

The background of the image is a spiral-bound notebook with a light beige, textured cover. The spiral binding is visible on the left side. The text is written in a bold, green, serif font with a slight shadow effect.

Физика колебаний и волн. Квантовая физика.

Лекция № 12

Основные положения квантовой механики.

- 1. Волновая функция и её физический смысл.*
- 2. Принцип суперпозиции для волновых функций.*
- 3. Соотношение неопределённостей Гейзенберга.*
- 4. Операторы физических величин.*

Волновая функция и её физический смысл.

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.

Для частицы, движущейся в свободном пространстве с постоянной скоростью v , де Бройль показал, что с ней связана плоская монохроматическая волна:

$$\Psi(\vec{r}, t) = \Psi_0 e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} \quad \text{- волна де Бройля}$$

(волновая функция)


Физический смысл имеет только квадрат модуля волновой функции, т.е. **вероятность обнаружить частицу в каком-либо месте пространства** можно представить **квадратом модуля функции** $\Psi(\vec{r}, t)$ в том же месте:

$$|\Psi|^2 = \Psi^* \cdot \Psi = \rho \quad - \text{плотность вероятности}$$

В случае плоской волны де Бройля этот квадрат модуля равен:

$$\rho = |\Psi|^2 = \Psi^* \cdot \Psi = \Psi_o^* \cdot \Psi_o = \text{const} ,$$

т.е. равновероятно обнаружить частицу в любой месте пространства. Всякий другой результат для равномерно движущейся частицы в течение бесконечного времени несовместим с однородностью пространства.

A spiral-bound notebook with a cream-colored page and a brown cover. The spiral binding is on the left side. A light gray rectangular box is centered on the page, containing the mathematical expression $|\Psi|^2$.
$$|\Psi|^2$$

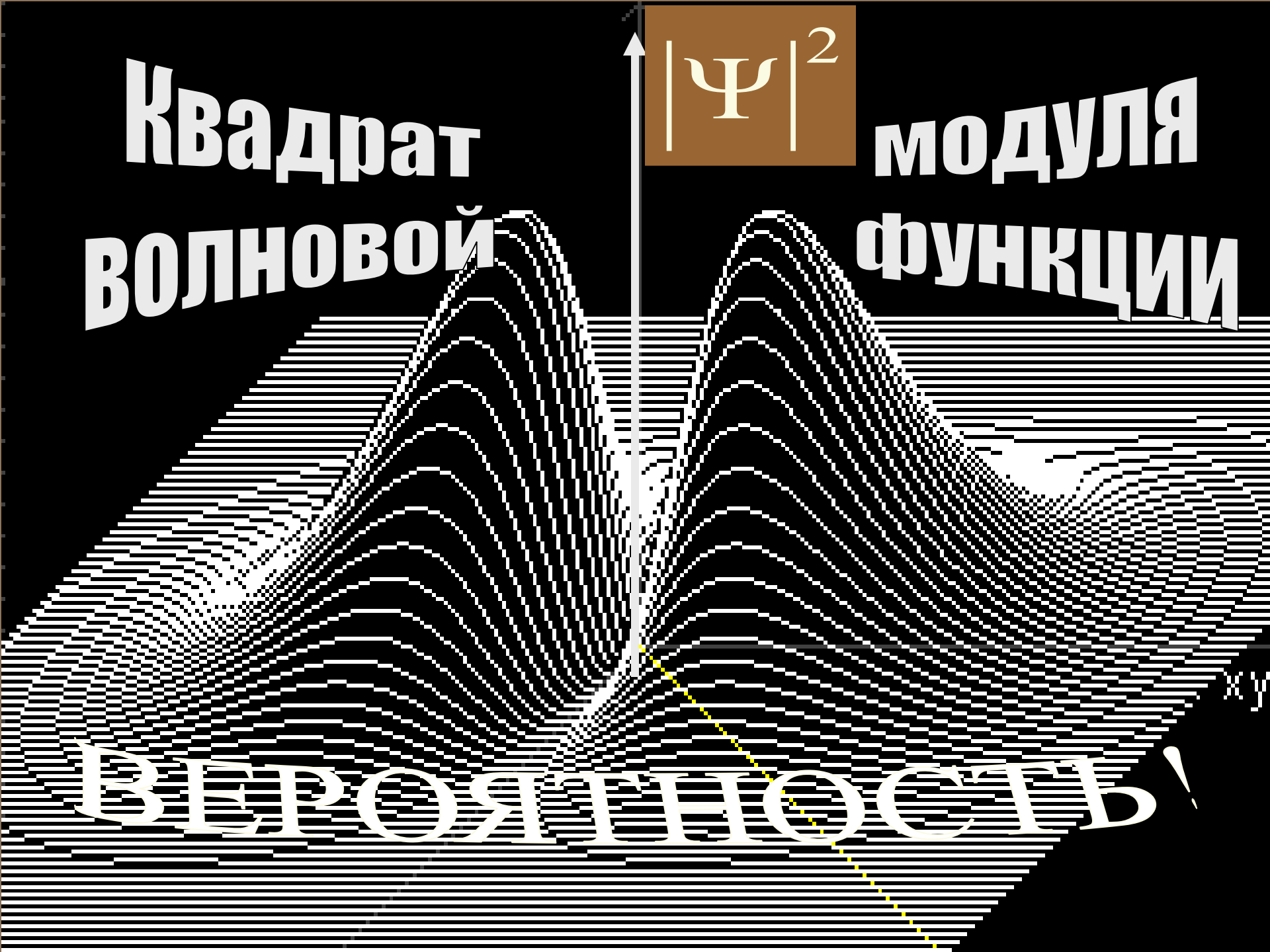
Определяет **вероятность**
нахождения частицы в данной
точке пространства.

