3. Элементы квантовой механики

3.1. Гипотеза де Бройля

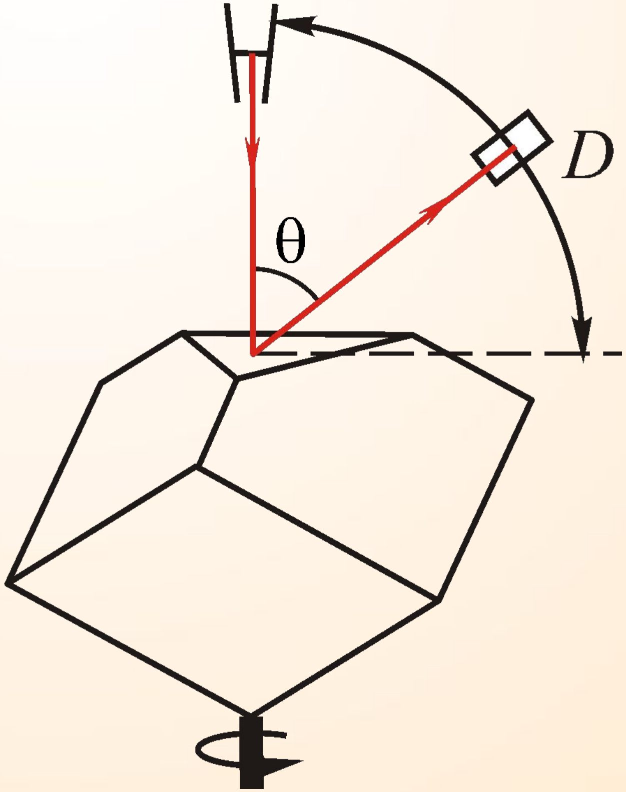
$$\boxed{\lambda = \frac{h}{p}} \qquad (3.1)$$

Классическое приближение (v << *c*): $p = m\mathrm{v}$

Релятивистское приближение (v → *c*):

$$p = \frac{1}{c}\sqrt{W^2 - W_0^2}$$

Опыт Дэвиссона – Джермера (1927):



$$d \cdot \sin\theta = m\lambda$$

Кристалл никеля d = 0,215 нм

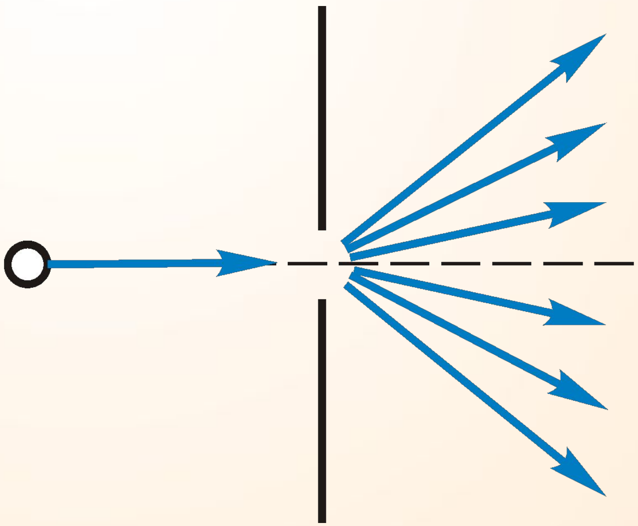
Пример

$m = 66$ кг

$v = 10$ м/с

$$\Rightarrow \quad \lambda = \frac{6{,}62 \cdot 10^{-34}\,Дж \cdot с}{66\,кг \cdot 10\,м/с} = 10^{-36}\,м$$

