

Т.10

Корпускулярно-волновой дуализм.

1. Гипотеза де Бройля
2. Опытное обоснование корпускулярно-волнового дуализма материи
3. Соотношение неопределённости, его физический смысл и критика идеалистического истолкования.
4. Волновая функция. Уравнение Шредингера.

1.

Боровская интерпретация спектра водорода, основанная на квантовании моментов импульса $\bar{e}$, движущимся по стационарным орбитам вокруг ядра, успешно объяснила наблюдаемые на опыте спектральные линии. Однако правило квантования оставалось гипотезой, не имевшей более глубокого теоретического обоснования, до тех пор, пока французский физик Луи де Бройль в 1924 не высказал предположения о волновом характере материи.

Допуская, что частицы вещества наряду с корпускулярными свойствами имеют также и волновые де Бройль перенёс на случай частиц вещества те же правила перехода от одной картины к другой, какие справедливы на случай света.

Импульс фотона $p = m_0 c$ связан с длиной волны соотношением

$$p = m_0 c = \frac{p = m_0 c^2}{c} = \frac{h\nu}{c} = \frac{h}{\lambda} \quad (1)$$

или (2)

Де Бройль постулировал, что соотношение (2) справедливо не только для фотонов, но и для электронов. Впоследствии оказалось, что это соотношение справедливо для любых микрочастиц и систем, состоящих из них.

При движении со скоростью V импульсы частиц $p = mV$. Тогда

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mV} \quad (3)$$

- это де Бройлевская длина волны, связанной с движением частицы массой m со скоростью V .

Гипотеза де Бройля экспериментально подтвердилась в опытах К. Дэвиссона и Л. Джермера (1927), наблюдавших рассеяние электронов монокристаллом Ni.

Пучок электронов направлялся из электронной пушки на поверхность заземлённого кристалла Ni и отражался от него. Устройство пушки позволяло задавать электронам определённую скорость. Было обнаружено, что пучок электронов, рассеивающийся от кристалла Ni, даёт дифракционную картину.

Вскоре после опытов Дэвиссона и Джермера волновые свойства электронов были обнаружены в экспериментальных исследованиях П.С. Тартаковского (ЛГУ) и Г. Томсона (Эбердинский университет). Опыт осуществлялся следующим образом:

Пучок электронов ускорялся разностью потенциалов в несколько ... и, проходя через тонкую металлическую фольгу, попадал на фотоплёнку. Полученная на фотопластинке картина была идентична дифракционной картине рентгеновских лучей (является электромагнитным излучением).

$$\text{Энергия ,,, , приобретает электроны в ускоряющем электронном поле } \frac{1}{2}mV^2 = eU ;$$

$$m^2V^2 = 2meU \quad mV = \sqrt{2meU} = p \quad 2d \sin \theta = k\lambda$$

Связанная с этим импульсом длина волны де Бройля

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2meU}} \quad (4)$$

Для ускоряющих полей, лежащих в интервале $1 - 10^4 \text{ В}$, которые обычно используют в электронных приборах, длины волн летящих электронов составляют $10 \div 0,1 \text{ \AA}$, т.е. меняются в диапазоне длин волн обычных рентгеновских лучей. Волновые свойства электронов, в частности дифракция, могут наблюдаться на дифракционной решётке с постоянно $\sim \lambda$. Такой решёткой является ...-кристаллическая решётка. Подставляя выражение (4) в формулу Вульре-Брега $2d \sin \theta = n\lambda$ (λ - длина рентгеновской волны, θ - угол рассеивания), можно определить положение max и min в дифр. картине.

проявляют явно, только одну сторону своей природы - корпускулярную!

И так, новая теория, трактующая материальные частицы как объект двойственной корпускулярно-волновой природы, не отбрасывая старых корпускулярных представлений о макроскопических частицах материи. Она, обосновывая эти представления с новой точки зрения, определяет границы их применимости.

2.

Некоторые свойства волн де-Бройля.

