

ВОЛНОВЫЕ СВОЙСТВА МИКРОЧАСТИЦ ВЕЩЕСТВА

Гипотеза де Бройля

Дифракция электронов

Корпускулярно-волновой дуализм
микрочастиц вещества

Гипотеза де Бройля

В оптических явлениях наблюдается своеобразный дуализм.

Наряду с явлениями дифракции, интерференции (волновыми явлениями) наблюдаются и явления, характеризующие корпускулярную природу света (фотоэффект, эффект Комптона).

В 1924 г. **Луи де Бройль** выдвинул гипотезу, что *дуализм не является особенностью только оптических явлений, а имеет универсальный характер. Частицы вещества также обладают волновыми свойствами.*



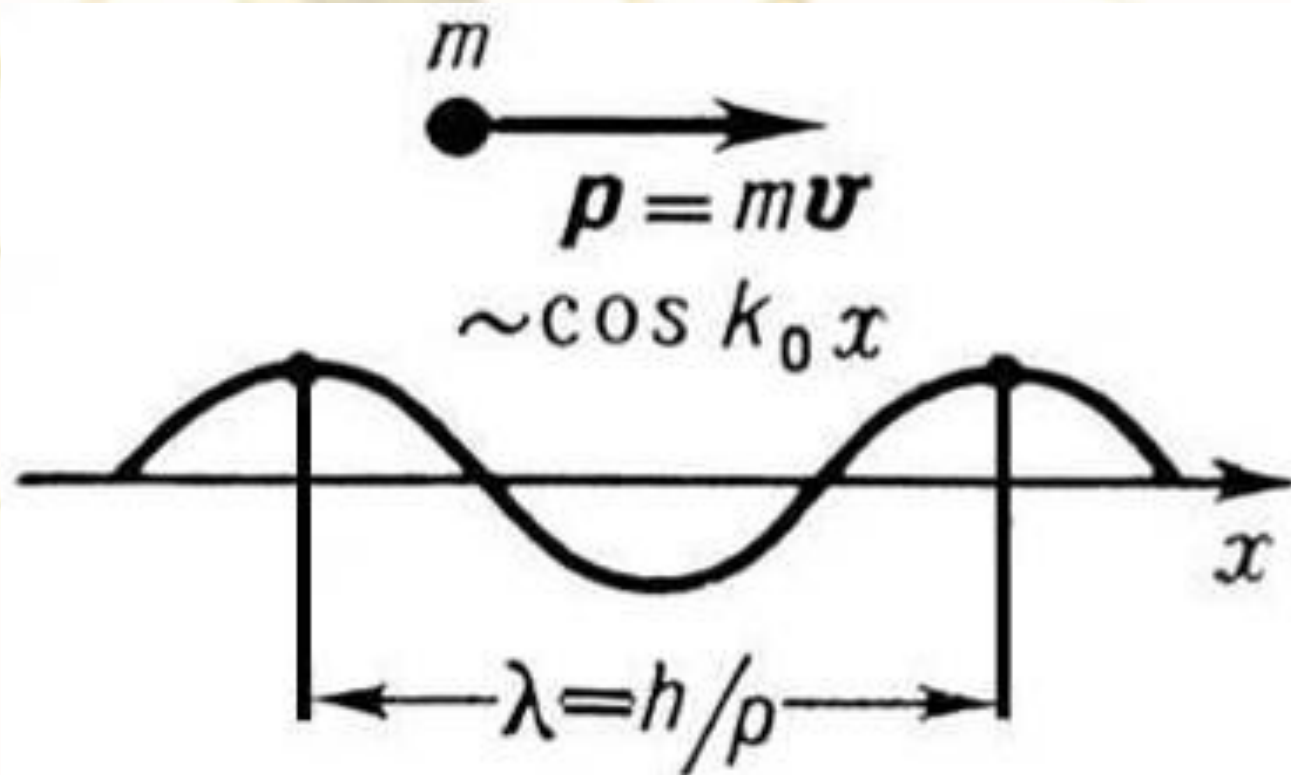
Луи де Бройль (1892 – 1987), французский физик, удостоенный Нобелевской премии 1929 г. по физике за открытие волновой природы электрона. В 1923, распространив идею А.Эйнштейна о двойственной природе

света на вещество, предположил, что поток материальных частиц должен обладать и волновыми свойствами, связанными с их массой и энергией (волны де Бройля). Экспериментальное подтверждение этой идеи было получено в 1927 в опытах по дифракции электронов в кристаллах, а позже она получила практическое применение при разработке магнитных линз для электронного микроскопа. Концепцию де Бройля о корпускулярно-волновом дуализме использовал Э. Шредингер при создании волновой механики.

