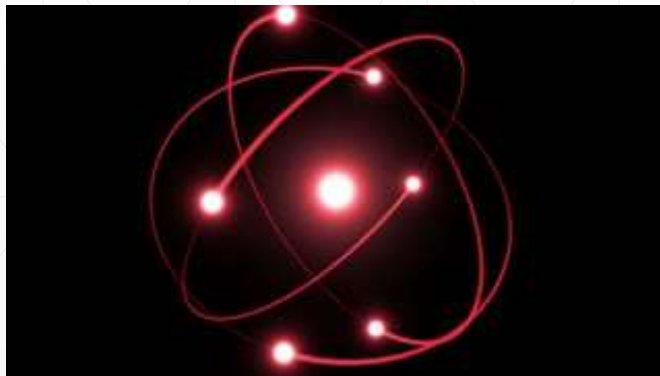




18. Fizyka kwantowa - I

18.1. Wprowadzenie do mechaniki kwantowej:

- pojęcie mechaniki kwantowej
- funkcja falowa i jej interpretacja
- paczka falowa
- zasada nieoznaczoności Heisenberga
- równanie Schrödingera



Mechanika kwantowa

- Wiele eksperymentów przeprowadzonych na początku XX wieku ujawniło, że prawa rządzące ruchem atomów i elektronów znacznie różnią się od praw mechaniki klasycznej do której jesteśmy przyzwyczajeni.
- Powstała nowa gałąź fizyki – **mechanika kwantowa**, opisująca mechanikę zjawisk mikroświata, charakteryzująca się spójnością i elegancją.
- Początkiem nowej teorii – **mechaniki kwantowej** stało się wprowadzenie do fizyki pojęcia **kwantu** i przyjęcie **dualizmu korpuskularno-falowego**:
- z jednej strony ruch cząstek masywnych w układach mikroskopowych odbywa się zgodnie z zasadami charakteryzującymi **ruch falowy**,
- z drugiej strony fale elektromagnetyczne opisywane są jak porcje energii – **fotony** obdarzone pędem.
- Zatem potrzebny był opis zachowania się elektronu i fotonu ujmujący wszystkie cechy materii i promieniowania

Mechanika kwantowa to dział mechaniki zajmujący się ruchem mikrocząstek, których stan opisany jest funkcją falową będącą rozwiązaniem równania Schrödingera

Funkcja falowa

Dotychczas przypisywaliśmy cząstkom własności falowe podając długość fali materii de Broglie'a stowarzyszonej z daną cząstką. Jednak do pełniejszego opisu własności falowych posługujemy się funkcją reprezentującą falę de Broglie'a, tak zwaną *funkcją falową* Ψ .

Każdej cząstce materialnej przypisuje się zespoloną funkcję falową $\Psi(x,y,z,t)$ będącą funkcją współrzędnych i czasu.

Znajdując rozkład natężenia w obrazie dyfrakcyjnym można określić prawdopodobieństwo, że elektron padnie w określonym miejscu ekranu

Kwadrat amplitudy funkcji falowej jest proporcjonalny do gęstości prawdopodobieństwa P znalezienia elektronu w danym elemencie obszaru

$$P \sim |\Psi|^2 = \Psi \cdot \Psi^*$$

Właściwości funkcji falowej

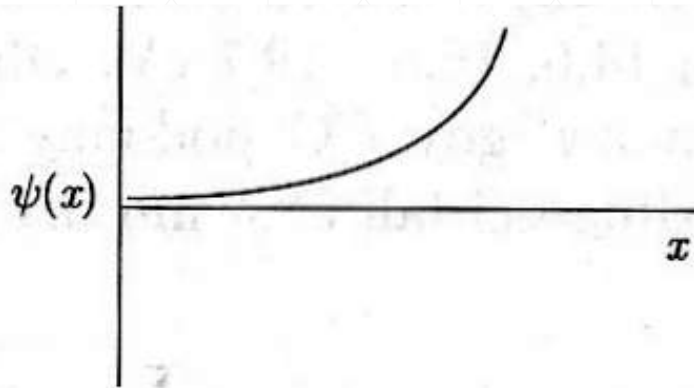
- Prawdopodobieństwo znalezienia się elektronu w objętości $dV=dx dy dz$ wynosi

$$P dV = |\Psi|^2 dx dy dz \quad \text{gdzie} \quad |\Psi|^2 = \Psi \cdot \Psi^*$$