1) для свободного электрона

$$\lambda = \frac{h}{mV} = \frac{h}{p} ; \quad k = \frac{2\pi}{\lambda} \rightarrow p = \frac{h}{\lambda} = \frac{h}{2\pi} k = \hbar k$$

2) фазовая и групповая скорость

$$\lambda = \frac{V_{\partial \phi / \partial \zeta}}{v} ; \quad V_{\partial \phi / \partial \zeta} = \frac{\omega}{k} ; \quad U = \frac{d\omega}{dk}$$

$$W = h\nu = h \frac{\omega}{2\pi} = \hbar\omega$$

$$V_{\partial\vec{a}\vec{\epsilon}} = \frac{\omega}{k} \frac{\hbar}{\hbar} = \frac{W}{p} = \frac{mc^2}{mV} = \frac{c^2}{V} = \frac{c^2 m \lambda}{h}$$

1. $V_{\partial\vec{a}\vec{\epsilon}} > c$ $V_{\partial\vec{a}\vec{\epsilon}} \sim \lambda$ - дисперсия электронной волны

$$U = \frac{d\omega}{dk} = \frac{d(\hbar\omega)}{d(\hbar k)} = \frac{dW}{dp} \quad W = c\sqrt{p^2 + m_0^2 c^2},$$

$$\frac{dW}{dp} = \frac{cp}{\sqrt{p^2 + m_0^2 c^2}} = \frac{c^2 p}{W} = \frac{c^2 m V}{mc^2} = V.$$

2. $U = \frac{d\omega}{dk} = V$ - т.е. групповая скорость равна скорости частицы.

3) Гипотеза де Бройля позволяет понять почему в атоме водорода разрешены лишь некоторые орбиты электрона.

Рассмотрим первый постулат Бора: $mV_n r_n = n \frac{h}{2\pi} = n\hbar$ по де Бройлю

$$mV_n = p_n = \frac{h}{\lambda} = \frac{2\pi\hbar}{\lambda}. \text{ Тогда } \frac{2\pi\hbar r_n}{\lambda} = n\hbar, \text{ откуда получаем}$$

$$2\pi r_n = n\lambda \quad (6)$$

- это условие означает, что на орбите электрона должно указываться целое число волн де Бройля - а это есть условие образования стоячей волны. Стоячая волна не переносит (не излучает) энергии в пространстве. Следовательно, на стационарных орбитах электроны не излучают энергии.

или квантовой механики. Можно сказать, что 1925-30 гг. явились поворотными годами в развитии теоретической физики. В эти годы были опубликованы выдающиеся по своему значению физико-математические исследования Шредингера, Гейзенберга, Борна, Дирака, Фока, Паули и др. В короткий срок в обширной серии статей были развиты основные направления квантовой (волновой) механики и достигнуты первые успехи в решении ряда квантово-механических задач.

Если электрон - частица, то он должен быть локализован в пространстве, т.е. в каждый момент времени должен находиться в определённой точке пространства. Если понимать электрон как волну, то он д.б. как бы размазан по пространству. Возникает противоречие между представлением об электроне как частице и как волне. Это противоречие было устранено Гейзенбергом, который задался вопросом, можно ли одновременно точно определить положение элементарной частицы в пространстве и её скорость. Гейзенберг утверждает, что это невозможно.

Согласно Гейзенбергу неопределённость (неточность) измерения положения Δx связана с неточностью определения импульса частицы соотношением

Δx - пространственная протяженность ... волн связана с наличием Δw или Δk .
Причём

$$\Delta x \Delta k \geq 1, \Delta k = \frac{\Delta p}{\hbar}, \Delta k = \frac{2\pi}{\lambda_1} - \frac{2\pi}{\lambda_2} = 2\pi \frac{\Delta \lambda}{\lambda_1 \lambda_2}$$

$$\left. \begin{aligned} \Delta x \Delta p_x &\geq \hbar \\ \Delta y \Delta p_y &\geq \hbar \\ \Delta z \Delta p_z &\geq \hbar \end{aligned} \right\} \quad (7)$$

$$\Delta w \Delta t \geq \hbar \quad (8)$$

и для взятых попарно проекций момента импульса на координатной оси.

Это означает, что если мы захотим определить местонахождение частицы более точно, то это можно сделать только за счёт увеличения неточности определения импульса Δp . И наоборот, если мы определяем с высокой точностью импульс частицы (скорость его), то такое измерение лишает нас возможности точно узнать, где находится частица после измерения.

Следовательно, полное, абсолютно точное описание микрообъектов невозможно.

Соотношения, аналогичные (7), (8) справедливы также для ряда других величин, в частности, для взятых попарно проекций момента импульса на координатной оси.