«В оптике, – писал де Бройль, – в течение столетия слишком *пренебрегали корпускулярным способом рассмотрения по сравнению с волновым*; не делалась ли *в теории вещества обратная ошибка?*»

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

Если фотон обладает энергией $E = h\nu$ и импульсом $p = h/\lambda$, то и частица (например, электрон), движущаяся с некоторой скоростью, обладает волновыми свойствами, т.е. **движение частицы можно рассматривать как движение волны.**





Гипотеза де Бройля была революционной, даже для того революционного в науке времени.

Однако, она вскоре была подтверждена многими экспериментами.

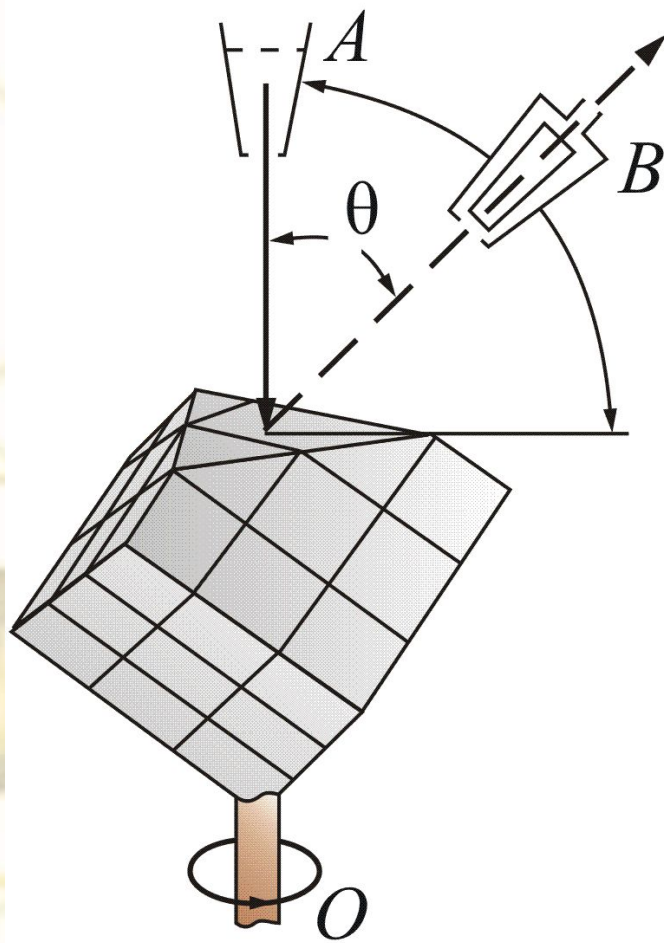
Дифракция частиц

Дифракция частиц - рассеяние микрочастиц (электронов, нейтронов, атомов и т.п.) кристаллами или молекулами жидкостей и газов, при котором из начального пучка частиц данного типа возникают дополнительно отклонённые пучки этих частиц.

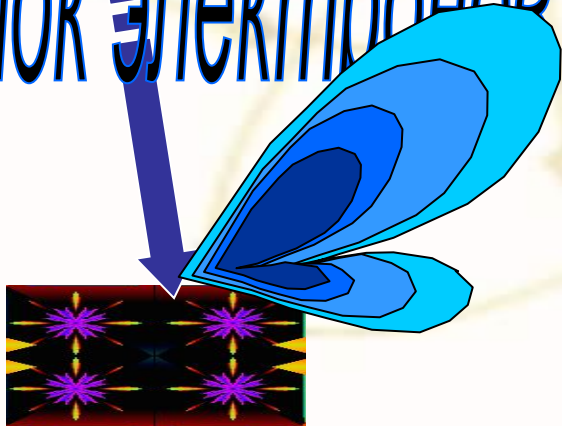
Направление и интенсивность таких отклонённых пучков зависят от строения рассеивающего объекта.

Опыты по дифракции частиц и их квантовомеханическая интерпретация.

