Комплексни числа

- *Аритметичен вид* на комплексно число: $z = a + ib,\ i^2 = -1$

- Формула на Ойлер: $e^{i\varphi} = \cos\varphi + i\sin\varphi$

- *Тригонометричен вид* на комплексно число: $z = r\left(\cos\varphi + i\sin\varphi\right)$

  където $|z| = r = \sqrt{a^2 + b^2};\ tg\left(\varphi\right) = b/a$

  – *модул (абсолютна стойност)* на комплексното число: $|z| = r = \sqrt{a^2 + b^2}$

  – *аргумент (фаза)* на комплексното число: $tg\left(\varphi\right) = b/a$

- *Експоненциален вид* на комплексно число:

$$z = r\left(\cos\varphi + i\sin\varphi\right) = re^{i\varphi}, r = \sqrt{a^2 + b^2}; tg\left(\varphi\right) = b/a$$

Основи на квантовата механика

- Вълна на Дьо Бройл, вълнова функция и движение на *електрон*

- Общо уравнение на Шрьодингер за вълновата функция на *електрона.* Стационарно (амплитудно) уравнение на Шрьодингер.

- Описание на движението на *електрона* чрез решаване на уравнението на Шрьодингер
  - Движение на *свободен електрон*
    - *Непрекъснати стойности на енергията*
  - Движение на *електрон в безкрайно дълбока едномерна потенциална яма*
    - *Квантово състояние, квантово число*
    - *Дискретни стойности на енергията (квантуване на енергията)-енергетични нива*

Физически смисъл на вълната на Дьо Бройл

- *Вълните на Дьо Бройл* не са електромагнитни и нямат аналогия с вълните в класическата физика. Каква е тяхната природа?
- *Вълновата функция* или *вълната на Дьо Бройл* описва разпределението на вероятността за намиране на частицата в момент t в точка с координати x,y, z. *(Макс Борн, 1926 г.)*
  - Вероятността *dP* да намерим частица в околността *dxdydz*, центрирана около точка с координати *x*,y, z в момента време *t* е:

$$dP = \left|\Psi\left(x, y, z, t\right)\right|^2 dV\,,\; dV = dx\,dy\,dz$$

  - Физичен смисъл има не самата *вълнова функция Ψ*, а квадратът на нейния модул, който е *плътност на вероятността* .

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

  - *Условие за нормировка* на *вълновата функция -* вероятността частицата да бъде някъде в пространството във фиксиран момент от време t е единица.

Уравнение на Шрьодингер

- *Общо едномерно уравнение на Шрьодингер (*1926 г.*)* за вълновата функция:

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

  – Ψ е *вълновата функция*
  – m е *масата на частицата*
  – U е *потенциалната енергия на частицата* във външно поле

- С*тационарно уравнение на Шрьодингер* – уравнение за стационарните състояния:

$$\Psi(x,t)=\psi(x)\exp\left(-i\,Et/\hbar\right)$$

E - *пълна енергия* на частицата - постоянна величина при стационарно поле

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}+\frac{2m}{\hbar^2}\left(E-U(x)\right)\psi(x)=0$$

Движение на свободен електрон

- Под свободен електрон в КМ разбираме електрон с маса *m*, който се движи с постоянна скорост и енергия E по оста x, и U=0. *Пълната енергия Е съвпада с кинетичната енергия. Тогава стационарното уравнение на Шрьодингер се записва така:*

$$\frac{d^2}{dx^2}\psi(x)+k^2\psi(x)=0;k^2=2mE/\hbar^2$$

- Общото решение на това уравнение е:

$$\psi(x)=A_1\exp(ikx)+A_2\exp(-ikx)$$

- Вълновата функция на свободния електрон (решението на общото уравнение на Шрьодингер) е:

$$\Psi(x,t)=\psi(x)\exp(-i\omega t)=A_1\exp\left[i(kx-\omega t)\right]+A_2\exp\left[i(-kx-\omega t)\right]$$

Вълнова функция на свободен електрон

- Вълновите свойства на свободен електрон разпространяващ се в положителната посока на оста ох се описва със следната *вълнова функция:*

$$\Psi(x,t) = A_1 \exp\left[i\left(kx - \omega t\right)\right]$$

- Съответната плътност на вероятността е: $\left|\Psi(x,t)\right|^2 = \left|A_1\right|^2$. Тъй като плътността на вероятността е постоянна във всяка точка от пространството, е*лектрона може да бъде навсякъде!?*
- Вълновото число к и енергията Е могат да се променят непрекъснато:

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \Rightarrow E = \frac{1}{2m}\hbar^2 k^2$$

Казва се, че *спектъра на енергията е непрекъснат.*

Гранична задача за стационарното уравнение на Шрьодингер

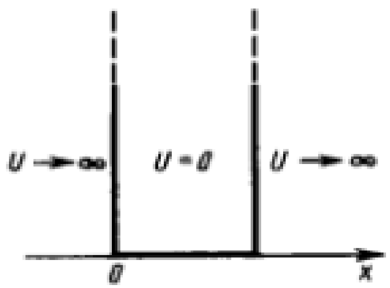
- *Стационарното уравнение на Шрьодингер* с наложени условия на вълновата функция в две точки се превръща в *гранична задача в която* E - *пълната енергия* се нарича параметър на *граничната задача:*

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}+\frac{2m}{\hbar^2}\left(E-U(x)\right)\psi(x)=0;\quad \psi(0)=\psi(D)=0$$

- Тази *гранична задача* има решения само за определени дискретни стойности на параметъра E.
  - Тези стойности на E се наричат *собствени стойности* .
  - Решенията на стационарното уравнение на Шрьодингер съответстващи на *собствените стойности* се наричат *собствени функции*.
  - И така, решаването на граничната задача се свежда до намирането на собствените стойности на енергията и съответните собствени функции.