Чтобы качественно пояснить соотношение неопределённостей, рассмотрим дифракцию электронного пучка на щели шириной Δx . Начальный импульс электронов направлен вдоль оси Z :

При прохождении через щель электронные волны дифрагируют и падают на экран на расстоянии L от щели, образуя на нём дифракционную картину. Эта картина в точности совпадает со случаем дифракции световых волн той же длины волны.

$\pm \Delta \bar{p}_x$ - преобразуемый электронами в результате дифракции поперечный импульс

$\Delta p_x = p \sin \phi$ (согласно результату, полученному при рассмотрении явления дифракции световых волн на щели)

$$\sin \phi = \frac{\lambda}{\Delta x}. \text{ Отсюда } \Delta p_x = p \frac{\lambda}{\Delta x}; \lambda = \frac{h}{p} \quad \Delta x \Delta p_x \cong h$$

В действительности, наш расчёт был довольно грубым, поэтому можно говорить лишь о приближённом равенстве т.е. приходим к (7).

Важно понимать, что принцип неопределённости относится к проблеме предсказания событий. Когда электрон проходит через щель, мы знаем лишь то, что он попадёт на экран в область размером Δx_1 около центрального максимума, а значит

неопределённость в его поперечном импульсе составляет $\pm \Delta \bar{p}_x$. После того, как электрон попал на экран, мы знаем где это произошло по вспышкам света.

Не следует думать, что принцип неопределённости есть некая таинственная преграда природы, мешающая человеку слишком глубоко проникнуть в загадки поведения атомов. Принцип неопределённости является одним из проявлений корпускулярно-волнового дуализма излучения и вещества.

4.

Развитие ньютоновской теории способствовало становлению детерминантного взгляда на природу. Согласно этому мировоззрению, можно определить положение и скорость всех тел в замкнутой системе в какой-то момент времени и, если известна вся сила взаимодействия между телами, то можно полностью рассчитать поведение системы в будущем. Иными словами будущее системы предопределено:

$$x(0), V(0), F_x \rightarrow$$

$$F_x = \frac{dp_x}{dt} \rightarrow p_x = \int F_x dt \rightarrow U_x = \frac{dx}{dt} \rightarrow x = \int U_x dt$$

Принципиально иначе обстоит дело с локализацией волновых объектов. Волна представляет собой протяжённый объект, заполняющий определённую область пространства. Поэтому нельзя определить координаты точки, в которой в момент времени t проявится действие волны.

Любая волна независимо от её природы характеризуется некоторой волновой функцией $\Psi(\vec{r}, t)$.

Соотношение между волновой функцией и описываемой ею частицей аналогично соотношению между световой волной и фотоном. Можно показать, что квадрат амплитуды световой волны определяет вероятность попадания фотона в соответствующую точку пространства. Аналогично, квадрат модуля волновой функции для какой-либо точки пространства, будучи умноженным на включающий в себя эту точку элемент объёма dV , определяет вероятность dW того, что частица будет обнаружена в пределах объёма dV :

$$dW = |\Psi|^2 dV = \Psi \Psi^* dV, \text{ т.о. } |\Psi|^2 = \frac{dW}{dV} - \text{представляет собой плотность}$$

нахождения (обнаружения) частиц в соответствующей точке пространства.

Поскольку $\oint_V dW = 1$, то $\oint_V |\Psi|^2 dV = 1$ условие нормировки волновой функции.

Если известна Ψ - функция, описывающая состояние частицы, то вероятность всех возможных процессов определена. Это даёт возможность точно судить о поведении множества частиц, движущихся в одинаковых условиях.

Волновая функция обладает рядом свойств

1) Ψ - функция д.б. непрерывной, конечной и однозначной.

2) производные $\frac{d\Psi}{dx}$, $\frac{d\Psi}{dy}$, $\frac{d\Psi}{dz}$, $\frac{d\Psi}{dt}$ д.б. непрерывны

3) $|\Psi|^2$ д.б интегрируема

В квантовой механике возникает задача нахождения уравнения для $\Psi(\vec{r}, t)$, позволяющего рассчитать изменение этой функции с течением времени в любой точке пространства.