Первым опытом по дифракции частиц, блестяще подтвердившим исходную *идею квантовой механики* – *корпускулярно-волновой дуализм*, явился опыт американских физиков К. Дэвиссона и Л. Джермера проведенный в 1927 по дифракции электронов на монокристаллах никеля. Эти опыты показали, что в определенных условиях электроны проявляют волновые свойства.



поток электронов



Ni монокристалл

$$K = eU \rightarrow \lambda = \frac{h}{\sqrt{2m\hat{E}}} \rightarrow \lambda = \frac{12,26}{\sqrt{U}}$$

Здесь U выражено в В, а λ – в Å ($1 \text{ Å} = 10^{-10} \text{ м}$). При напряжениях U порядка 100 В, которые использовались в этих опытах, получаются так называемые «медленные» электроны с λ порядка 1 Å. Эта величина близка к межатомным расстояниям d в кристаллах, которые составляют несколько Å и менее, и **соотношение $\lambda \leq d$, необходимое для возникновения дифракции, выполняется.**

В опыте Дэвиссона и Джермера при «отражении» электронов от поверхности кристалла никеля при определённых углах отражения возникали максимумы.

$$2d \sin \theta = n\lambda$$

Волновые свойства частиц – электронов – были доказаны экспериментом.

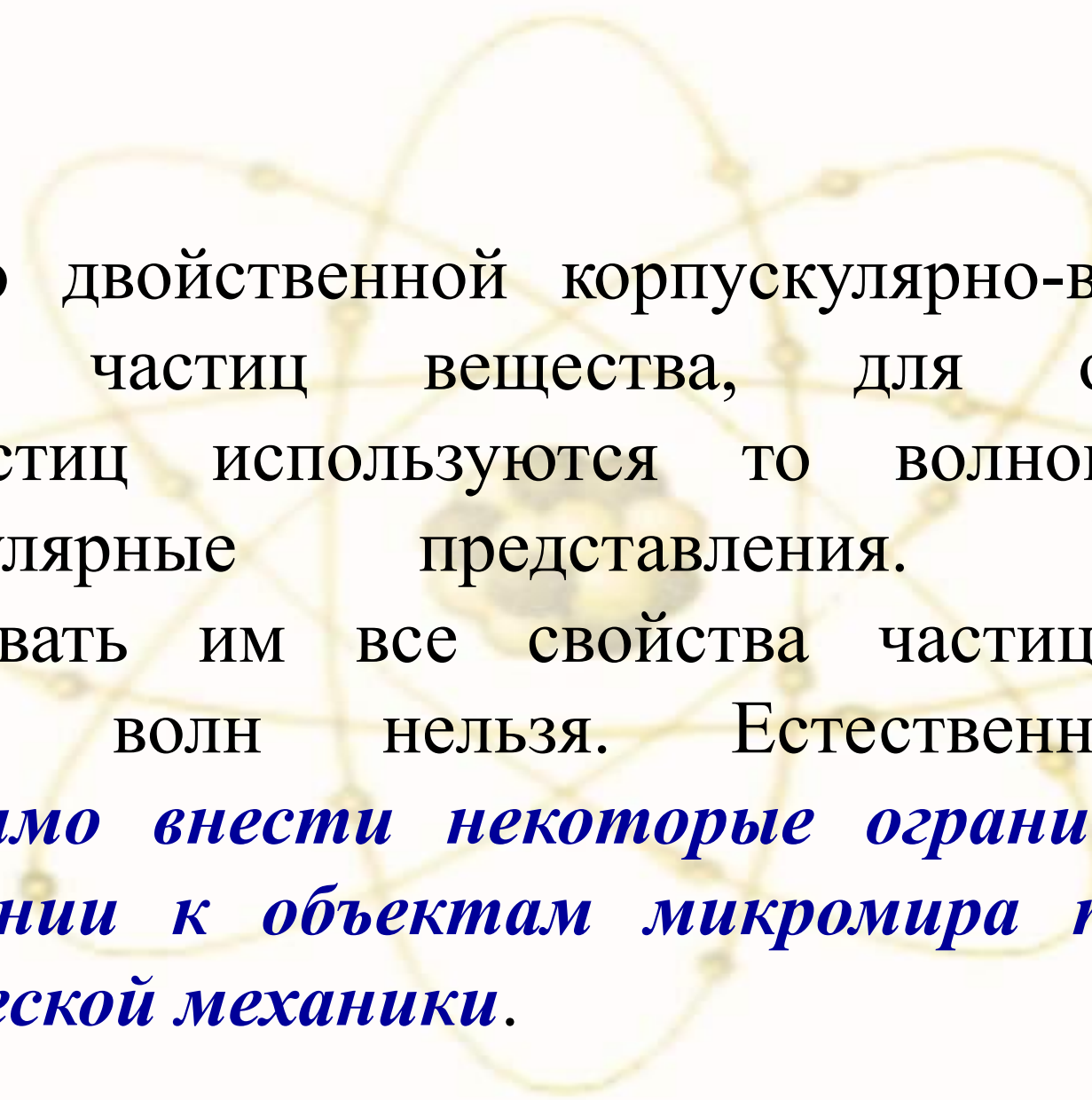
Идея де Бройля о наличии у частиц вещества волновых свойств получила экспериментальное подтверждение, как для заряженных частиц (электронов), так и для нейтральных – нейтронов, атомов и молекул. Также было показано, что *обнаружить волновые свойства у макроскопических тел не представляется возможным из-за присущей им малой длины волны.*