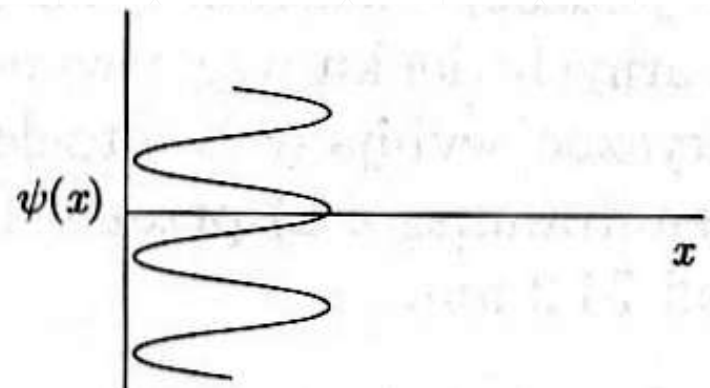
- warunek unormowania funkcji falowej tzn. prawdopodobieństwo całkowite = 1 $\int_V |\Psi|^2 dV = 1$
- funkcja falowa jest jednoznaczna, ciągła wraz z pierwszą pochodną i powinna być ograniczona $|\Psi| < \infty$
- zasada superpozycji $\Psi = \Psi_1 + \Psi_2$
- funkcja falowa Ψ nie stanowi bezpośrednio obserwowanej wielkości. Fale klasyczne i fale odpowiadające cząstkom podlegają równaniom matematycznym tego samego typu. Lecz w przypadku klasycznym amplituda fali jest bezpośrednio obserwowana, a dla funkcji falowej Ψ nie jest obserwowana.

Właściwości funkcji falowej

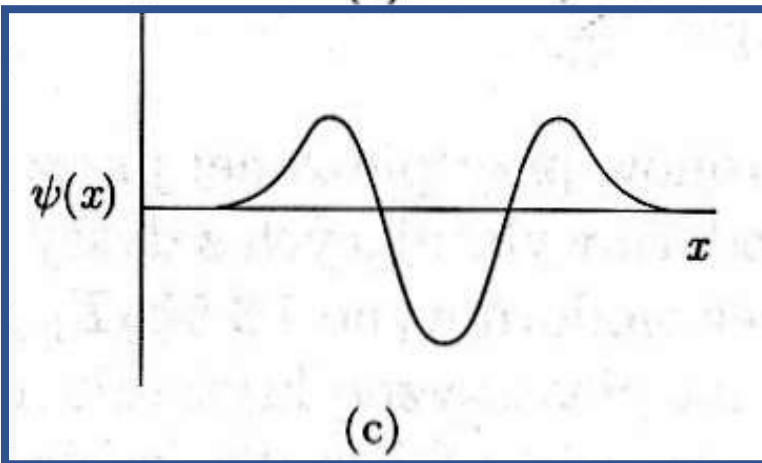
która z niżej przedstawionych funkcji spełnia właściwości funkcji falowej ?



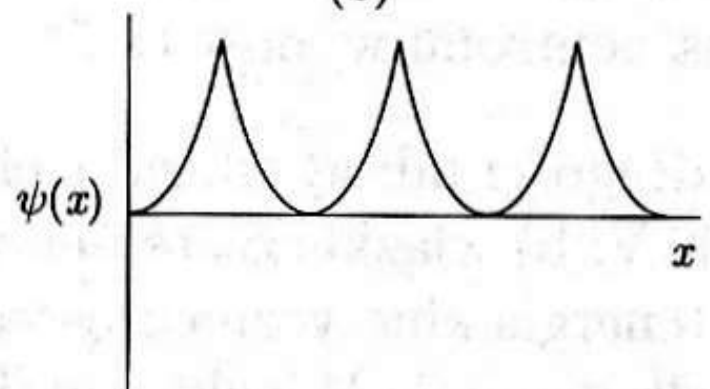
(a)