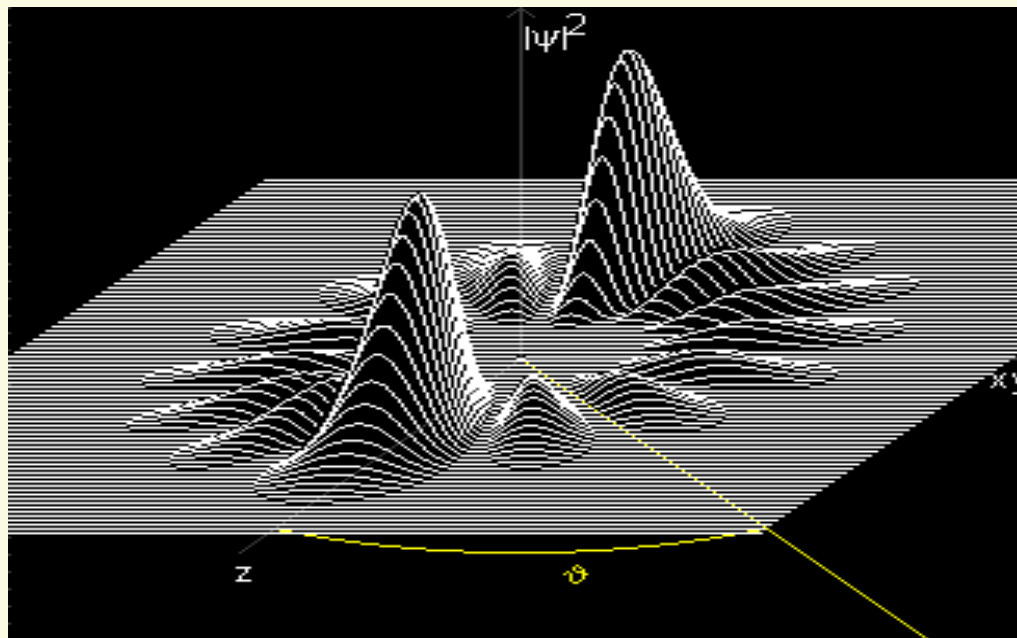
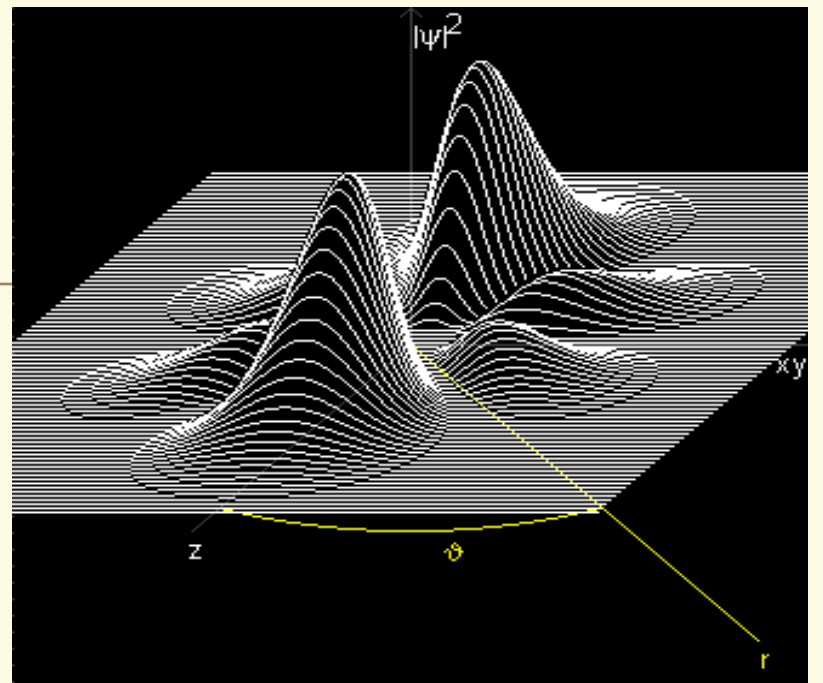
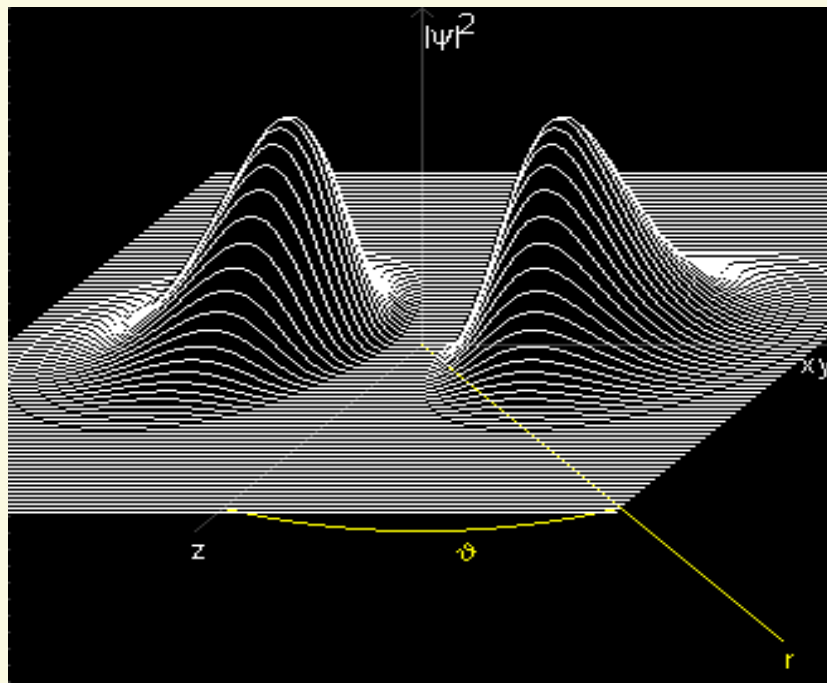
Квадрат
волновой

$$|\Psi|^2$$

модуля
функции

ВЕРОЯТНОСТЬ!





$$|\Psi|^2$$

Сама **волновая функция** вводится как **вспомогательный символ** и не относится к числу непосредственно наблюдаемых величин. Её значение позволяет статистически предсказывать значения величин, которые получаются экспериментально и поэтому имеют реальный физический смысл.

$$|\Psi^2| \cdot dV = \Psi^* \cdot \Psi \cdot dV \quad \text{будет } \underline{\text{вероят-}}$$

ность обнаружить частицу в элементе **объёма пространства** dV . При таком определении должно выполняться **условие нормировки**:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi^2| dV = 1 \quad - \text{означает, что вероят-}$$

ность обнаружить частицу во всём пространстве равна единице, как вероятность абсолютно достоверного события.

Условие нормировки
волновой функции:

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

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).

Принцип суперпозиции волновых функций.

