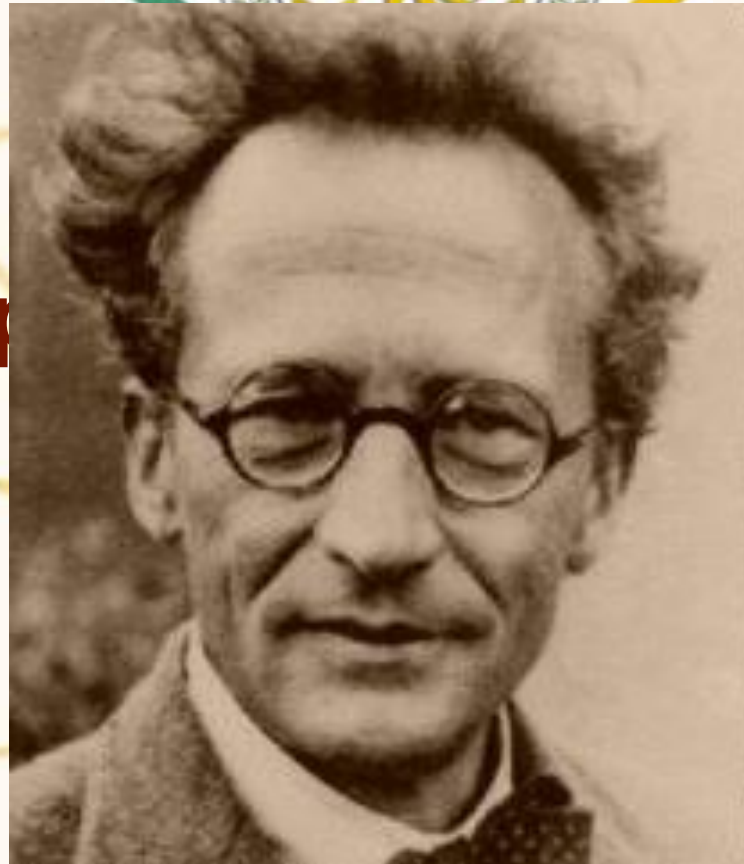


Сегодня: *



Кр

ий



в Сергей Иванович
т к. ОФ ЕНМФ ТПУ



Тема 4. ЭЛЕМЕНТЫ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

4.1. Физический смысл волн де Бройля

4.2. Соотношение неопределенности
Гейзенберга

4.3. Понятие о волновой функции

4.4. Уравнение Шредингера

4.1. Физический смысл волн де Бройля

Из содержания темы 3, видно, что *идея де Бройля о наличии у частиц вещества волновых свойств получила экспериментальное подтверждение*, как для заряженных частиц (электронов), так и для нейтральных – нейтронов, атомов и молекул.

Также было показано, что *обнаружить волновые свойства у макроскопических тел не представляется возможным из-за присущей им малой длины волны*.

В настоящем разделе постараемся выяснить физический смысл волн де Бройля.

Вернемся вновь к свету. Вспомним соотношение между корпускулярными и волновыми свойствами света. Было выяснено, что *квадрат амплитуды световой волны в какой-либо точке пространства пропорционален числу фотонов, попадающих в эту точку.* До сих пор речь шла о длине волны, соответствующей частице, движущейся с определенной скоростью. Можно, очевидно, говорить и об амплитуде этих волн. *Вопрос о природе волн, связанных с движущимися частицами вещества, можно сформулировать как вопрос о физическом смысле амплитуды или интенсивности этих волн.*

Как известно, *интенсивность пропорциональна квадрату амплитуды*. Эксперименты по отражению электронов и др. частиц от поверхности показывают, что по *некоторым направлениям обнаруживаются максимумы числа отраженных частиц*. Это означает, что в указанных направлениях отражается большее число частиц, чем в других направлениях. С волновой точки зрения наличие максимумов в некоторых направлениях означает, что *эти направления соответствуют наибольшей интенсивности волн, связанных с отражающимися частицами*.

^х *Интенсивность дебройлевской волны* *оказывается большей там, где имеется большее число частиц.* Другими словами, интенсивность волн де Бройля в данной области пространства определяет *число частиц, попавших в эту область.* В этом заключается статистическое, вероятностное толкование волн, связанных с движущимися частицами.

Квадрат амплитуды дебройлевской волны в данной точке пространства является мерой вероятности того, что частица находится в этой области.

Вероятностная трактовка волн де Бройля принадлежит Макс Борну.

Подчеркнем еще раз, что волны, связанные с движущимися частицами, не имеют никакого отношения к распространению какого-либо электромагнитного поля, к электромагнитным волнам. Среди известных в физике электромагнитных, акустических и других волн *нет аналога «волнам вероятности», связанным с движущимися частицами вещества.*

Можно показать, что *фазовая скорость волн де Бройля превышает скорость света в вакууме*, что не противоречит теории относительности.

Групповая скорость волн де Бройля меньше скорости света, что указывает на неразрывную связь дебройлевских волн с движущимися частицами.

Групповая скорость волны де Бройля равна скорости движения частицы ($v < c$).

Открытие волновых свойств движущихся частиц вещества явилось величайшим достижением современной физики. Вместе с твердо, установленным экспериментально квантовым характером законов, описывающих внутриатомные процессы, *обнаружение волновых свойств частиц вещества послужило фундаментом для создания квантовой механики.*

Так называемые пути современной теоретической физики, изучающей законы движения частиц в области микромира имеют масштабы длины 10^{-10} – 10^{-15} м.

Объектами изучения квантовой механики являются атомы, молекулы, кристаллы, атомные ядра и элементарные частицы (электроны, позитроны, протоны, нейтроны и др.).

4.2. Соотношение неопределенности Гейзенберга

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

Поэтому приписывать им все свойства частиц и все свойства волн нельзя.

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

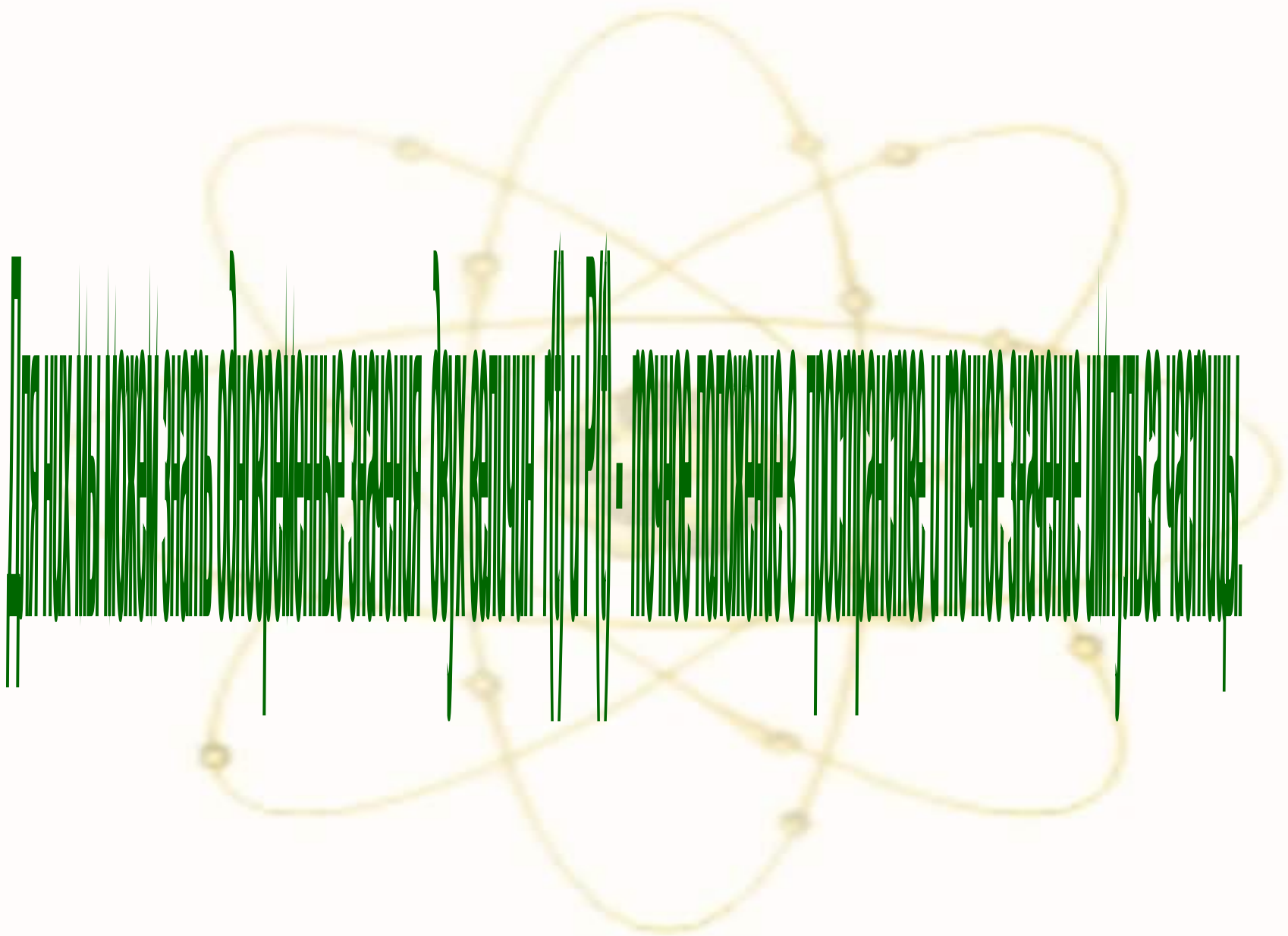
В классической механике *состояние материальной точки (классической частицы) определяется заданием значений координат импульса, энергии и т.д. перечисленные величины называются динамическими переменными.*