(b)



(c)



(d)

Postać funkcji falowej

$$\hbar = \frac{h}{2\pi}$$

Z hipotezy de Broglie'a: $p_o = h/\lambda_o$ $p_o = \frac{h}{2\pi} \frac{2\pi}{\lambda_o} = \frac{h}{2\pi} k_o$ $p_o = \hbar k_o$

Funkcja falowa cząstki o pędzie p_o poruszającej się wzdłuż osi x , odpowiada równaniu fali o długości λ_o i wektorze falowym k_o

$$\Psi = A \cos(k_o x - \omega t)$$

$$|\Psi|^2 = A^2 \cos^2(k_o x - \omega t)$$

Rzeczywista postać funkcji falowej jest niewłaściwa bo istniałyby punkty, gdzie nie można cząstki zaobserwować. Lepsza jest postać zespolona.

$$\Psi = A e^{i(k_o x - \omega t)}$$

$$|\Psi|^2 = \Psi^* \Psi = (A e^{-i(k_o x - \omega t)}) (A e^{i(k_o x - \omega t)}) = A^2$$

Pokazaliśmy, że jeżeli pęd cząstki posiada określoną wartość, to cząstkę można znaleźć z jednakowym prawdopodobieństwem w dowolnym punkcie przestrzeni. Inaczej mówiąc, jeżeli pęd cząstki jest dokładnie znany, to nic nie wiemy o jej miejscu położenia.

Równanie Schrödingera

W sytuacjach stacjonarnych, gdy potencjał nie zmienia się w czasie, zmienne przestrzenne i czas można odseparować i zapisać funkcję falową w postaci:

$$\Psi(x, y, z, t) = \Psi(x, y, z)e^{-i\omega t}$$

Postać **przestrzennej** funkcji falowej, dla przypadku jednowymiarowego, wyznaczamy z **równania Schrödingera**:

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} = -\frac{2m}{\hbar^2} [E - U(x)]\Psi$$

stacjonarne, jednowymiarowe
równanie Schrödingera

gdzie: m – masa cząstki, E – całkowita energia mechaniczna cząstki,
 $U(x)$ – energia potencjalna w danym obszarze

równania Newtona – fale dźwiękowe i fale w strunach
równania Maxwella – fale świetlne
równanie Schrödingera – fale materii (funkcja falowa)



Erwin Schrödinger

Równanie Schrödingera dla cząstki swobodnej

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} = -\frac{2m}{\hbar^2} [E - U(x)]\Psi$$

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

oznaczając $k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} E}$ tylko kinetyczna $E = \frac{p^2}{2m}$

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} = -k^2\Psi$$

którego rozwiązaniem jest

$$\Psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$$

przyjmując $B=0$ (cząstka porusza się w kierunku dodatnich x)