3.2. Принцип неопределенностей



$$\boxed{\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}} \qquad (3.2)$$

Пример

$$m = 75\,\text{кг и } \Delta v = 10^{-4}\ \text{м/с} \quad \Rightarrow \Delta p = 7{,}5 \cdot 10^{-3}\ \text{кг} \cdot \text{м/с}$$

$$\Delta x = \frac{1{,}05 \cdot 10^{-34}}{2 \cdot 7{,}5 \cdot 10^{-3}} \approx 0{,}6 \cdot 10^{-32}\ \text{м}$$

$$m = 9{,}11\cdot 10^{-31}\,\text{кг и } \Delta v = 10^{-4}\,\text{м/с} \quad \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \Delta p = 9{,}11\cdot 10^{-35}\,\text{кг}\cdot\text{м/с}$$

$$\Delta x = \frac{1{,}05\cdot 10^{-34}}{2\cdot 9{,}11\cdot 10^{-35}} \approx 0{,}5\,\text{м}$$

$$\boxed{\Delta E\cdot\tau \ge \frac{\hbar}{2}} \qquad (3.3)$$

Задача 3.1

Электрон с кинетической энергией 10 эВ находится в металлической пылинке диаметром 1 мкм. Оценить (в процентах) относительную неопределенность скорости электрона.

Дано:

$W_к = 10$ эВ $= 1.6\cdot10^{-18}$ Дж

$\Delta x = 1$ мкм $= 10^{-6}$ м

$\Delta v/v$ - ?

$$W_к = \frac{mv^2}{2} \Rightarrow v = \sqrt{\frac{2W_к}{m}}$$

$$\Delta p = \frac{\square}{2\Delta x} \Rightarrow \Delta v = \frac{\square}{2m\Delta x}$$

$$\frac{\Delta v}{v} = \frac{\hbar \cdot \sqrt{m}}{2m\Delta x \cdot \sqrt{2W_к}} = \frac{\hbar}{2\Delta x\sqrt{2mW_к}} =$$

$$= \frac{1{,}05 \cdot 10^{-34}\,\text{Дж} \cdot \text{с}}{2 \cdot 10^{-6}\,\text{м} \cdot \sqrt{2 \cdot 9{,}11 \cdot 10^{-31}\,\text{кг} \cdot 1{,}6 \cdot 10^{-18}\,\text{Дж}}} =$$

$$= \frac{1{,}05 \cdot 10^{-34}\,\text{Дж} \cdot \text{с}}{2 \cdot 10^{-6}\,\text{м} \cdot 1{,}7 \cdot 10^{-24} \cdot \sqrt{\text{Н} \cdot \text{с}^2 \cdot \text{Дж}/\text{м}}} =$$

$$= 0{,}31 \cdot 10^{-4}\,\frac{\text{Дж} \cdot \text{с}}{\text{м} \cdot \dfrac{\text{Дж} \cdot \text{с}}{\text{м}}} = \underline{0{,}31 \cdot 10^{-4}}$$

3.3. Уравнение Шредингера

1926 г.

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi + U\Psi = i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}} \qquad (3.4)$$

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$ - оператор Лапласа

Интерпретация М. Борна (1926г.):

Квадрат модуля волновой функции определяет вероятность dP того, что частица будет обнаружена в пределах объема dV.

$$dP = |\psi|^2 \cdot dV \qquad (3.5)$$

$$\boxed{\int \left|\Psi\right|^2 dV = 1} \qquad (3.6)$$

Выражение (3.6) называется ***условием нормировки***.