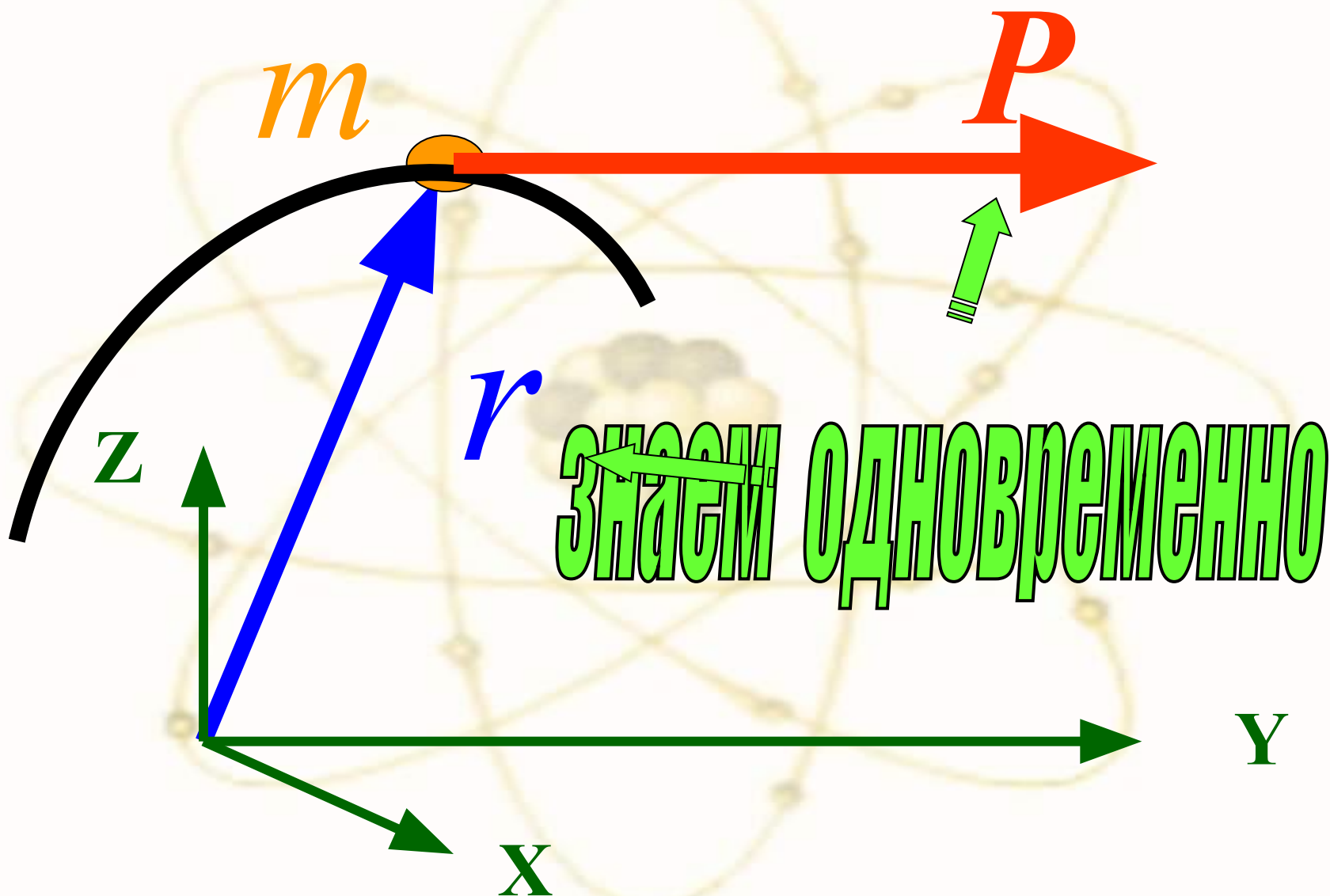
Микрообъекту не могут быть приписаны указанные динамические переменные.

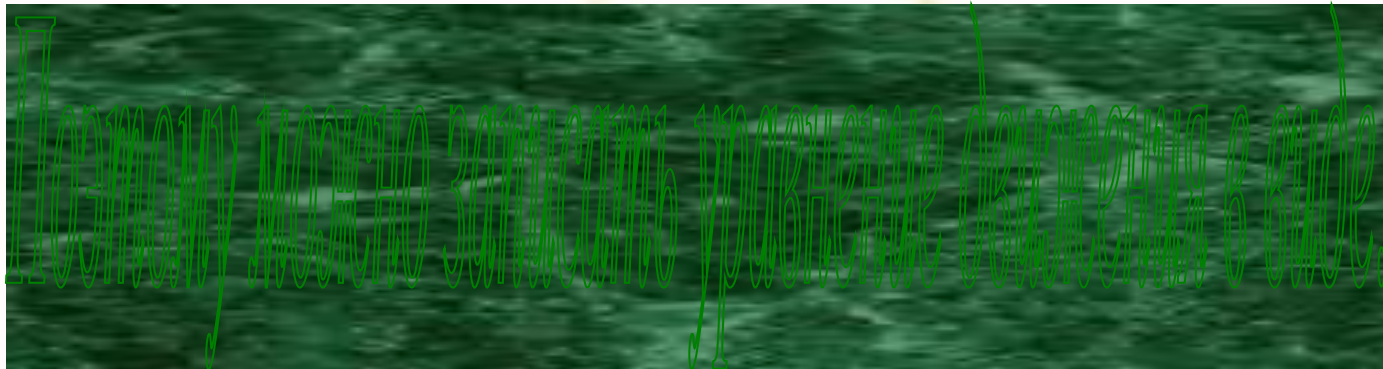
Однако информацию о микрочастицах мы получаем, наблюдая их взаимодействие с приборами, представляющими собой макроскопические тела.