$$\Psi(x, t) = \Psi(x)e^{-i\omega t} = Ae^{i(kx - \omega t)}$$

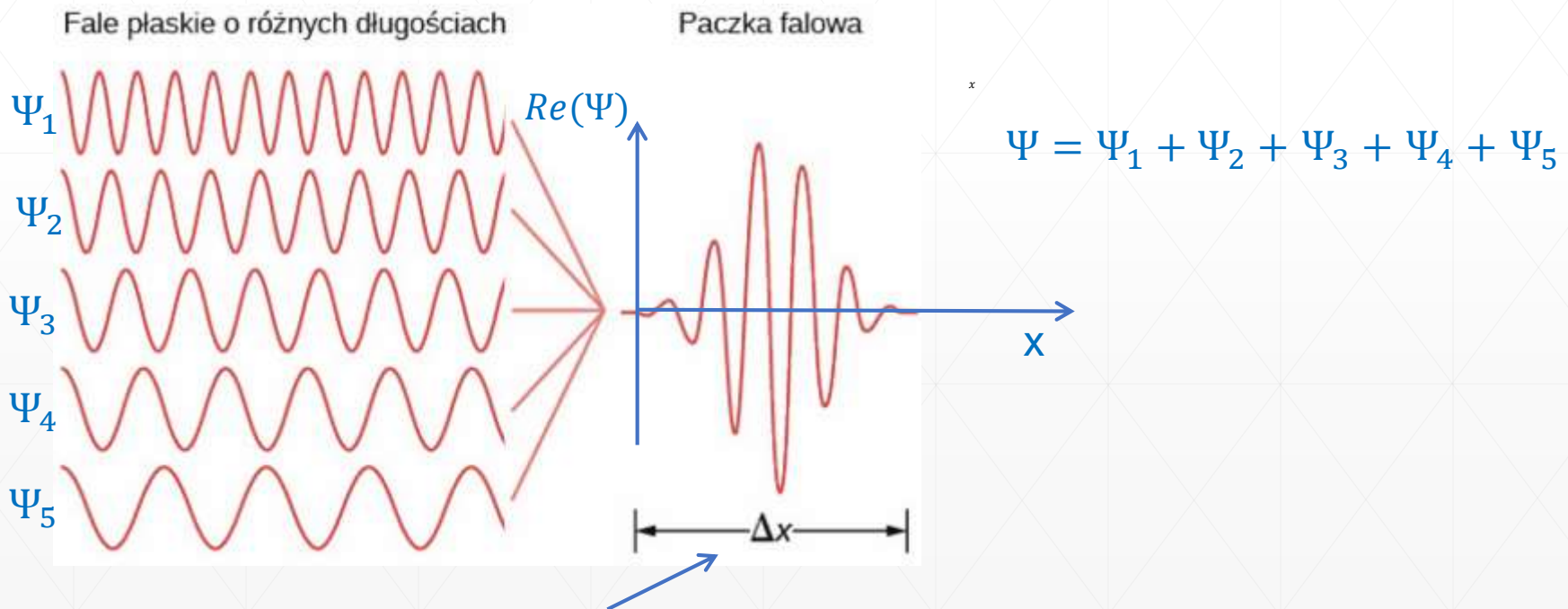
$$k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} E} = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} \frac{p^2}{2m}} = \frac{p}{\hbar}$$

$$\lambda = \frac{2\pi}{k} = \frac{2\pi}{p} \hbar = \frac{h}{p}$$

funkcją falową cząstki swobodnej jest fala płaska o długości λ określonej zależnością de Broglie'a

Paczka falowa

Jeżeli jednak chcemy cząstkę zlokalizować w określonym obszarze w przestrzeni np. w przedziale o szerokości Δx , powinniśmy interpretować ją jako **paczkę falową**. Z matematycznego i fizycznego punktu widzenia można paczkę falową traktować jako zaburzenie typu falowego utworzone wskutek interferencji nakładających się fal (funkcji falowych). **Szerokość paczki falowej zależy od szerokości widma fal składowych** – im więcej fal o różnych częstotliwościach (długościach, wektorach falowych) ulegnie interferencji, tym węższą paczkę falową one utworzą.



Szerokość paczki falowej Δx zależy od szerokości widma $\Delta \lambda$ fal składowych.

Superpozycja fal monochromatycznych

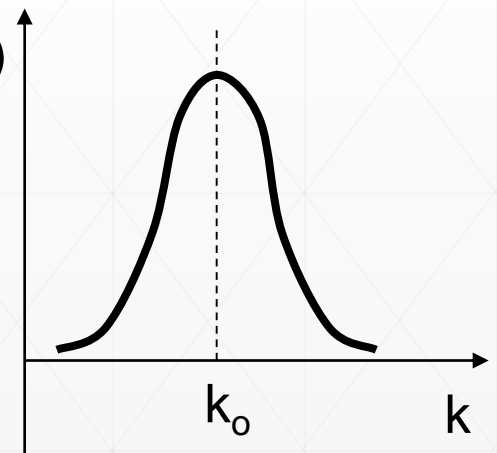
Rzeczywista paczka falowa powstaje w wyniku superpozycji nieskończenie wielu fal o różnych długościach (wektorach falowych), którym odpowiadają różne wartości pędu $p = \hbar k$. Stąd sumowanie zastępujemy całkowaniem.