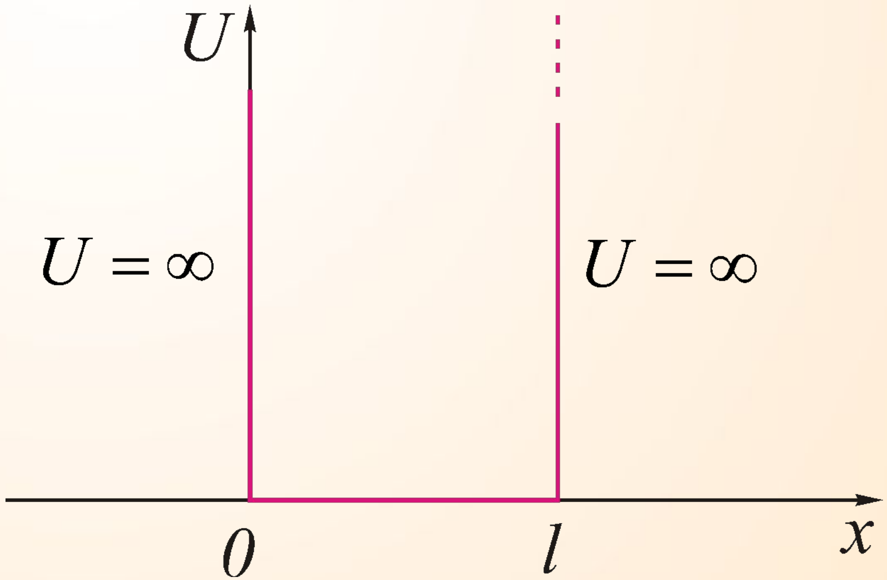
$$\Psi(x, y, z, t) = \psi(x, y, z) \cdot e^{-i\frac{E}{\hbar}t} \qquad (3.7)$$

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + U\psi = E\psi} \qquad (3.8)$$

E_1, E_2, …E_n,… - собственные числа

$\psi_1, \psi_2, \ldots \psi_{n,\ldots}$ - собственные функции

3.4. Микрочастица в «потенциальной яме».



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

$$\psi(0) = \psi(l) = 0$$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}E\cdot\psi = 0 \qquad (3.9)$$

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

$$\psi'' + k^2\psi = 0$$

$$\psi(x) = a \cdot sin(kx + \alpha) \qquad (3.10)$$

$$\psi(0) = a \cdot sin\alpha = 0 \quad \Rightarrow \quad \alpha = 0$$

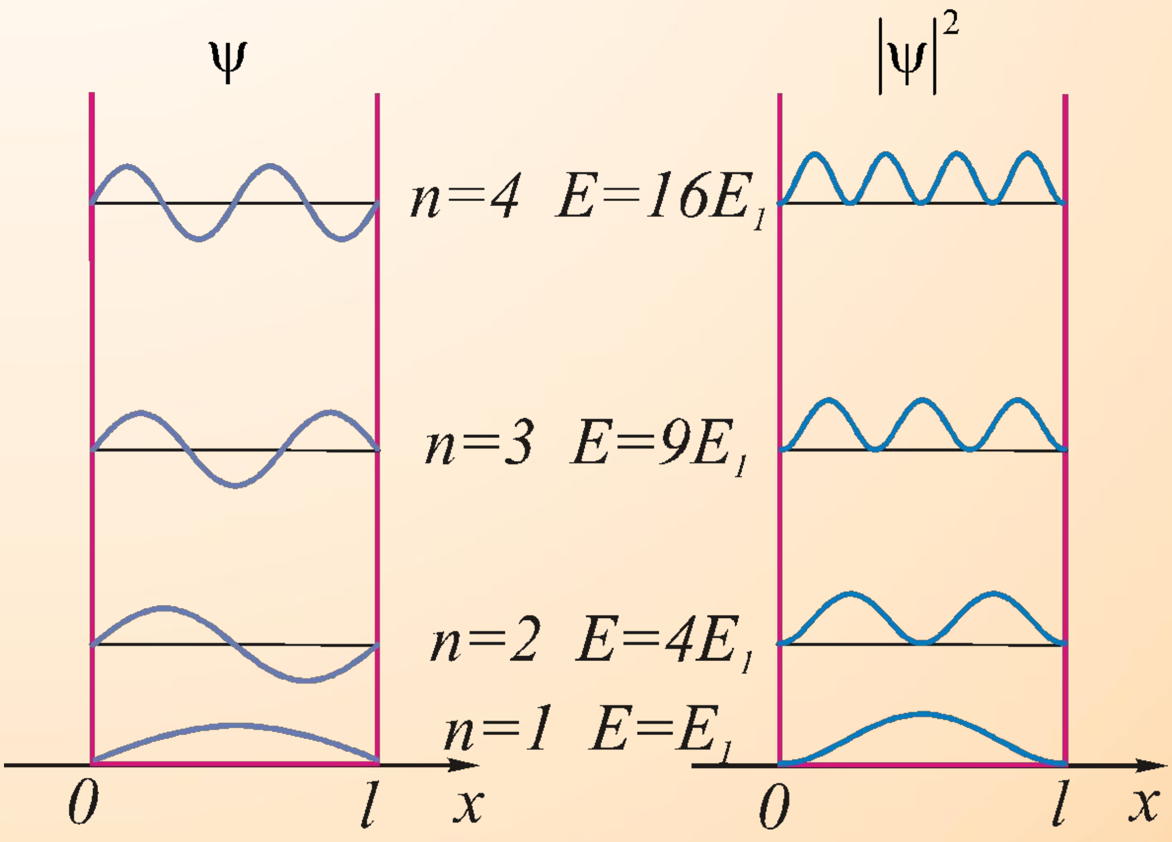
$$\psi(l) = a \cdot sinkl = 0 \quad \Rightarrow \quad kl = \pm\pi n$$