Если $\Psi_1(\vec{r}, t)$ и $\Psi_2(\vec{r}, t)$ - волновые функции, описывающие какие-то два состояния частицы, то всякая их линейная комбинация с постоянными коэффициентами представляет также волновую функцию той же частицы, описывающую её состояние:

$$\Psi(\vec{r}, t) = C_1 \Psi_1(\vec{r}, t) + C_2 \Psi_2(\vec{r}, t)$$

Найдя $\Psi(\vec{r}, t)$ можно в дальнейшем определить и плотность вероятности $|\Psi|^2 = \Psi^* \cdot \Psi = \rho$ в новом состоянии $\Psi(\vec{r}, t)$.

Оправданием такого принципа суперпозиции является согласие с опытом вытекающих из него следствий.

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

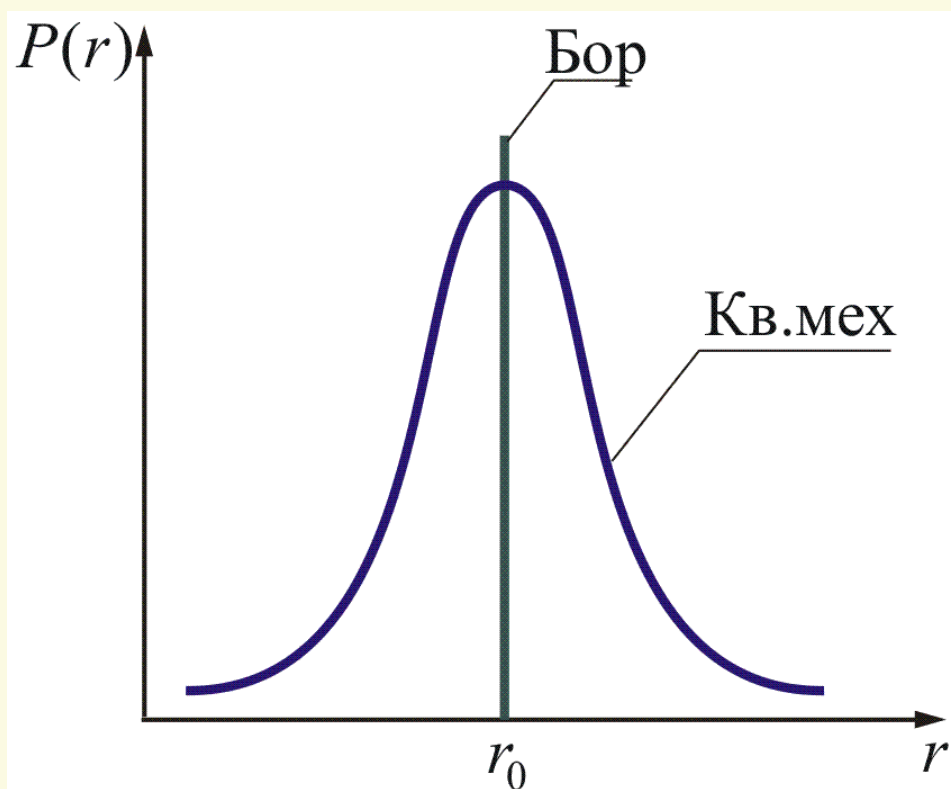
$$\Psi = \sum_n C_n \Psi_n$$

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

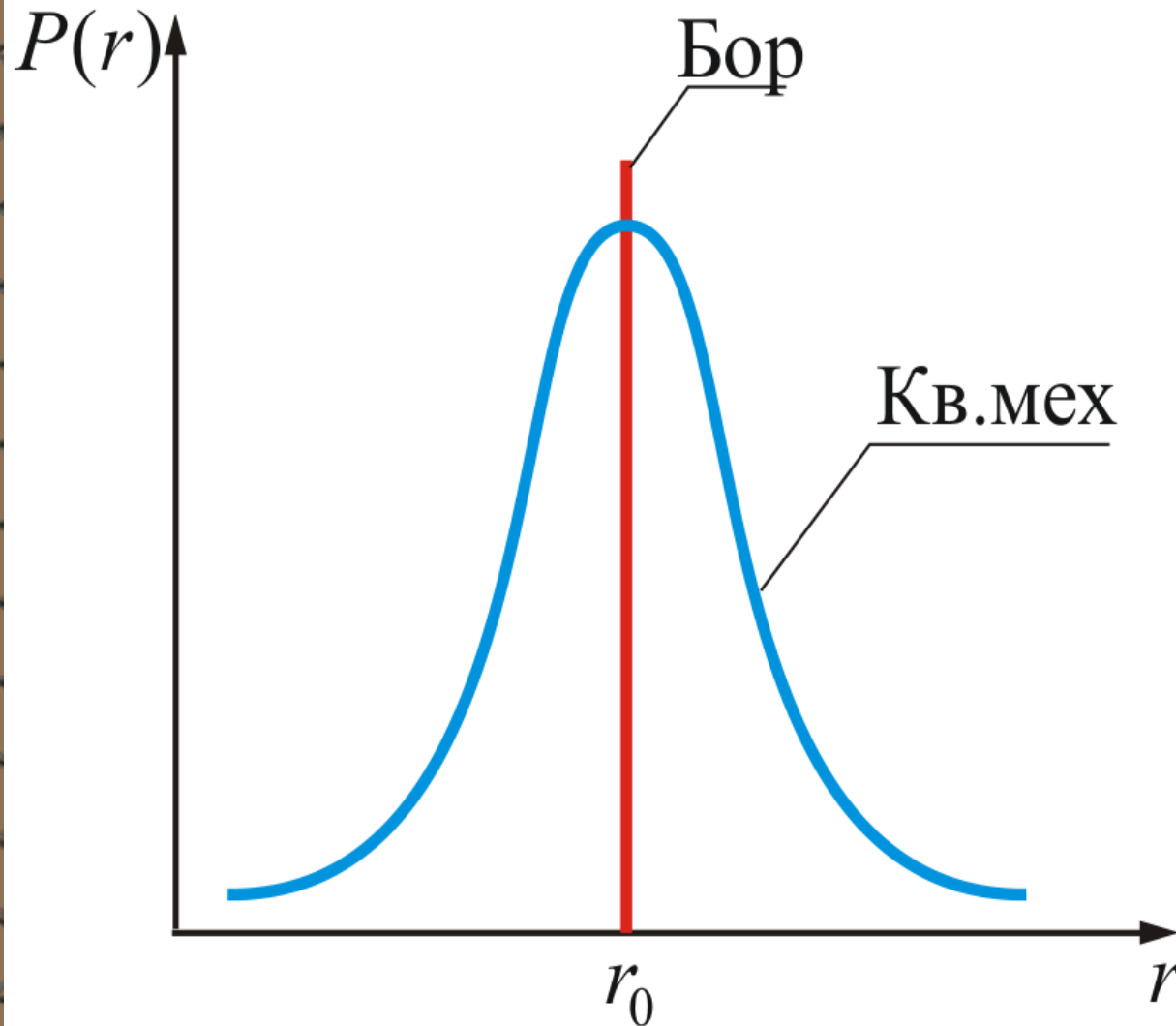
Волновая функция Ψ является основной характеристикой состояния микрообъектов.