Уравнение динамики Ньютона применимо только к макротелам

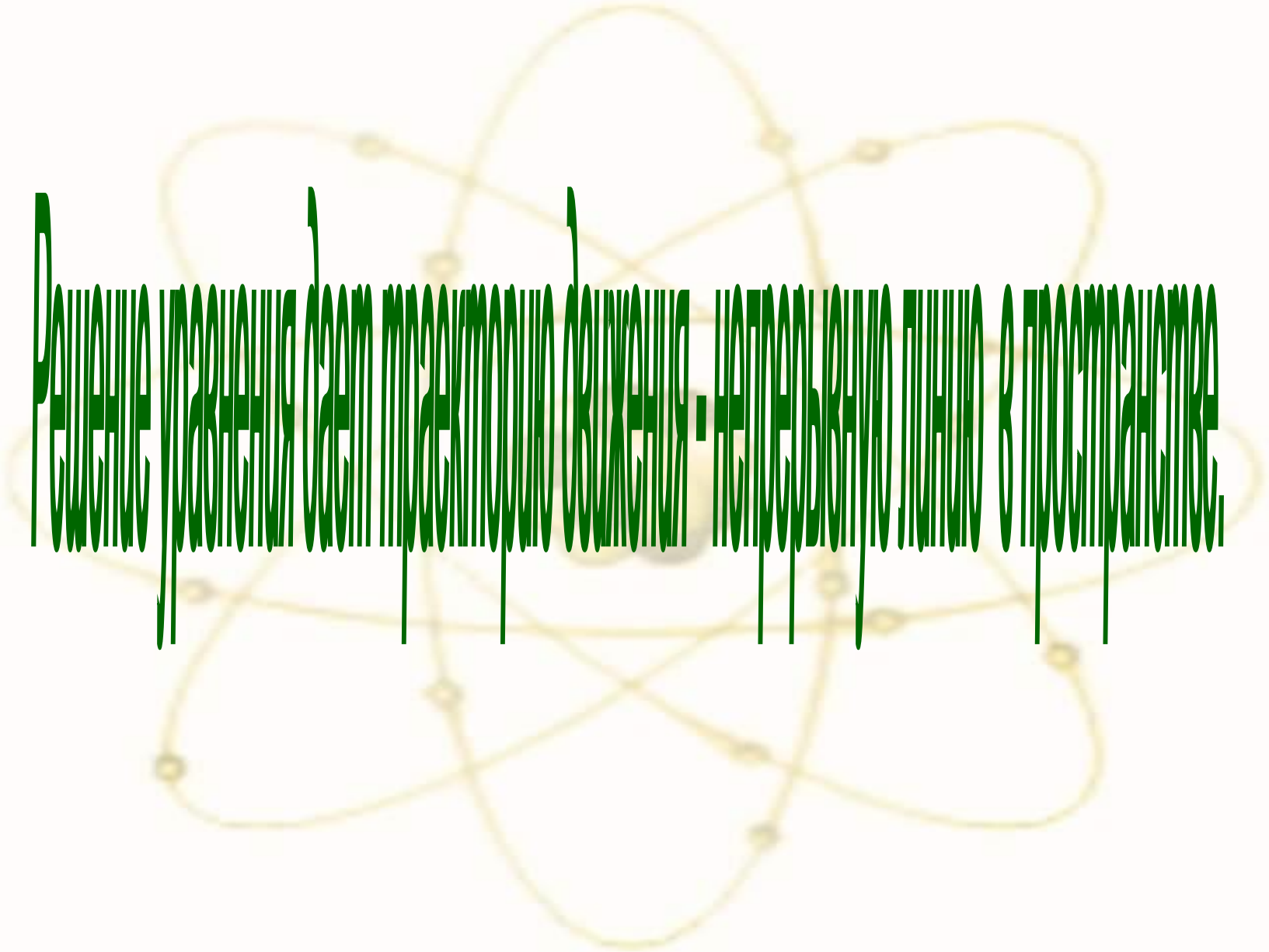








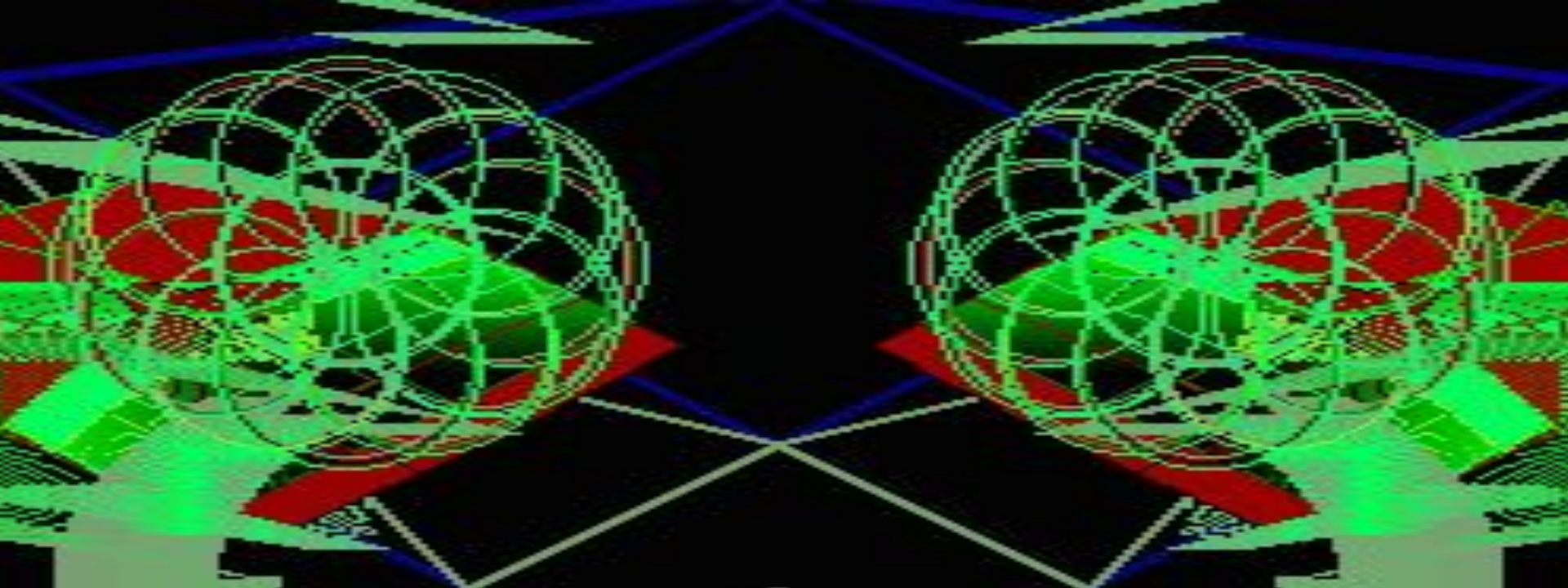
$$\frac{dP}{dt} = ma = m \frac{d^2 r}{dt^2}$$