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ml^2} n^2, \quad \text{где} n = 1, 2, 3, \ldots \qquad (3.11)$$

$$\psi(x) = a \cdot sin\left(\frac{\pi n x}{l}\right) \qquad (3.12)$$

$$\int_0^l |\psi|^2 dx = a^2 \int_0^l \sin^2\left(\frac{\pi n x}{l}\right) dx = a^2 \cdot \frac{l}{2} = 1 \qquad a = \sqrt{\frac{2}{l}}$$

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{2}{l}} \sin\left(\frac{\pi n x}{l}\right) \tag{3.13}$$



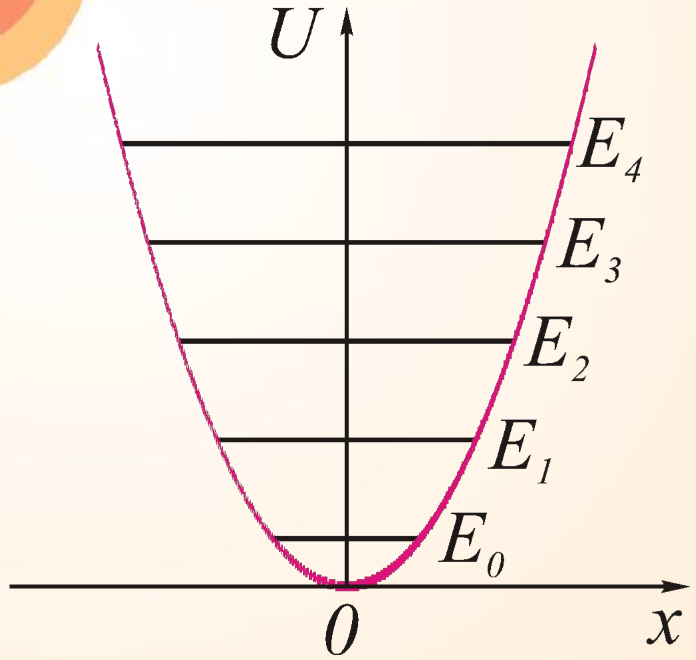
3.5. Гармонический осциллятор.

В классической механике под гармоническим осциллятором понимают частицу, движущуюся под действием квазиупругих сил $F = - kx$.

$$\omega = \sqrt{\frac{k}{m}} \qquad U(x) = \frac{m\omega^2 x^2}{2}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{m\omega^2 x^2}{2}\psi(x) = E\cdot\psi(x) \qquad (3.14)$$

$$\boxed{E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)} \qquad (3.15)$$



Нулевая энергия гармонического осциллятора:

$$E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega \qquad (3.16)$$

$$\Delta E = \hbar\omega \qquad (3.17)$$

Правила отбора:

$$\Delta n = \pm 1 \qquad (3.18)$$