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

$$\langle r \rangle = \int r |\Psi|^2 dV$$

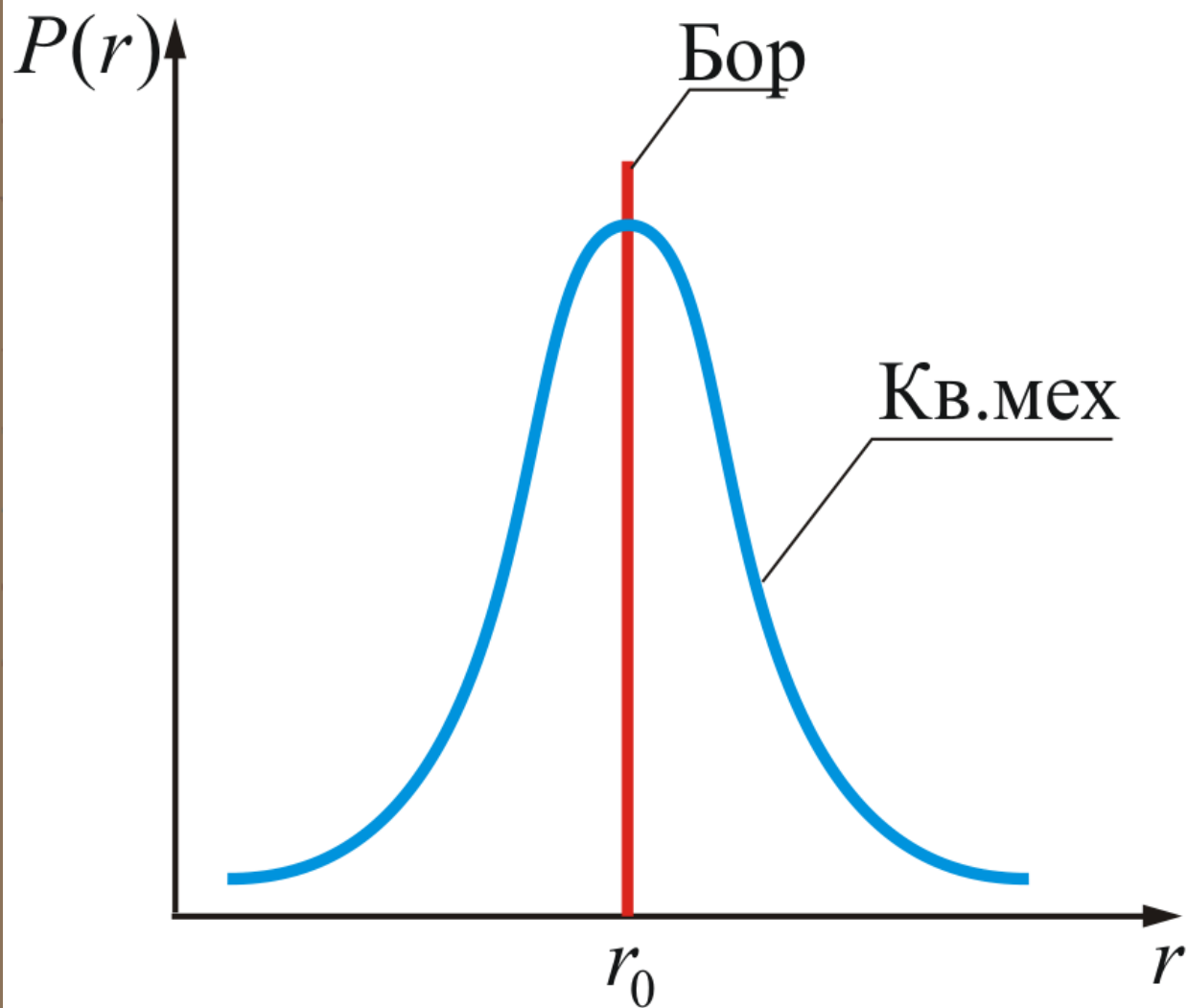


Боровские орбиты электрона представляют собой геометрическое место точек, в которых *с наибольшей вероятностью* может быть обнаружен электрон.



По теории Бора
вероятность нахождения электрона при любых других значениях r , кроме $r = r_0$, *равна нулю.*

Согласно квантовой механике эта
вероятность лишь достигает максимальное
значение при $r = r_0$.



Допускается
нахождение
электрона и на
других
расстояниях от
ядра, но
*с меньшей
вероятностью.*

1S состояние

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

Соотношение неопределенностей 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*.