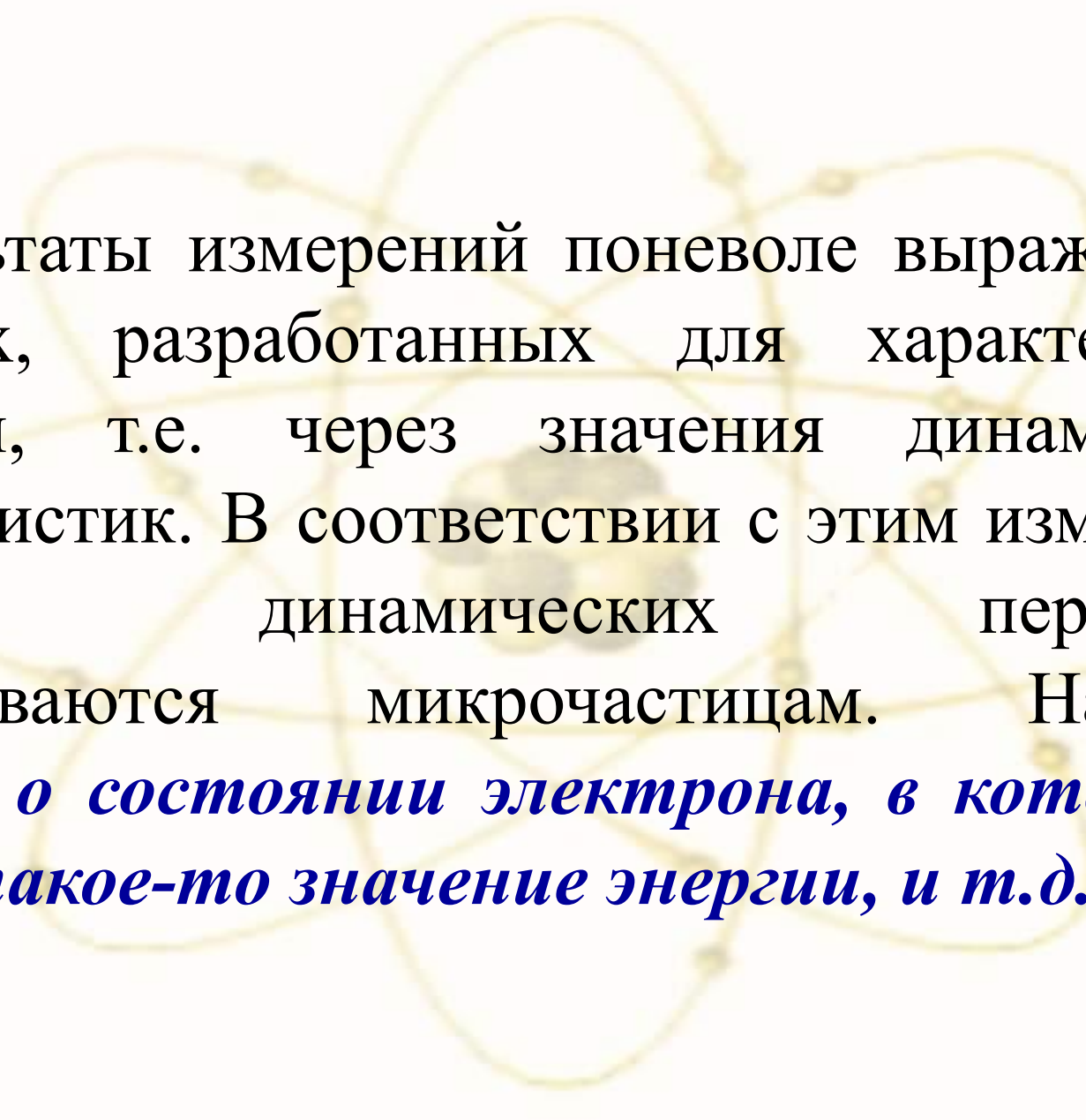


Решение уравнения дает траекторию движения - непрерывную линию в пространстве.

Как описать движение микрочастицы с учетом их волновых свойств?







Результаты измерений поневоле выражаются в терминах, разработанных для характеристики макротел, т.е. через значения динамических характеристик. В соответствии с этим измеренные значения динамических переменных приписываются микрочастицам. Например, *говорят о состоянии электрона, в котором он имеет такое-то значение энергии, и т.д.*

Волновые свойства частиц и возможность задать для частицы лишь вероятность ее пребывания в данной точке пространства приводят к тому, что сами понятия координаты частицы и ее скорости (или импульса) могут применяться в квантовой механике в ограниченной мере. В этом, вообще говоря, нет ничего удивительного. 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 .

Корпускулярно-волновая двойственность свойств частиц, изучаемых в квантовой механике, приводит к тому, что оказывается невозможным одновременно характеризовать частицу ее положением в пространстве (координатами) и скоростью (или 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

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

(1)

где h – постоянная Планка.

$$\Delta x \Delta p_x \geq h \quad (1)$$

Из (1) 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 оказывается 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 одновременного с любой наперед заданной точностью измерить координату и импульс микрообъекта.

Соотношение, аналогичное (1), имеет место для y и p_y , для z и p_z , а также *для других пар величин*
В классической механике такие пары называются канонически сопряженными.

Обозначив канонически сопряженные величины буквами A и B , можно написать (2)

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

соотношение (2) называется *соотношением неопределенности Гейзенберга* для величин A и B .
Это соотношение открыл *в 1927 году Вернер Гейзенберг.*



Соотношение неопределенностей Гейзенберга

$$\Delta P \Delta X \geq \frac{h}{2\pi}$$



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



Чем

заменить?

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**

$$\Delta E \Delta t \geq h \quad (3)$$

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

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

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 являются квантовым ограничением применимости классической механике 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 в (1) вместо p_x произведение mv_x , получим соотношение

$$\Delta x \Delta v_x \geq h / m \quad (4)$$

$$\Delta x \Delta v_x \geq h / m \quad (4)$$

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*.

Так, например, уже для пылинки массой 10^{-12} кг и линейным размерами 10^{-6} м, координата которой определена с точностью до 0,01 ее размеров ($\Delta x = 10^{-8}$ м), неопределенность скорости, по (4)

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

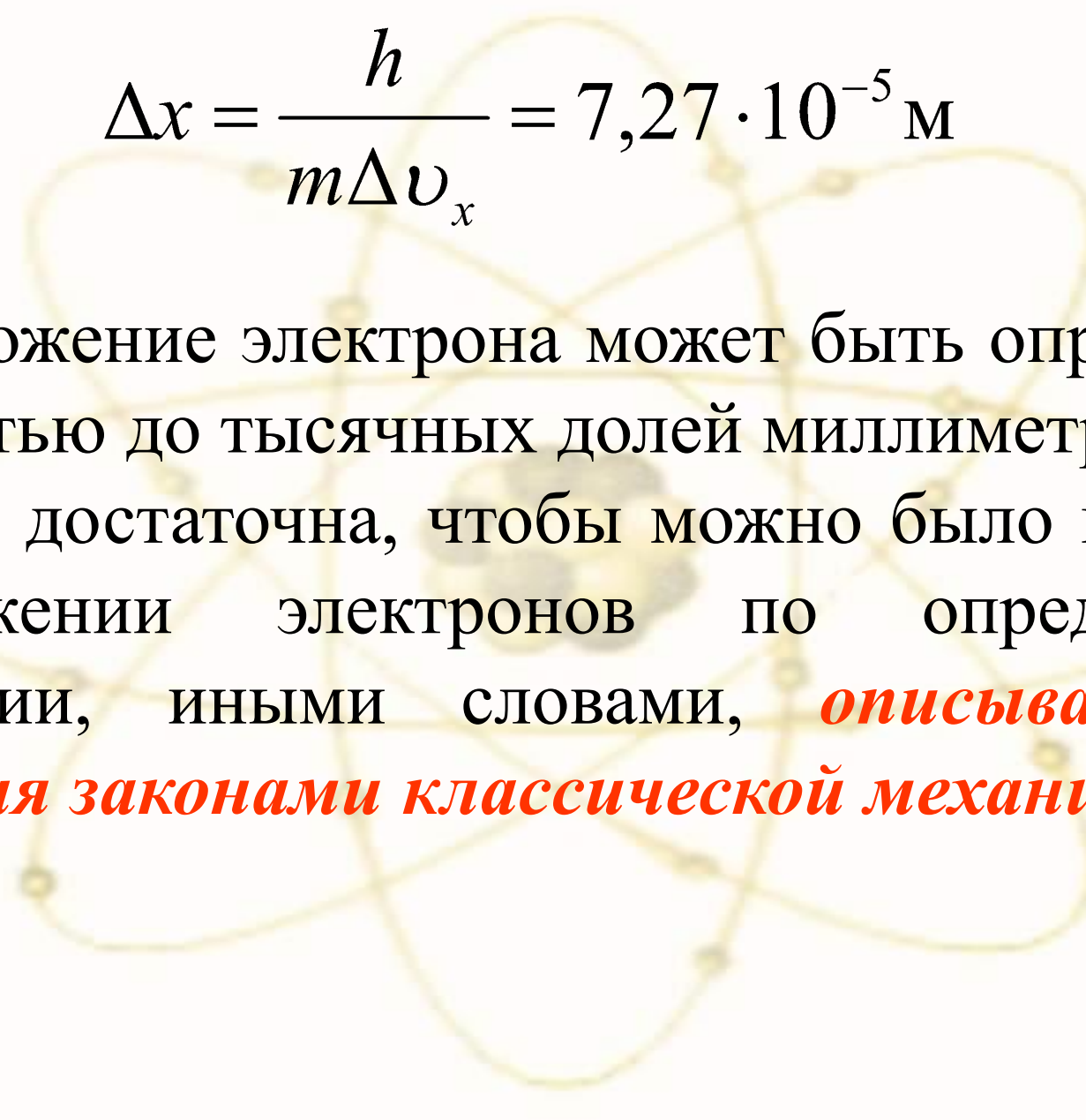
$$\Delta v_x = 6,62 \cdot 10^{-14} \text{ м/с},$$

т.е. не будет сказываться при всех скоростях, с которыми пылинка может двигаться. Таким образом, *для макроскопических тел их волновые свойства не играют ни какой роли*; координаты и скорости могут быть измерены достаточно точно.