Уравнение для волновой функции было впервые записано Шредингером. Это уравнение не выводится из каких-либо известных ранее соотношений. Его следует рассматривать как исходное основное предположение, справедливость которого доказывается тем, что вытекающие из него следствия согласуются с опытными фактами:

$$i\hbar \frac{d\Psi}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi + U\Psi \quad (9)$$

$\Delta = \frac{d^2}{dx^2} + \frac{d^2}{dy^2} + \frac{d^2}{dz^2}$ - оператор Лапласа, $\Delta \Psi = \frac{d^2\Psi}{dx^2} + \frac{d^2\Psi}{dy^2} + \frac{d^2\Psi}{dz^2}$, U - потенциальная энергия частицы.

Уравнение (9) описывает изменение волновой функции в пространстве и во времени.

Рассмотрим движение частицы в стационарном потенциальном поле, т.е. $U(x, y, z)$.

$$\text{Тогда } \Psi(x, y, z, t) = \Psi(x, y, z)\varphi(t) = \Psi \oint \varphi \quad (10)$$

$\Psi(x, y, z)$ - координатная часть в.ф.

$\varphi(t)$ - временная составляющая в.ф.

Подставим (10) в (9) $\varphi(t)$

$$i\hbar \Psi \frac{d\varphi}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2m} \varphi \Delta \Psi + U\varphi \quad | : \varphi \Psi$$

$$\underbrace{i\hbar \frac{1}{\varphi} \frac{d\varphi}{dt}}_{f(t)} = -\underbrace{\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\Psi} \Delta \Psi + U}_{f(x,y,z)} \quad (11)$$

Равенство (11) возможно, если $f(t) = f(x, y, z) = \text{const}$.

$$\text{Пусть } i\hbar \frac{1}{\varphi} \frac{d\varphi}{dt} = +E. \text{ Тогда } \frac{d\varphi}{\varphi} = +\frac{E}{i\hbar} dt = -\frac{i}{\hbar} E dt$$

$$\int \frac{d\varphi}{\varphi} = -\frac{i}{\hbar} E \int dt \rightarrow \varphi = \varphi_0 e^{-\frac{i}{\hbar} Et} - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\varphi} \Delta \Psi + U = E \rightarrow \frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi + (E - U)\Psi = 0$$

$\Psi(x, y, z)$ удовлетворяет уравнению $\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi + (E - U)\Psi = 0$ - Стационарное уравнение Шредингера.

E - собственное значение энергии частицы

$\Psi(x, y, z)$ - собственное значение волновой функции

1

Рассмотрим движение световой частицы. В этом случае $U(x, y, z) = 0$

$$\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi + E \Psi = 0 \quad (1)$$

$$\Delta \Psi = \frac{d^2 \Psi}{dx^2} \quad \Psi = \Psi_0 e^{ikx} \quad (\text{можно убедиться подстановкой}) \quad \Delta \Psi = -k^2 \Psi$$

$$-\frac{\hbar^2 k^2}{2m} \Psi + E \Psi = 0 \rightarrow E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad - \text{собств. зн.} \quad \Psi = \Psi_0 e^{\frac{i}{\hbar} \sqrt{2mEx}} \quad - \text{собств. ф-ии}$$

$$\Psi = \Psi_0 e^{-i\omega t + ikx} = \Psi_0 e^{-\frac{i}{\hbar}(Et - px)} \quad (2)$$

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} k^2; \quad p = \hbar k \quad E = \frac{p^2}{2m} = \frac{mV_x^2}{2}$$

$$E = \hbar \omega \quad |\Psi|^2$$

$|\Psi|^2 = \Psi \Psi^* = \Psi_0^2 e^{-\frac{i}{\hbar}(Et - px)} e^{\frac{i}{\hbar}(Et - px)}$ т.е. световая квантовая частица описывается плоской монохром. Волной де Бройля (2)

2.

Рассмотренное в предыдущей лекции уравнение Шредингера позволяет решать практические задачи и находить стационарные и нестационарные состояния движущихся частиц в различных внешних полях. Отдельные важные примеры м.б. разобраны и без полного решения уравнения Шредингера, используя представление о Ψ - функции как о волне и учитывая ограничения, накладываемые на неё специфическими условиями данной задачи.