$$\Psi = \exp\left(-\frac{x^2}{4\sigma_x^2}\right) \exp(ik_0 x) = \int_{-\infty}^{\infty} B(k) \exp(ikx) dk$$

← współczynniki Fouriera

Amplitudy tych fal $B(k)$, zwane współczynnikami Fouriera, posiadają również postać funkcji Gaussa wokół wartości k_0 odpowiadającej pędowi elektronu p_0 .

Pomiędzy funkcją falową $\Psi(x)$, a współczynnikami Fouriera $B(k)$ istnieje ścisły związek



Prędkość grupowa paczki

Klasycznie:

$$v_g = \frac{d\omega}{dk}$$

$$\left. \begin{array}{l} \hbar k = p \\ \hbar\omega = E \end{array} \right\} E = \frac{p^2}{2m} \quad \hbar\omega = \frac{(\hbar k)^2}{2m}$$

$$\frac{d\omega}{dk} = \frac{\hbar k}{m}$$

$$v_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{\hbar k}{m} = \frac{p}{m} = v$$

$$v_g = v$$

Paczka falowa przemieszcza się z prędkością równą prędkości cząstki

W przypadku dużych prędkości rozważania relatywistyczne dają ten sam wynik:

$$E^2 = E_0^2 + p^2 c^2$$

różniczkując obie strony równania

$$2E dE = 2pc^2 dp$$

$$v_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{dE}{dp} = c^2 \frac{p}{E} = c^2 \frac{mv}{mc^2} = v$$