Это означает, что для описания движения макротел с абсолютной достоверностью можно пользоваться законами классической механики.

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? По формуле (4) получим:

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


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

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.*

Применим соотношение неопределенностей к электрону, двигающемуся в атоме водорода.

Допустим, что неопределенность координаты электрона $\Delta x \approx 10^{-10}$ м (порядка размеров самого атома), тогда согласно (4),

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

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*.

4.3. Понятие о волновой функции

Экспериментальное подтверждение идеи де Бройля об универсальности корпускулярно-волнового дуализма, ограниченность применения классической механики к микрообъектам, диктуемая соотношением неопределенностей, а также противоречия ряда экспериментов с применяемыми в начале XX века теориями привели к **новому этапу развития квантовой физики – созданию квантовой механики**, описывающей законы движения и взаимодействия микрочастиц с учетом их волновых свойств. Ее создание и развитие охватывает период с 1900 г. (формулировка Планком квантовой гипотезы) до 20-х годов XX века и связано, прежде всего, с работами австрийского физика Э. Шредингера, немецкого физика В. Гейзенберга и английского физика П. Дирака.

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 уже неверно, хотя бы потому, что тогда вероятность обнаружить частицу в некоторых точках пространства может быть отрицательна, что не имеет смысла.

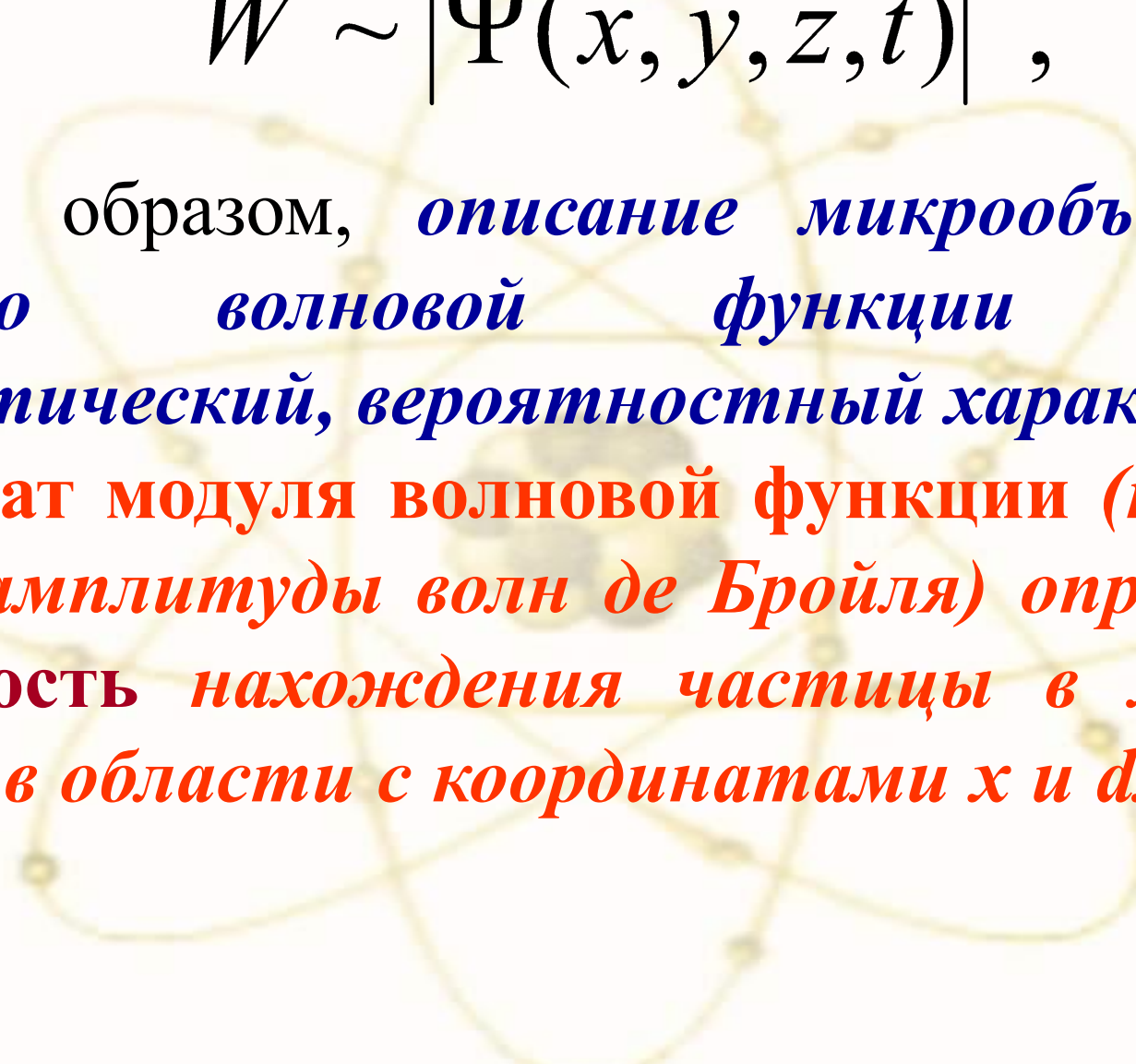
Чтобы устранить эти трудности *немецкий физик М. Борн в 1926 г. предположил, что по волновому закону меняется не сама вероятность, а величина, названная амплитудой вероятности и обозначаемая*
 $\Psi(x, y, z, t)$.

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

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

$$W \sim |\Psi(\tilde{o}, y, z, t)|^2, \quad (5)$$

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 .

Итак, в квантовой механике состояние частицы описывается принципиально по-новому – с помощью волновой функции, которая является основным носителем информации об их корпускулярных и волновых свойствах.

Вероятность нахождения частицы в объеме V равна:

$$dW = |\Psi|^2 dV \quad (6)$$

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 данном условии частица должна находиться где-то в пространстве.

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

Условия нормировки вероятностей:

(7)

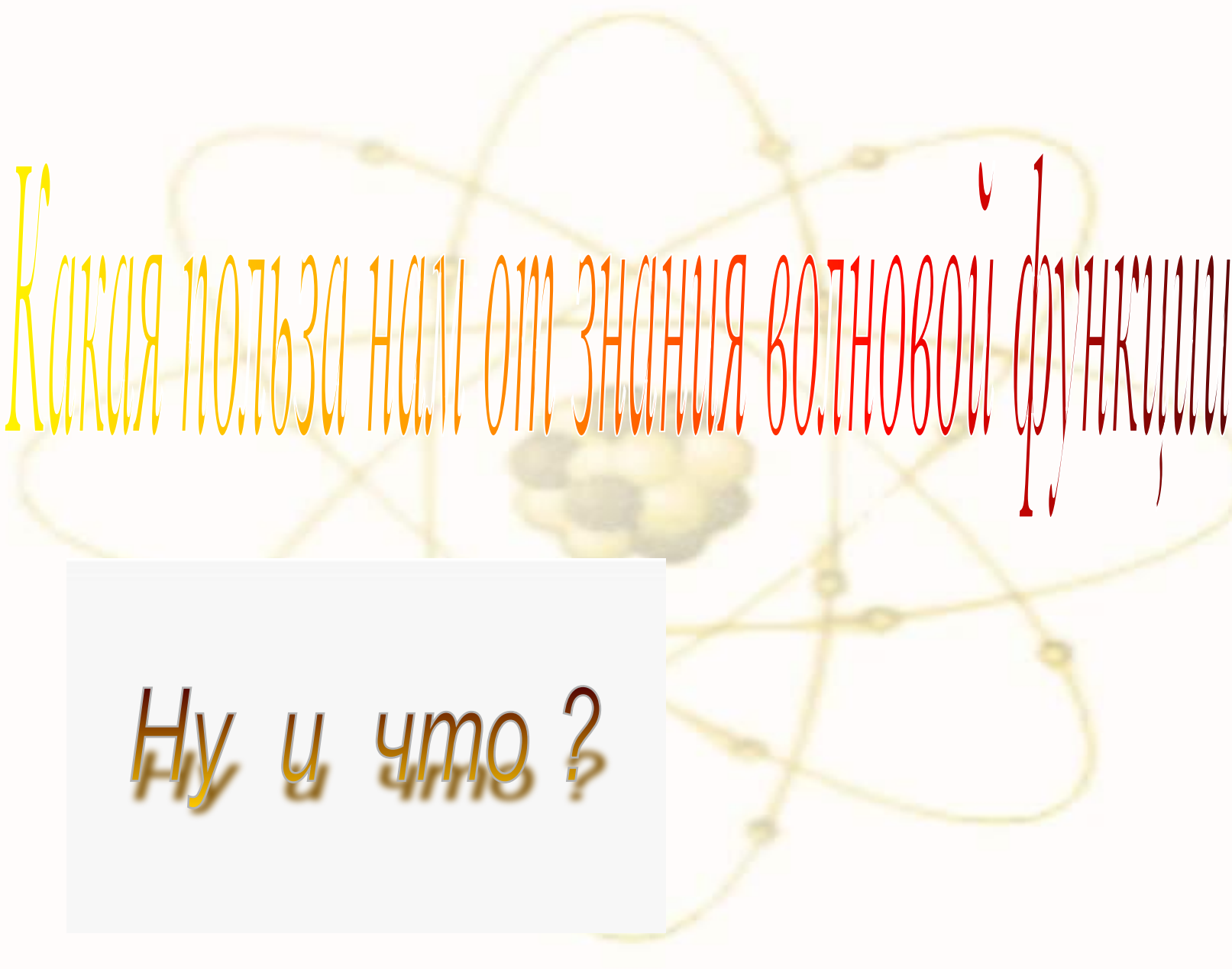
$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi|^2 dV = 1,$$