Физический смысл волн де Бройля

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*.

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.



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.*

Соотношение неопределенности Гейзенберга

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.

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

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

h – постоянная Планка.

Аналогичное соотношение 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:

$$\Delta A \Delta B \geq \hbar$$

соотношение неопределенности Гейзенберга для величин A и B .

Это соотношение открыл **в 1927 году Вернер Гейзенберг.**



Соотношение неопределенностей Гейзенберга

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



Энергия и время являются канонически сопряженными величинами. Поэтому для них *также справедливо соотношение неопределенностей*

$$\Delta E \Delta t \geq h$$

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

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

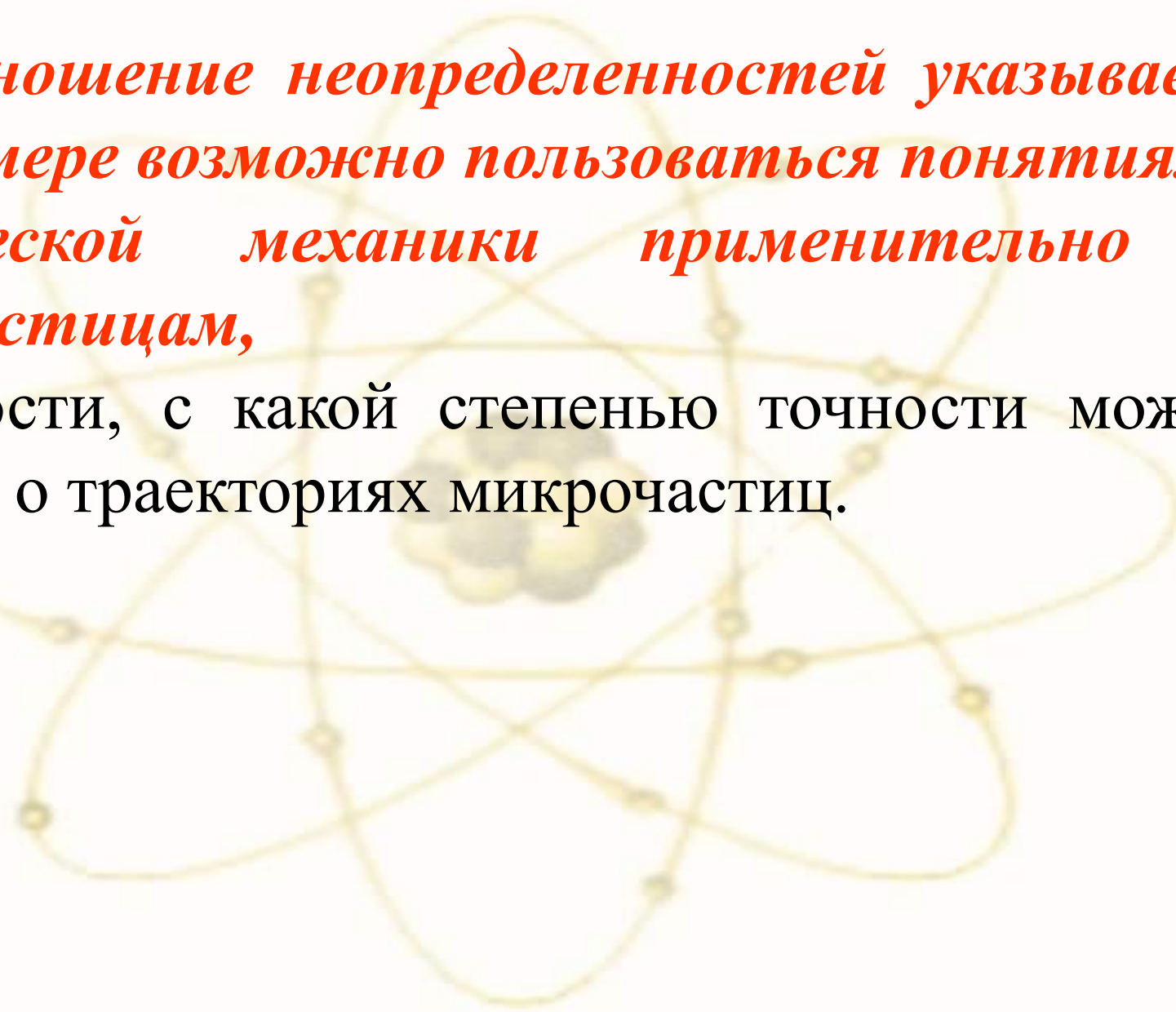
Соотношение неопределенностей получено при одновременном использовании классических характеристик движения частицы (координаты, импульса) и наличии у нее волновых свойств.