Электрон в бесконечно глубокой потенциальной яме

$$U = \infty \quad x < 0; \quad x > l$$

$$U = 0 \quad 0 \leq x \leq l$$

$$U = U(x); \quad \Psi = \Psi(x)$$

Уравнение Шредингера для одномерного случая будет иметь вид

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U)\Psi = 0 \quad (1)$$

Т.к. электрон находится внутри потенциального ящика, то он никак не может выйти за его пределы. Поэтому вероятность обнаружить частицу, а следовательно и функция Ψ , за пределами ямы равны 0. Из условия непрерывности Ψ - функции следует, что она д.б. равна нулю на границах ямы, т.е.

$$\left. \begin{aligned} \Psi(0) &= 0 \\ \Psi(l) &= 0 \end{aligned} \right\} \quad (2)$$

Выражения (2) определяют условия, которым должны удовлетворять решения уравнения (1).

Внутри ямы $U = 0$ и уравнение (1) имеет вид

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}E\Psi = 0 \quad (3)$$

Введём обозначение $\frac{2m}{\hbar^2}E = w^2$ и подставим его в (3). Получим уравнение хорошо известное из теории колебаний

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} + w^2\Psi = 0 \quad (4)$$

Решения которого имеют вид $\Psi = a \sin(wx + \alpha)$.

Из граничных условий для Ψ - функции

$$\Psi(0) = a \sin \alpha = 0 \rightarrow \alpha = 0$$

$$\Psi(l) = a \sin wl = 0 \rightarrow wl = \pm n\pi \quad (n = 1, 2, 3)$$

Т.о решения уравнения Шредингера будут иметь физический смысл не при всех значениях E , а лишь при тех, которые удовлетворяют соотношению

$$w^2 = \frac{2m}{\hbar^2}E = \frac{\pi^2 n^2}{l^2}, \text{ т.е. } E_n = \frac{\pi^2 n^2 \hbar^2}{2ml^2} \quad E_n \approx n^2$$

Т.о не прибегая ни к каким дополнительным предположениям, получим условие квантования энергии частицы.

E_n - уровни энергии

n - главное квантовое число.

Т.о частица в потенциальной яме может находиться только на определённых энергетических уровнях E_n , т.е в определённом квантовом состоянии.

$$\Psi(x) = a \sin \frac{\pi n}{l} x$$

Из условия нормировки волновой функции $a^2 \int_0^l \sin^2 \frac{\pi n}{l} x dx = 1$; $a = \sqrt{\frac{2}{l}}$

$$\Psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{l}} \sin \frac{\pi n}{l} x \quad (n = 1, 2, 3 \dots)$$

$$E_{\min} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ml^2}; \text{Наличие } E_{\min} \text{ вытекает из соотношения неопределённостей}$$

$$\left. \begin{array}{l} \Delta x \approx l \\ \Delta p \approx \frac{\hbar}{p} \end{array} \right\} E_{\min} \approx \frac{(\Delta p)^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2ml^2}$$

Положение дифракционного максимума, найденное экспериментально, хорошо совпало с вычисленным из условия В-Бр.

Волновая природа электронов, проявляющаяся в частности, в том, что электроны обнаруживают дифракцию, свидетельствует о невозможности представить электрон в виде «материальной точки». Электрон является сложным материальным образованием со сложной структурой, обладающий волновыми свойствами.

Свойства электрона меняются в зависимости от условий, в которых он находится, т.е. в зависимости от характера его взаимодействия с окружающей материей.

Корпускулярная сторона природы электрона проявляется в том, что электрон действует всегда как единое целое, иногда не дробясь на части. В последнее время удалось наблюдать дифракцию протонов, нейтронов и др. элементарных частиц.

Что касается макроскопических объектов (частиц материи), то их дифракцию наблюдать невозможно.

Так пылинка массой $m = 10^{-12}$ г и линейных размеров $\approx 10^{-4}$ см и скорости 1 см/с имеет длину волны $\lambda = \frac{6,62 \cdot 10^{-27}}{10^{-12}} = 6,62 \cdot 10^{-15}$ см = $6,62 \cdot 10^{-7}$ Å при такой λ

невозможно копировать условия с помощью которых можно было бы наблюдать дифракцию, т.е. макроскопические объекты.

Физический смысл волны де Бройля

Квадрат модуля амплитуды волны де Бройля в данной т. (интенсивность волны) является мерой вероятности того, что частица обнаруживается в этой точке.