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.*

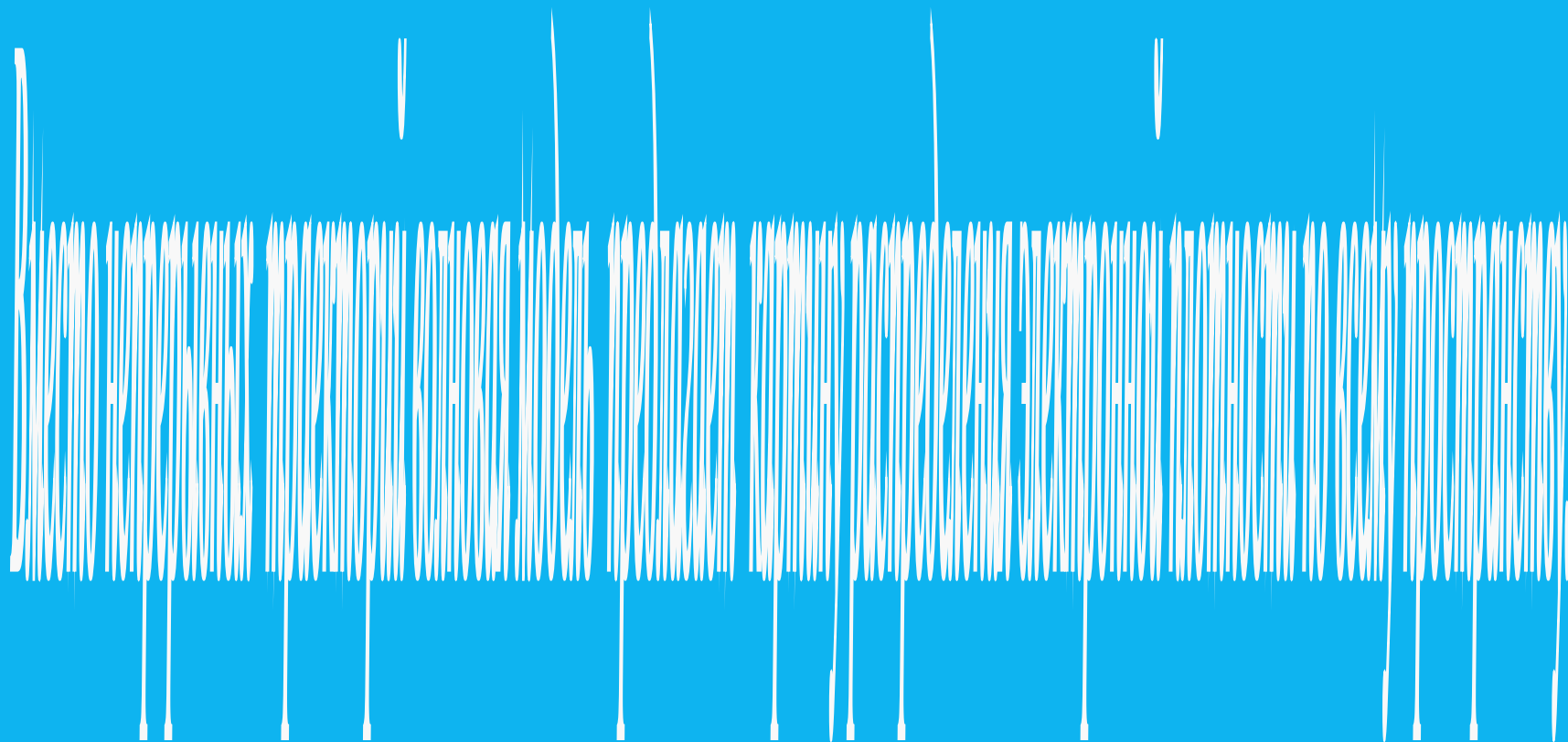
Условие нормировки волновой функции:

$$\iiint_V |\Psi|^2 dV = 1$$



Какая польза нам от знания волновой функции?

Ну и что ?



$$|\Psi|^2$$

определяет вероятность нахождения электрона в данной точке пространства

Квадрат

модуля волновой

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

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

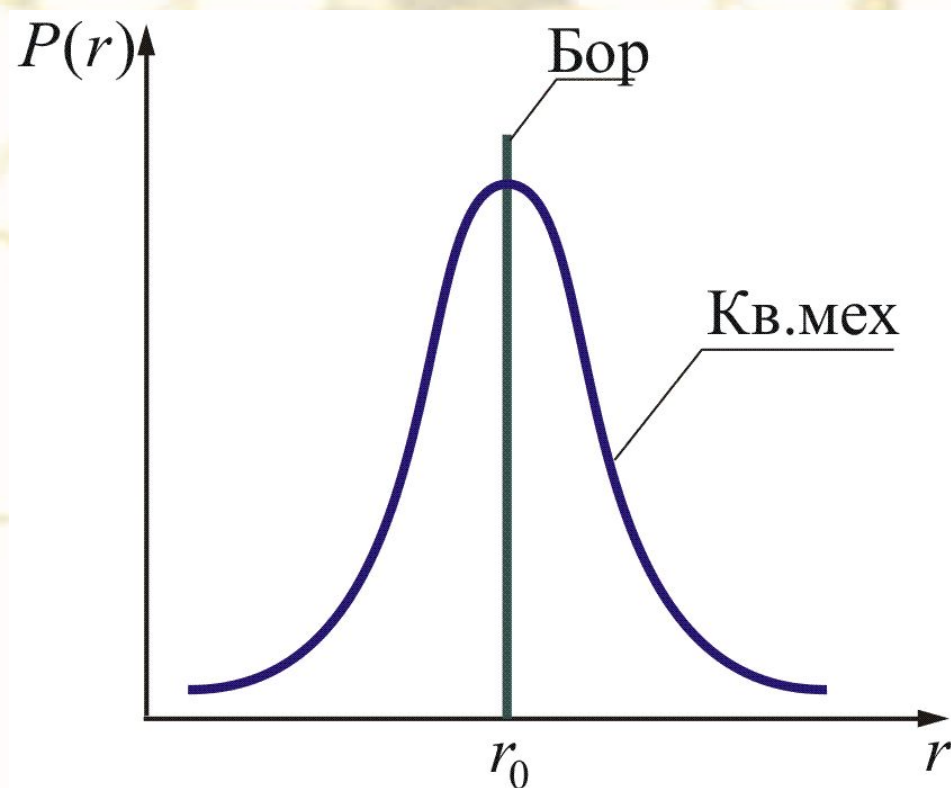
где C_n ($n = 1, 2, 3, \dots$) – произвольные, комплексные числа.

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 микрообъектов.