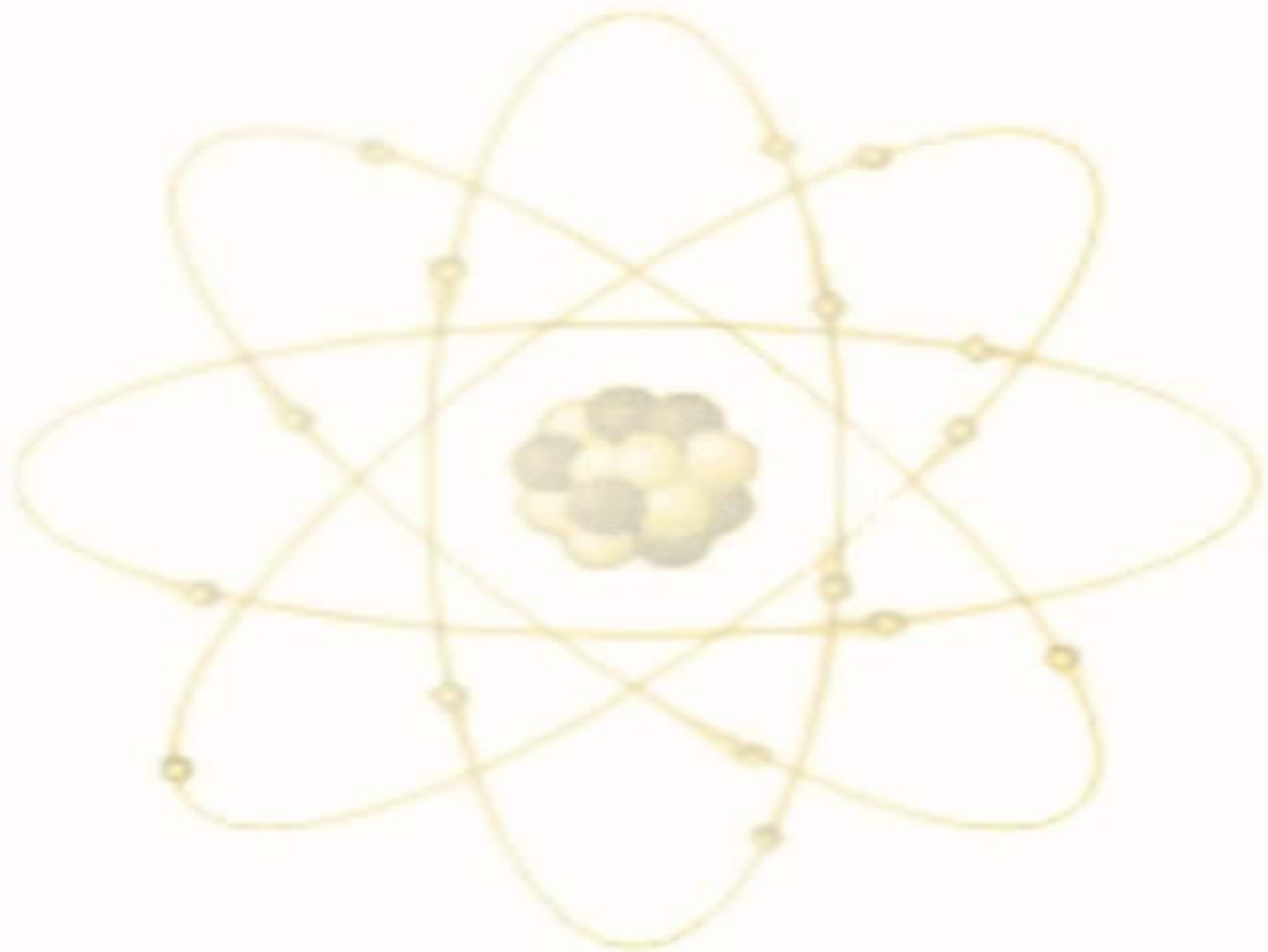
Т.к. в классической механике принимается, что измерение координаты и импульса может быть произведено с любой точностью, то