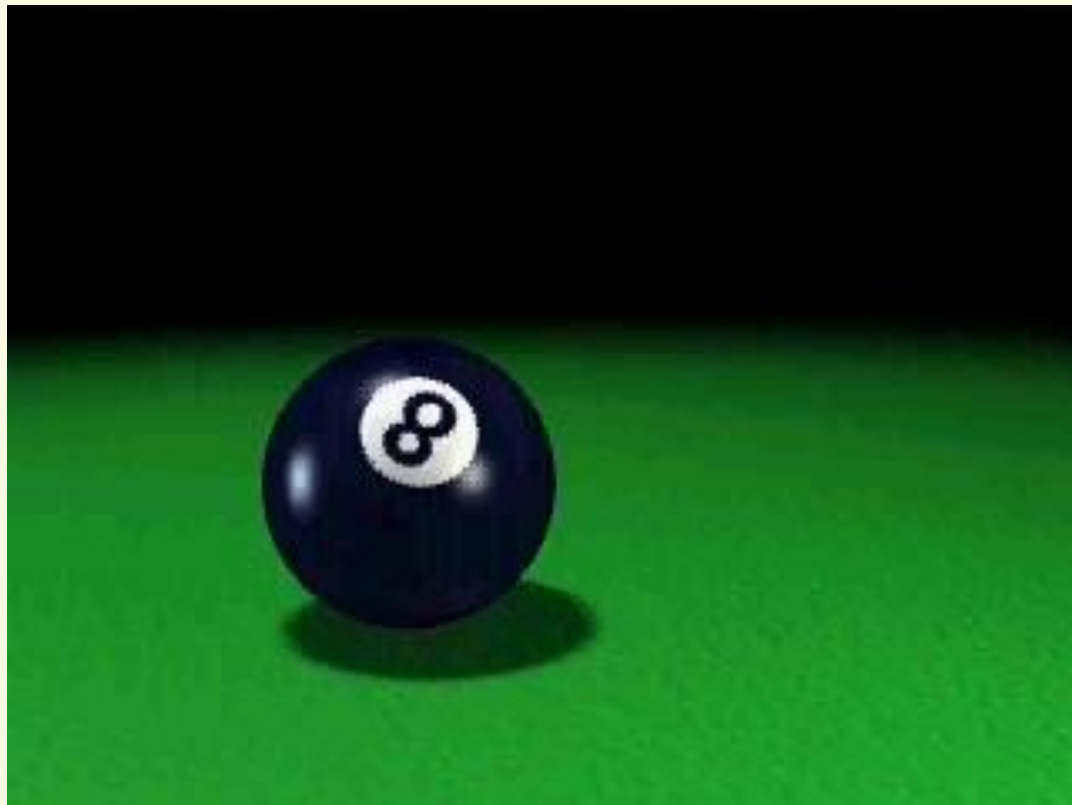
В классической механике *состояние материальной точки (классической частицы)* определяется заданием значений координат, импульса, энергии и т.д. перечисленные величины называются *динамическими переменными*.

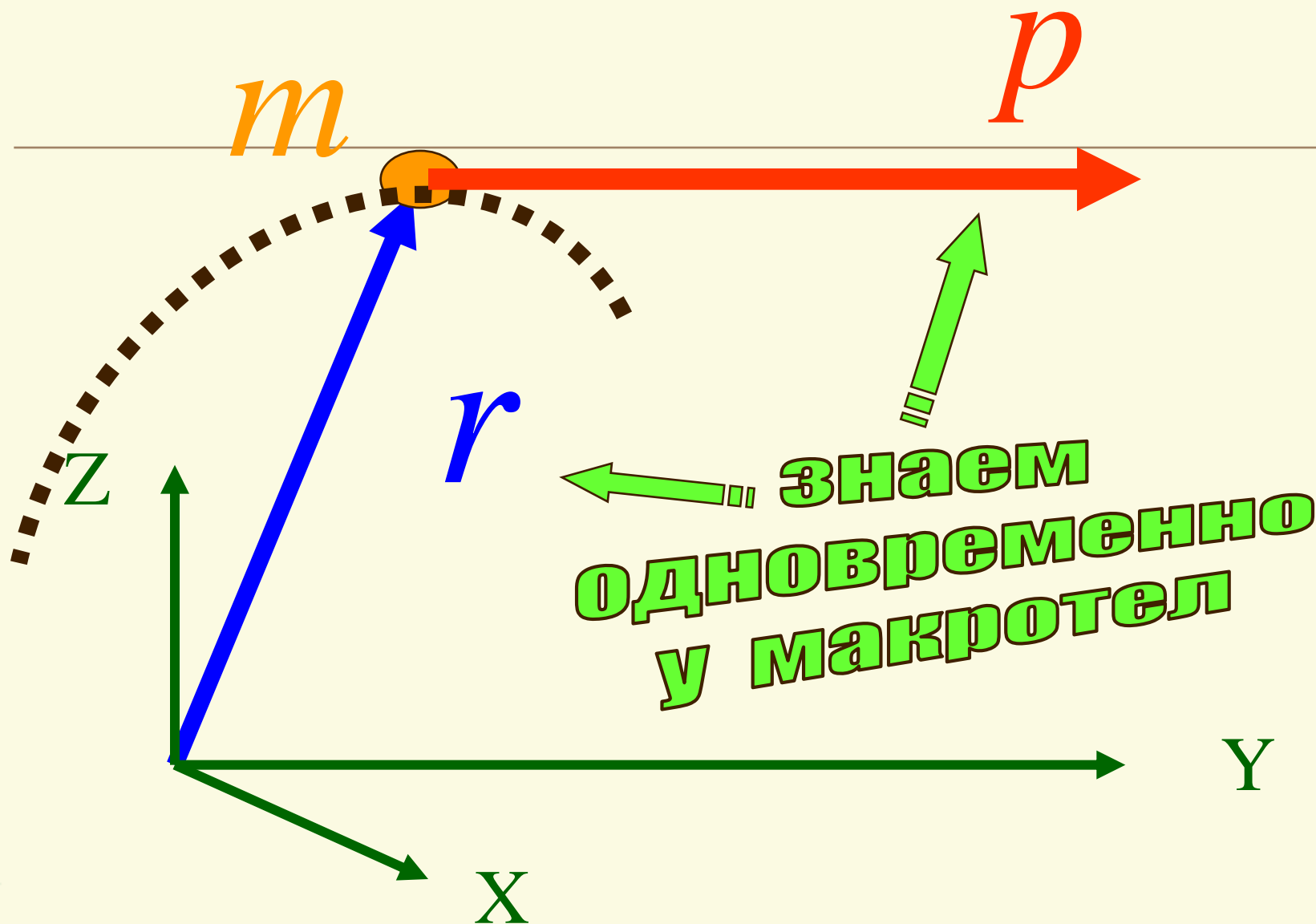
Микрообъекту не могут быть приписаны указанные динамические переменные.