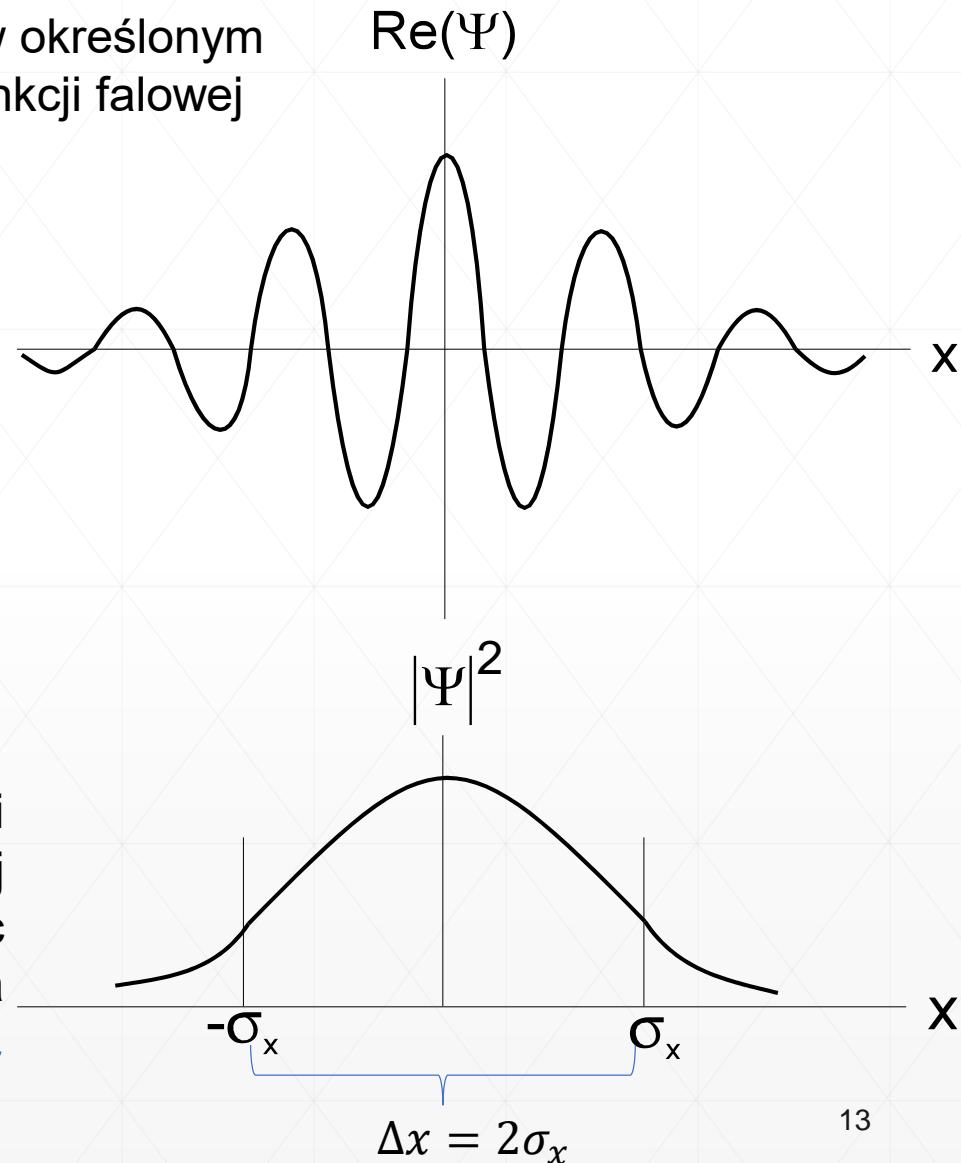
Paczki falowe materii

Dla cząstki znajdującej się w chwili $t=0$ w określonym obszarze przestrzeni kwadrat modułu funkcji falowej przyjmuje postać funkcji Gaussa

$$\Psi(x, 0) = A \exp\left(-\frac{x^2}{4\sigma_x^2}\right) \exp(ik_0 x)$$

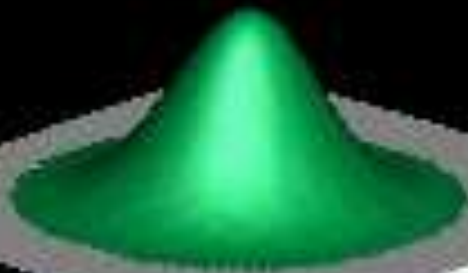
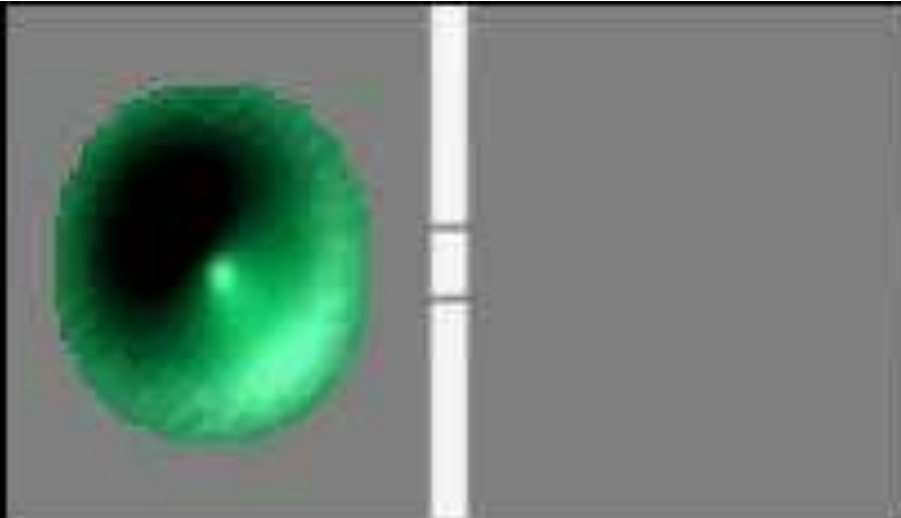
$$|\Psi|^2 = A^2 \exp\left(-\frac{x^2}{2\sigma_x^2}\right)$$

Nieoznaczoność położenia cząstki oznacza, że położenie cząstki opisanej daną paczką falowa będziemy określać rozkładem gęstości prawdopodobieństwa czyli odchyleniem standardowym σ_x otrzymanej funkcji Gaussa.