соотношение неопределенностей является 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.





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:

$$W \sim |\Psi(x, y, z, t)|^2, \quad (5)$$

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 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 dW 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 ?

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

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

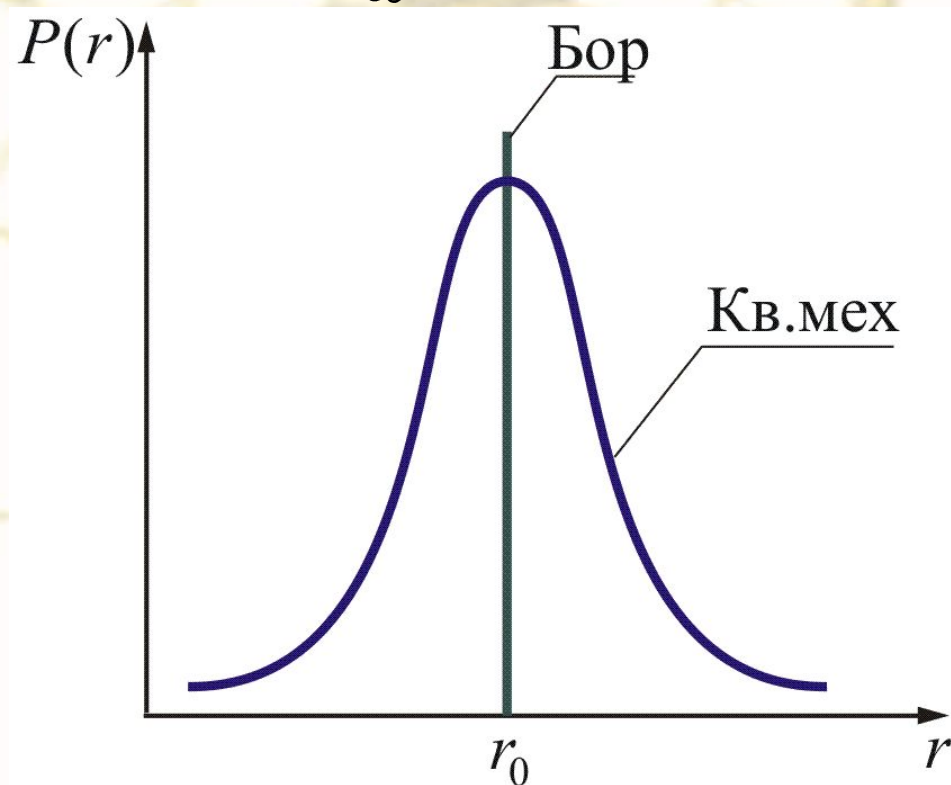
где C_n ($n = 1, 2, 3, \dots$) – произвольные, комплексные числа.

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

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



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:

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

где $\hbar = \frac{h}{2\pi}$, m – масса частицы,

∇ – 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^2 – мнимая единица,

$U(x, y, z, t)$ – потенциальная энергия частицы в силовом поле, в котором она движется,

Ψ – искомая волновая функция.