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

Уравнение динамики Ньютона

применимо только к макротелам





Поэтому можно записать
уравнение движения
макрочастицы в виде:

$$F = \frac{dp}{dt} =$$

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

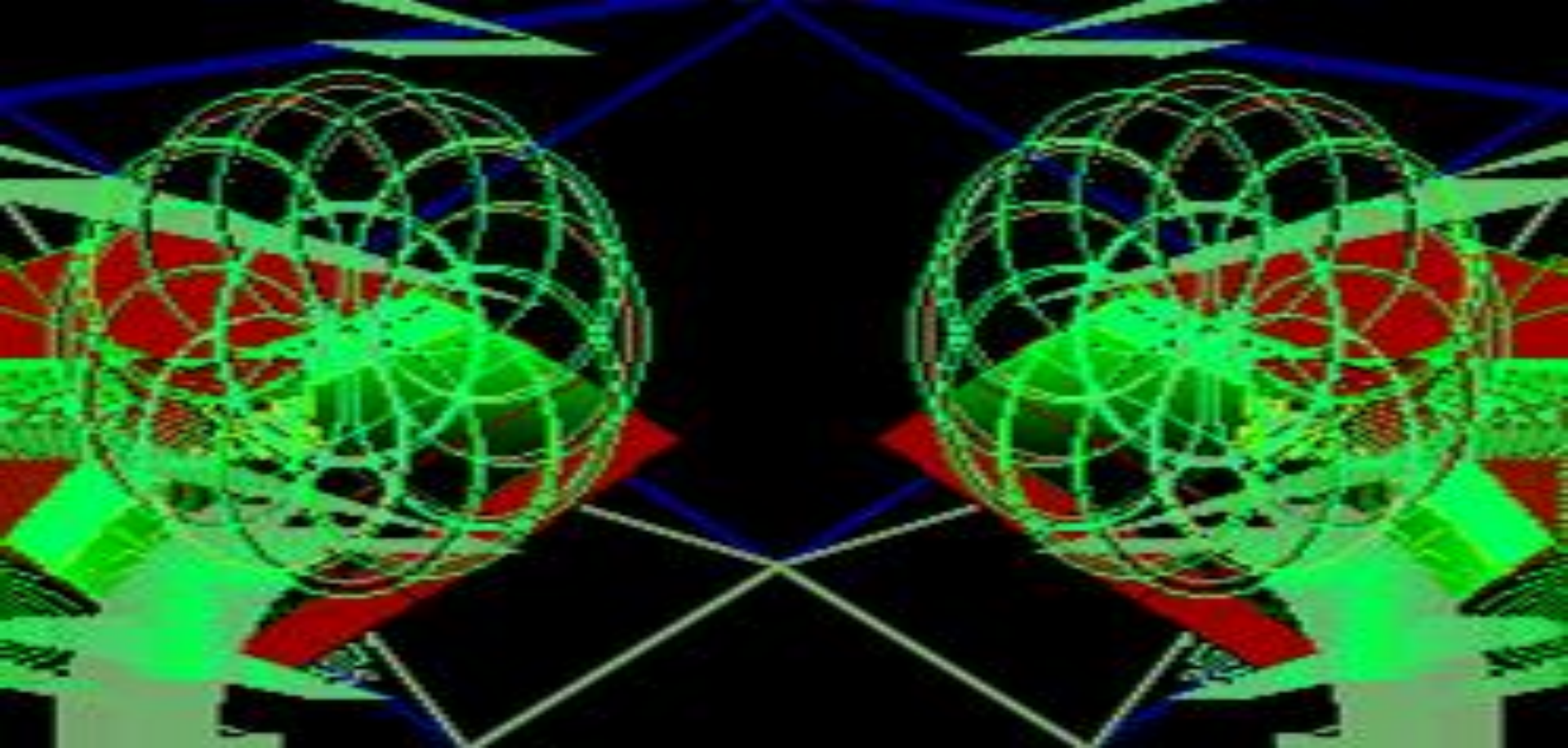
A silver metal spiral binding is visible on the left side of the page, looping through a series of holes.

Решение уравнения дает

траекторию движения -
непрерывную линию
в пространстве.

Как описать движение микрочастиц
с учетом их волновых свойств?





Для
микрочастиц нельзя одновременно
знать координату и импульс

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:

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

где h — постоянная Планка.

Более точная форма:

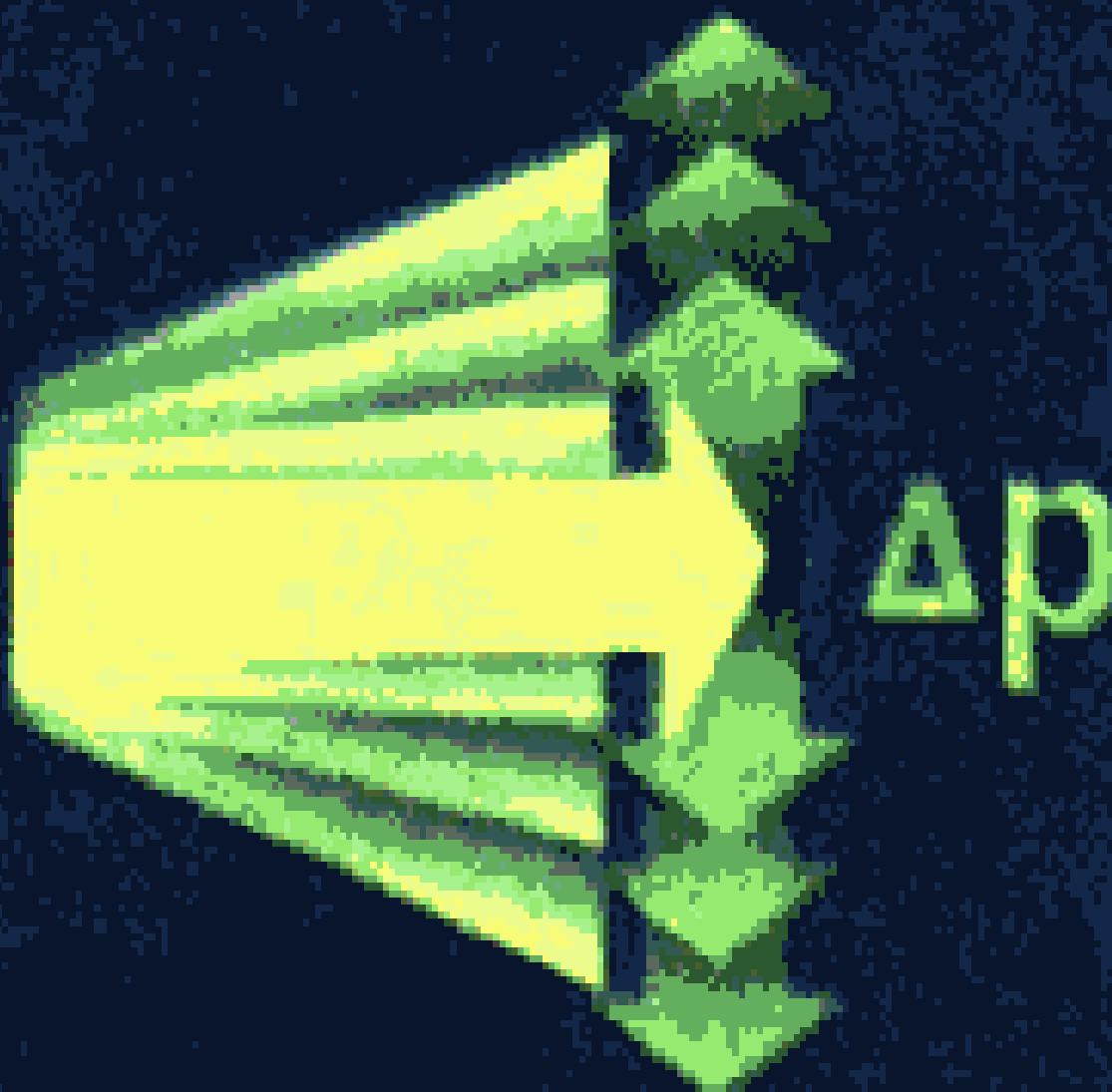
$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \hbar / 2$$