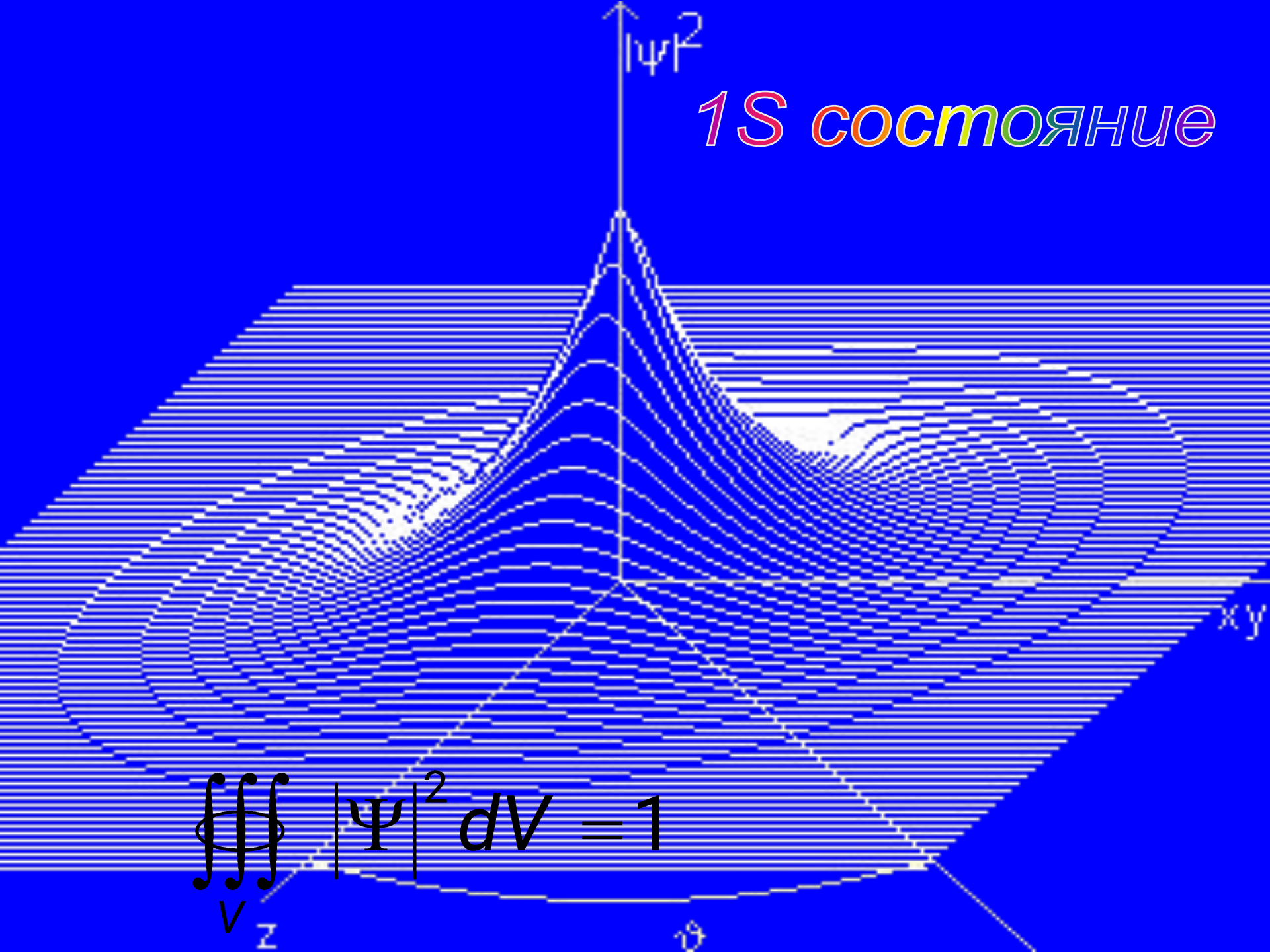
Например, среднее расстояние $\langle r \rangle$ электрона от ядра вычисляется по формуле

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



1S состояние

$$\iiint_V |\Psi|^2 dV = 1$$



4.4. 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 учитывать 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:

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

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

∇^2 – оператор Лапласа $\left(\nabla^2 \Psi = \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} \right),$

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 потенциально, то *функция U не зависит явно от времени* и имеет смысл **потенциальной энергии**.

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

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

E - полная энергия электрона

U - потенциальная энергия

-волновая функция электрона

Уравнение Шредингера для стационарных состояний

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

можно переписать в виде:

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

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

Гамильтониан является оператором энергии E .

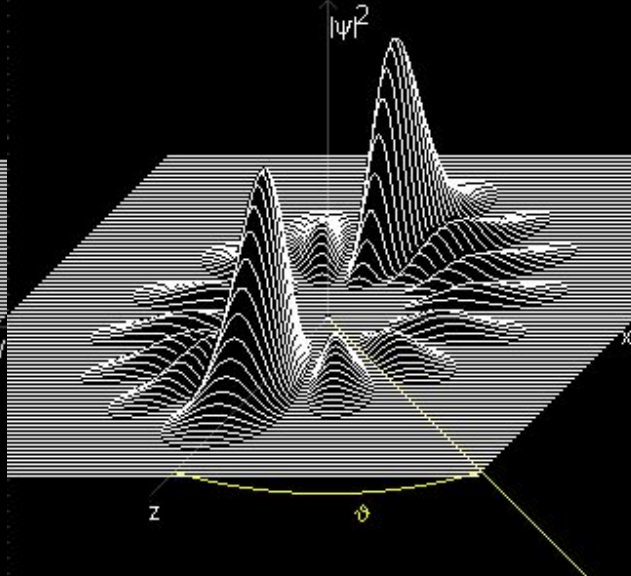
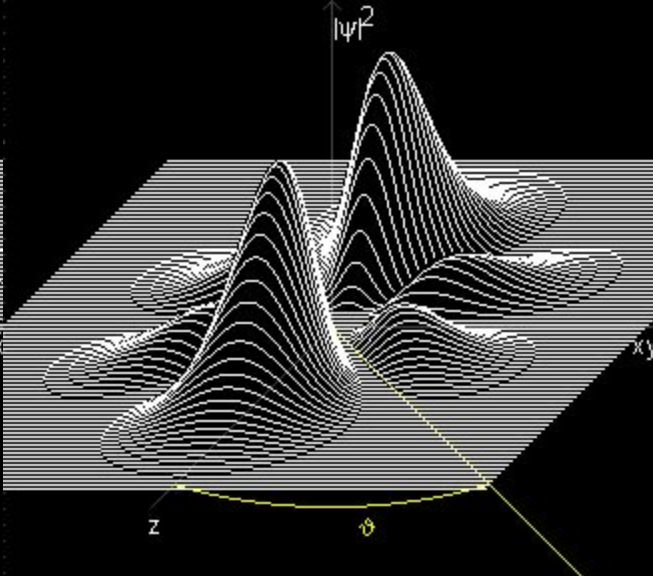
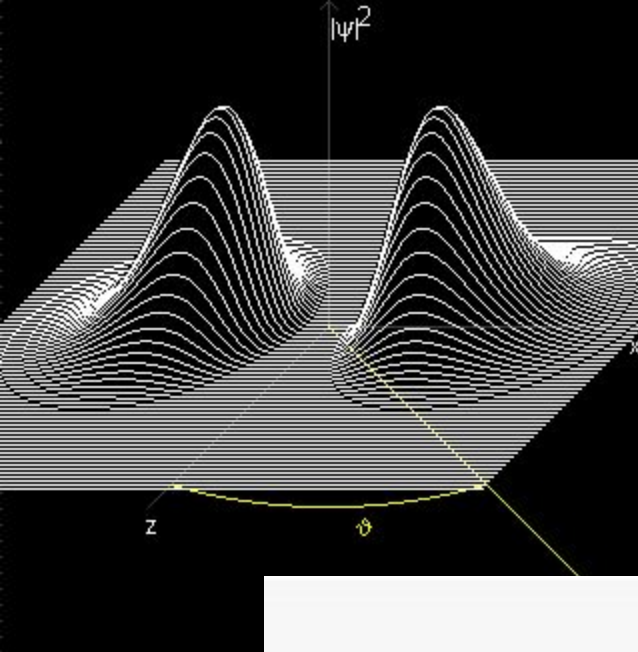
В квантовой механике и другим динамическим переменным сопоставляются *операторы*.