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

$$\nabla^2 \Psi + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U) \Psi = 0 \quad (10)$$

Здесь обозначено:

E - полная энергия электрона

U - потенциальная энергия

Ψ - волновая функция электрона

$$\Psi = \Psi(x, y, z)$$

Уравнение Шредингера можно записать в виде

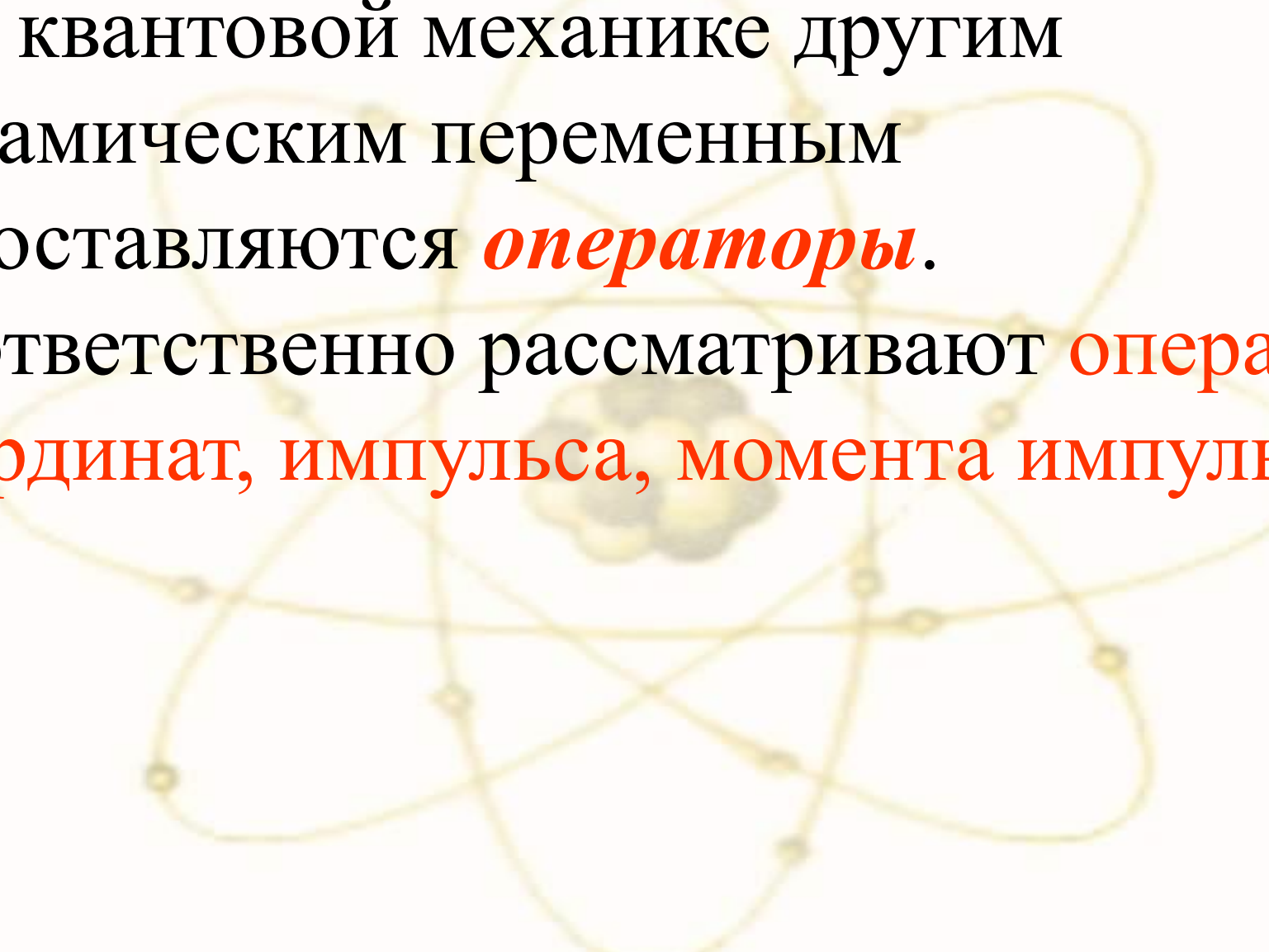
$$\hat{H} \Psi = E \Psi$$

В этом уравнении

\hat{H} – оператор Гамильтона, равный сумме операторов

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

Гамильтониан является оператором энергии E .



В квантовой механике 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)

Спасибо за внимание