- соотношение неопределённостей Гейзенберга для координаты и импульса

Аналогично:

$$\Delta y \cdot \Delta p_y \geq \hbar / 2 \quad ; \quad \Delta z \cdot \Delta p_z \geq \hbar / 2$$

Соотношение неопределённостей определяет допустимый принципиальный предел неточностей Δx и Δp_x , с которыми состояние частицы можно характеризовать классически, т.е. координатой и импульсом.



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 изменить координату и импульс микрообъекта.**



Соотношение неопределенностей Гейзенберга

$$\Delta p_x \cdot \Delta x \geq \frac{\hbar}{2}$$

Это соотношение открыл *в 1927 году Вернер Гейзенберг.*

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*:

$$\Delta E \cdot \Delta t \geq \hbar / 2 \quad (3)$$

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

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

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 соотношение неопределённости вместо p_x произведение mv_x , получим соотношение:

$$\Delta x \cdot \Delta v_x \geq \hbar / 2m$$

$$\Delta x \cdot \Delta v_x \geq \hbar / 2m$$

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:

$$\Delta v_x = \frac{1,05 \cdot 10^{-34}}{2 \cdot 10^{-8} \cdot 10^{-12}} \text{ м/с} = 5,25 \cdot 10^{-15} \text{ м/с},$$

$$\Delta v_x = 5,25 \cdot 10^{-15} \text{ м/с},$$

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? Из соотношения неопределённостей получим:

$$\Delta x = \frac{\hbar}{2m\Delta v_x} = \frac{1,05 \cdot 10^{-34}}{2 \cdot 9,11 \cdot 10^{-31} \cdot 10^4} = 5,76 \cdot 10^{-9} \text{ м}$$

Т.о., положение электрона может быть определено с точностью до нанометра. 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, движущемуся в атоме водорода.

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

$$\Delta v = \frac{1,05 \cdot 10^{-34}}{2 \cdot 9,11 \cdot 10^{-31} \cdot 10^{-10}} = 5,76 \cdot 10^5 \text{ м/с}$$

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.

1. Определить неточность Δx в определении координаты электрона, движущегося в атоме со скоростью $V = 1,5 \cdot 10^6$ м/с, если допускаемая неточность ΔV в определении скорости составляет **10%** от её величины. Сравнить полученную неточность с диаметром d атома водорода, вычисленным по теории Бора для основного состояния, и указать, применимо ли понятие траектории в данном случае.

Решение.

Сразу отметим, что $v \ll c$, следовательно, импульс электрона $p = mv$.

Согласно соотношению неопределённостей Гейзенберга

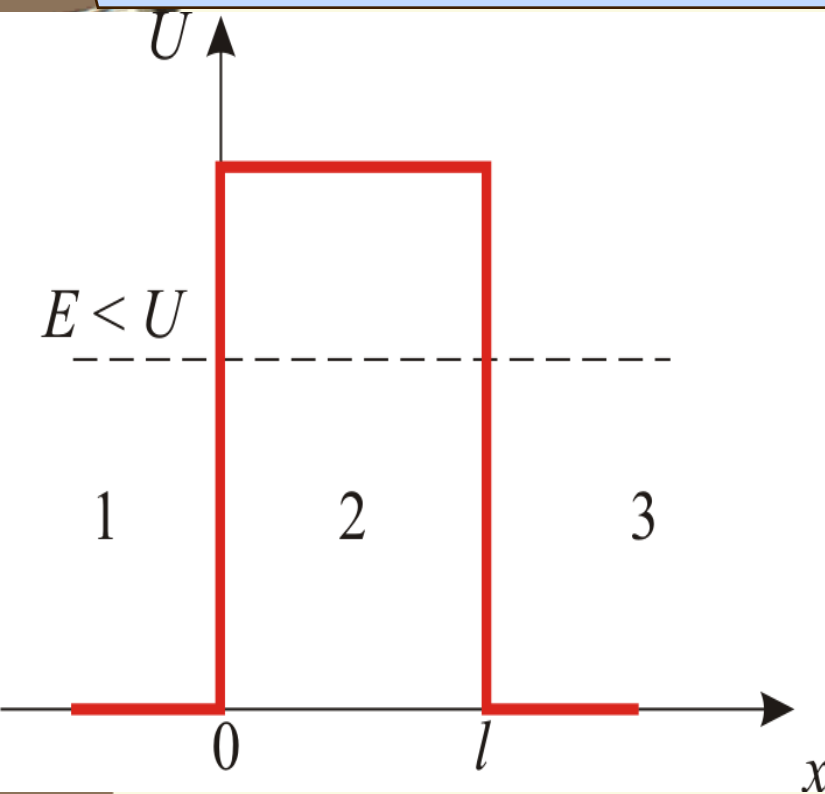
$$\Delta p_x \Delta x \geq \hbar. \quad m \Delta V_x \Delta x \geq \hbar.$$

$$\Delta x \geq \frac{\hbar}{m \Delta V_x}. \quad \Delta x \geq \frac{1,05 \cdot 10^{-34}}{9,1 \cdot 10^{-31} \cdot 0,1 \cdot 1,5 \cdot 10^6} \approx 0,5 \cdot 10^{-10} \text{ (м)}.$$

$$\Delta x \approx R_1 = 0,529 \cdot 10^{-10} \text{ (м)}.$$

Очевидно, что понятие траектории в этом случае неприменимо.