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



**Любое движение
микрочастиц
можно
уподобить
движению
особых волн**

Эрвин Шрёдингер (1887-1961)



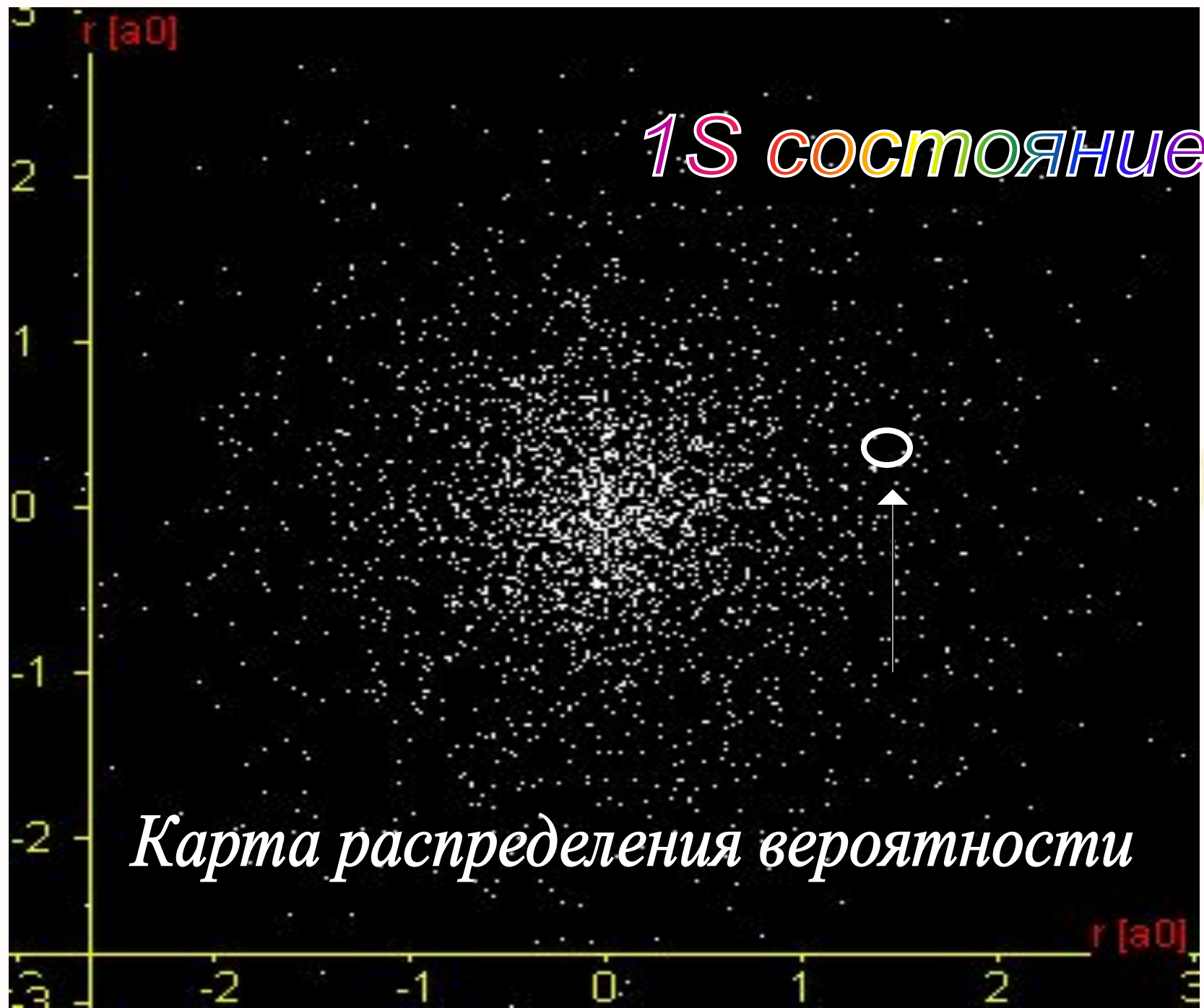
Для стационарных

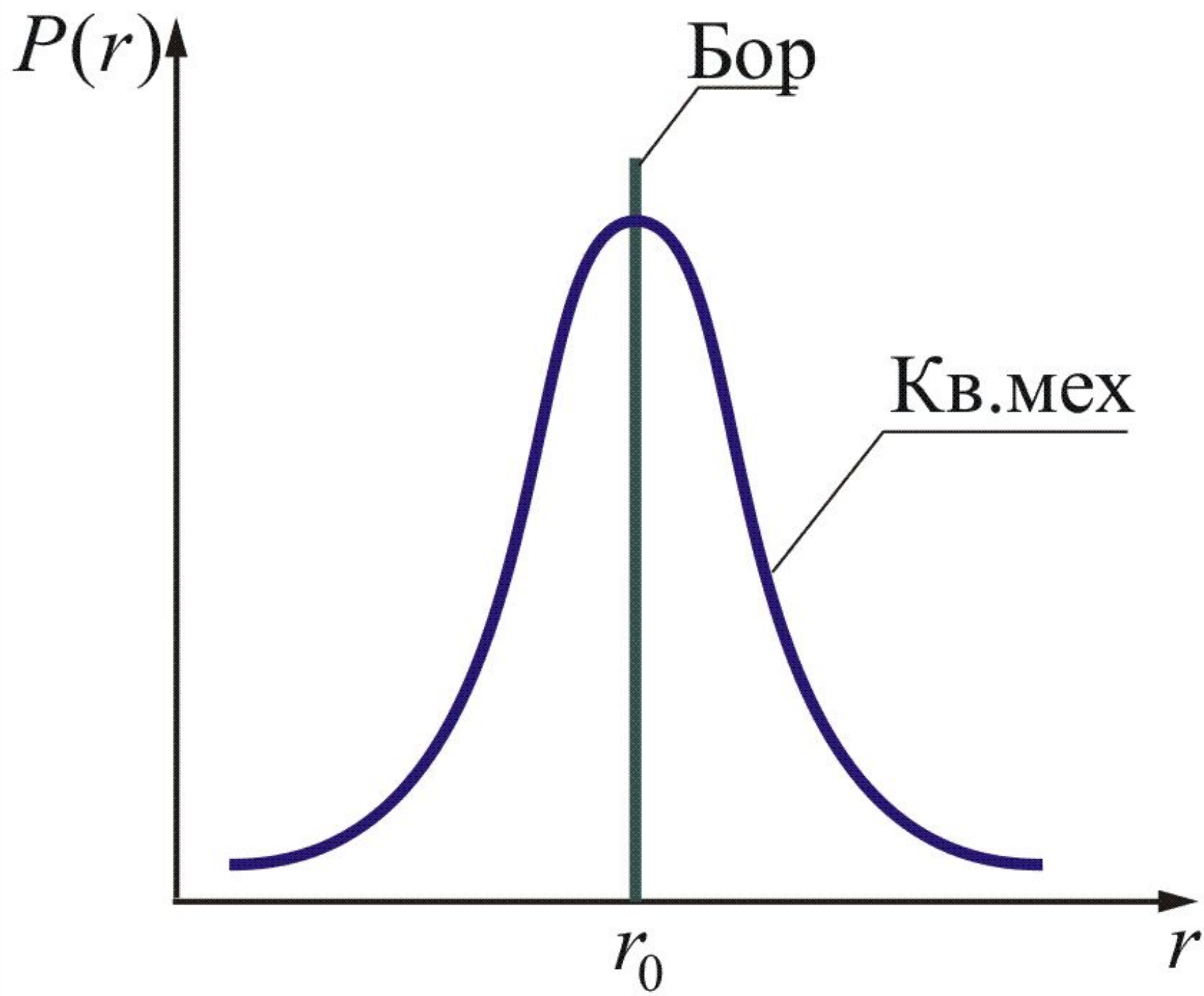
состояний при движении по одной оси x

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} [E - U(x)]\Psi = 0$$

**В самом простом случае
для 1S состояния:**

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{\pi r_0^3}} \exp\left(-\frac{r}{r_0}\right)$$





1S состояние

$$\iiint_V |\Psi|^2 dV = 1$$



Лекция окончена!!!