Електрон в едномерна потенциална яма

- Разглеждаме движението на електрон в едномерна правоъгълна потенциална яма с “безкрайно високи стени” и с ширина D.



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

- *Стационарното уравнение на Шрьодингер* описва поведението на електрона в ямата:

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + k^2\psi(x) = 0, k^2 = 2mE/\hbar^2$$

- Тъй като стените на потенциалната яма са безкрайно високи, частицата не може да проникне там - зад границите на ямата вълновата функция трябва да бъде нула, следователно г*раничните условия* за *вълновата функция* са:

$$\psi(0) = \psi(D) = 0$$

Следствия от граничните условия

- Общото решение за *стационарната вълнова функция* е:

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

- От *първото гранично условие* получаваме:

$$\psi(0) = 0 \Rightarrow B = 0 \Rightarrow \psi(x) = A\sin(kx)$$

- От *второто гранично условие* получаваме:

$$\psi(D) = A\sin(kD) = 0; k_n D = n\pi \Rightarrow k_n = (n\pi)/D, n = 1, 2, \ldots$$

 и следователно, k взема *дискретни стойности* пропорционални на цялото число n, което ще наричаме *квантово число.*

- *Резултатът от второто гранично условие* може да се разглежда и като резултат от образуването на *стояща вълна* при интерференцията на *вълните на дьо Бройл*, движещи се в двете посоки на ямата:

$$k_n = n\pi/D; k_n = 2\pi/\lambda_n \Rightarrow \lambda_n = 2D/n$$

Дискретни собствени стойности на енергията

- *Енергията на електрона* намиращ се в потенциалната яма, може да заема само *дискретни стойности!*

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = n^2 \frac{h^2}{8mD^2} = n^2 E_1$$

  – Енергетичният спектър на електрона е *дискретен*! Казва се, че енергията на електрона се *квантува!*

  – Тези стойности се наричат *енергетични нива*, а цялото число n се нарича ***главно квантово число***

  – Електронът никога не е в покой, тъй като най-малката разрешена кинетична енергия е:

$$E_1 = h^2 / 8mD^2$$

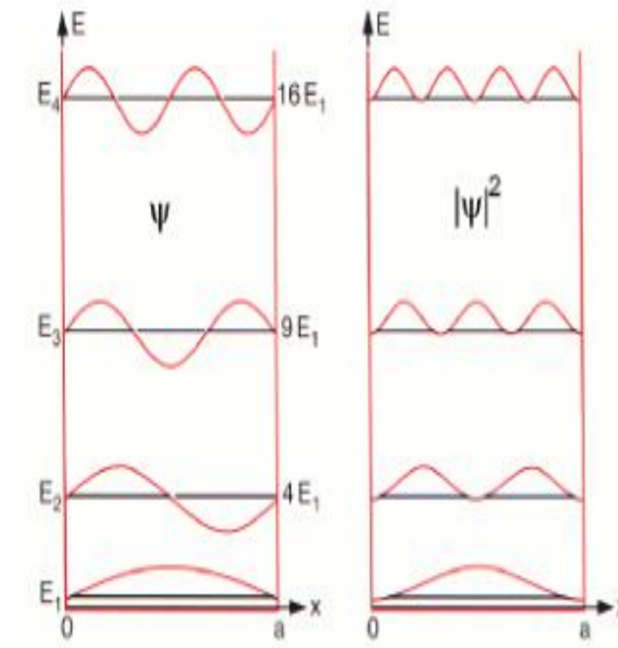
- *Собствените функции* са:

$$\psi_n(x) = A\sin(k_n x) = \sqrt{2/D}\sin(n\pi x/D)$$

, където е отчетено условието за нормировка на вълновите функции.

Собствени функции и плътност на вероятността

- *Собствените функции* на електрона в ямата представляват стоящи вълни с възли в крайните и точки
  - при големи стойности на n нарастват енергиите и броят на вълните, които се нанасят върху ширината на ямата нараства.
- *Плътностите на вероятностите* за някои точки на ямата са нула, следователно забранени за електрона.
  - При големи стойности на n: точките, в които вероятността да открием електрона е максимална, нараства много, като тези точки стават все по близки.



$$\lambda_n = h \big/ \sqrt{2mE_n}$$

- *При много големи стойности на n, дължината на вълната на дьо Бройл клони към нула, т.е. вълновите свойства ще се проявяват слабо, и резултатите ще се възпроизведат чрез класическата физика!*