Прохождение частиц сквозь потенциальный барьер. Туннельный эффект



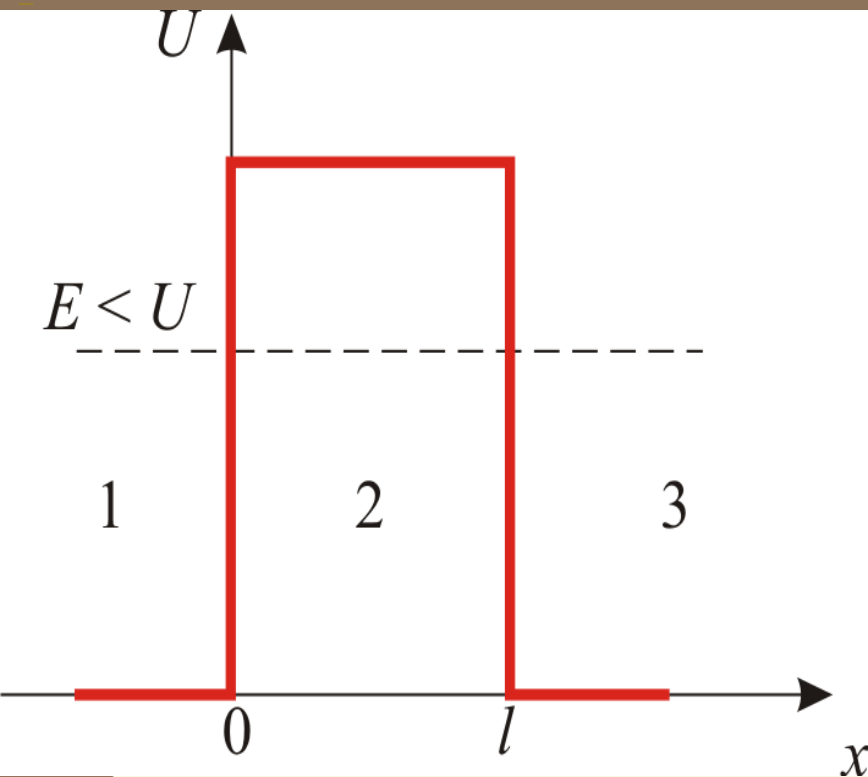
Рассмотрим простейший потенциальный барьер прямоугольной формы высоты U и шириной l для одномерного (по оси x) движения частицы.

$$U(x) = \begin{cases} 0, & x < 0 & 1 \text{ обл.} \\ U, & 0 < x < l & 2 \text{ обл.} \\ 0, & x > l & 3 \text{ обл.} \end{cases}$$

При данных условиях задачи классическая частица,
обладающая энергией E :

либо беспрепятственно пройдет под барьером,

либо отразится от него ($E < U$) и будет двигаться в обратную сторону, т.е. она не может проникнуть через барьер.



Для микрочастицы же, даже при $E > U$, *имеется отличная от нуля возможность, что частица отразится от барьера и будет двигаться в обратную сторону.*

При $E < U$ *имеется также отличная от нуля вероятность, что частица окажется в области $x > l$, т.е. проникнет сквозь барьер.*

Прохождение частицы сквозь барьер *можно пояснить соотношением неопределенностей.*

Неопределенность импульса на отрезке $\Delta x = l$ составляет $\Delta p \geq \hbar / 2l$, а кинетическая энергия будет:

$$E = \frac{\Delta p^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{8l^2 m}$$

и может оказаться достаточной для того, чтобы полная энергия оказалась больше потенциальной.

С классической точки зрения прохождение частицы сквозь потенциальный барьер при $E < U$ невозможно, так как частица, находясь в области барьера, должна была бы обладать отрицательной кинетической энергией.

Туннельный эффект является *специфическим квантовым эффектом*.

Частица проходит как бы по туннелю сквозь барьер, на самом деле частица, обладая кинетической энергией,

$$E = \frac{\Delta p^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{8l^2 m} \quad \text{превышающей потенциальную энергию } U \text{ проходит над барьером.}$$

Основы теории туннельных переходов заложены работами *советских ученых Л.И. Мандельштама и М.А. Леонтовича в 1928 г.* Туннельное прохождение сквозь потенциальный барьер лежит в *основе многих явлений:*

- **физики твердого тела** (например, явления в контактном слое на границе двух полупроводников),
- **атомной и ядерной физики** (например, α -распад, протекание термоядерных реакций).

В квантовой механике широко используется понятие — **оператор**. Под оператором понимают *правило*, посредством которого одной функции φ сопоставляется другая функция f т. е. :

$$f = \hat{Q} \varphi$$

\hat{Q} — символ обозначения оператора.

Есть операторы координат, импульса, кинетической и потенциальной энергии, оператор полной энергии и т.д.

$\frac{d}{dt}$ — оператор скорости;

$\frac{d^2}{dt^2}$ — ускорения.

Если S — путь, то $\frac{dS}{dt} = v$ — скорость и т.д.

Выражение для среднего значения координаты x :

$$\langle x \rangle = \int x \Psi^* \Psi dx$$

Обычно записывают:

$$\langle x \rangle = \int \Psi^* \hat{x} \Psi dx$$

где $\hat{x} = x$ - **оператор координат**. Действие оператора координаты сводится к умножению на саму координату.

Среднее значение импульса:

$$\langle p \rangle = \int \Psi^* \hat{p} \Psi dV$$

где $\hat{p} = -i\hbar \nabla$ - **оператор импульса**,

$$\nabla = \frac{\partial}{\partial x} \vec{i} + \frac{\partial}{\partial y} \vec{j} + \frac{\partial}{\partial z} \vec{k} \quad - \text{градиент.}$$

Оператор проекции импульса на ось x : $\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$

Оператор кинетической энергии:

$$\hat{E}_{кин} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2$$

Средняя кинетическая энергия:

$$\langle E_{кин} \rangle = \int \Psi^* \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \right) \Psi dV$$

Найдём **оператор полной энергии**, который представляет собой сумму операторов кинетической и потенциальной энергии:

$$\hat{H} = \hat{E}_{кин} + \hat{U} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U$$

- оператор Гамильтона
или Гамильтониан

$$\Delta = \nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \quad \text{(оператор полной энергии)}$$

- оператор Лапласа



ЛЕКЦІЯ ЗАКОНЧЕНА!