Fale prawdopodobieństwa

Powróćmy do dyfrakcji elektronu na dwóch szczelin.



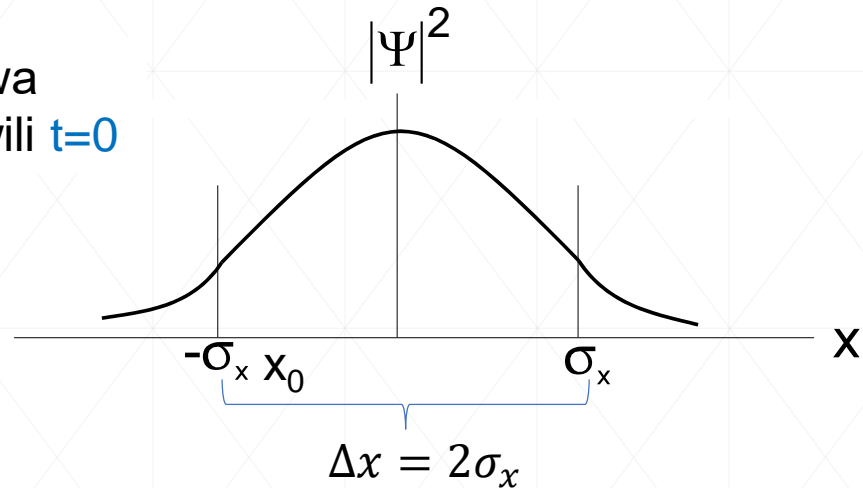
Elektron jako
tzw. paczka
falowa
przechodzi
jednocześnie
przez dwie
szczeliny
i interferuje
ze sobą.

Paczka falowa

i Zasada Nieoznaczoności Heisenberga

Rozkład gęstości prawdopodobieństwa dla cząstki danej paczą falową w chwili $t=0$

$$|\Psi(x, 0)|^2 = A^2 e^{-\frac{x^2}{2\sigma_x^2}}$$



Znalezienie cząstki w punkcie x jest zdarzeniem losowym obarczonym niepewnością Δx . Jeżeli z cząstką związana jest fala o długości λ , to niepewność określenia położenia cząstki jest rzędu połowy długości tej fali: $\Delta x \sim \lambda/2$.

Wówczas: $\Delta x = \frac{\lambda}{2} = \left\{ \lambda = \frac{h}{p} \right\} = \frac{h}{2p}$, gdzie $p = mv$ jest pędem cząstki.

Zakładając, że nieokreśloność pędu jest tego samego rzędu co pęd, mamy $\Delta p = p = mv$.

Stąd $\Delta x \cdot \Delta p = \frac{h}{2}$ lub ściślej, w realnym scenariuszu: $\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{h}{2}$

Szczegółową analizę tego problemu przeprowadził **W. Heisenberg** w 1927r. wskazując, że rzeczywiste ograniczenie niepewności pomiaru pędu i położenia jest nieco mniejsze.

Zasada Nieoznaczoności Heisenberga

Analizę tego problemu przeprowadzona przez **W. Heisenberga** prowadzi do wniosku, że rzeczywiste ograniczenie niepewności jednoczesnego pomiaru pędu i położenia cząstki obowiązuje w postaci: $\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{h}{4\pi}$ czyli

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

To ograniczenie obowiązuje także dla innych par wielkości fizycznych. Przy określaniu energii cząstki E podczas pomiaru trwającego Δt mamy:

$$\Delta E \cdot \Delta t \geq \frac{\hbar}{2},$$

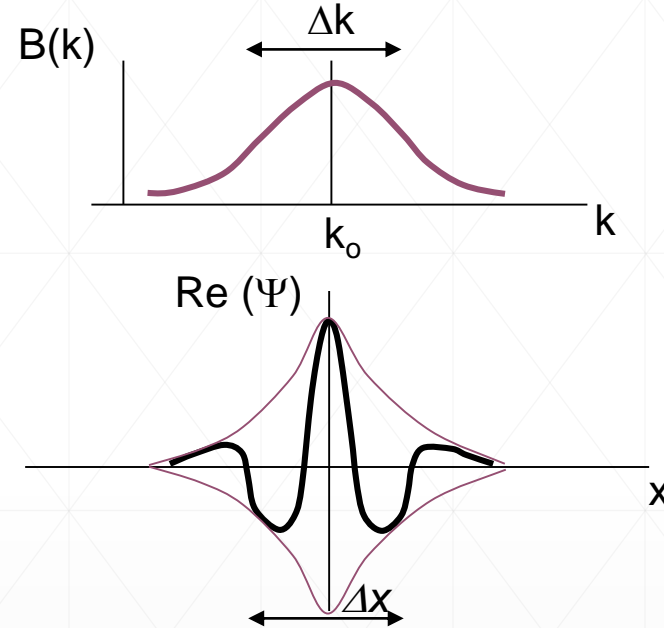
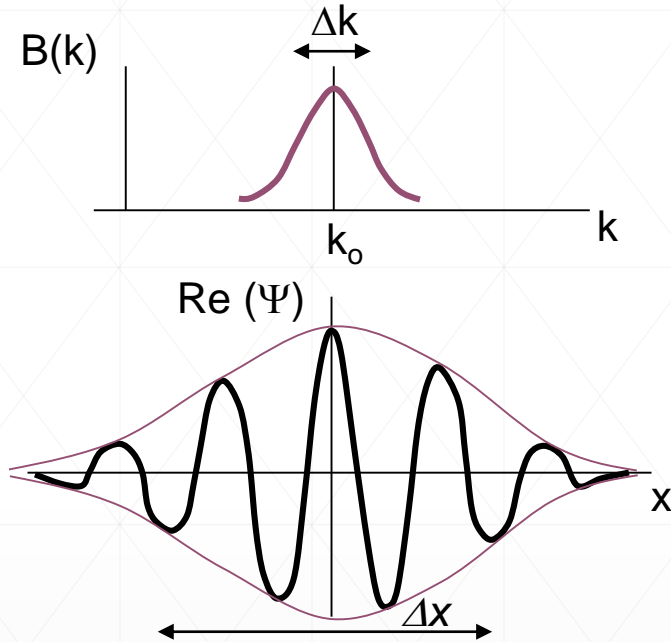
gdzie ΔE jest niepewnością pomiaru energii cząstki.



Werner Heisenberg
Nagroda Nobla w 1932

Zasada nieoznaczoności nie odnosi się bezpośrednio do dokładności urządzeń, za pomocą których dokonujemy pomiarów. Nawet w przypadku mierników idealnych zasada nieoznaczoności funkcjonuje bez zmian, ponieważ ma ona swoje źródło w falowej naturze materii, reprezentowanej przez mechanikę kwantową.

Zasada nieoznaczoności



czym szerszy zakres k odpowiadający większemu rozrzutowi Δp_x , tym paczka falowa jest przestrzennie węższa (mniejsze Δx)

$$\Delta x \sim \frac{1}{\Delta k}$$

$$\Delta p = \hbar \Delta k$$



$$\Delta x \sim \frac{\hbar}{\Delta p}$$

niemożliwe jest jednoczesne dokładne określenie wartości współrzędnej i pędu cząstki

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \approx \hbar$$

gdy $\Delta p = 0$,
to $\Delta x = \infty$
cząstka jest
swobodna ¹⁷

Znaczenie zasady nieoznaczoności Heisenberga

szerokość paczki falowej	$\Delta x = 1/\Delta k$	$p = \hbar k$ →	$\Delta x \cdot \Delta p \approx \hbar$	$\Delta S \approx \hbar$
	$\Delta t = 1/\Delta \omega$	$E = \hbar \omega$ →	$\Delta E \cdot \Delta t \approx \hbar$	

Działanie S można określić z dokładnością stałej Plancka \hbar

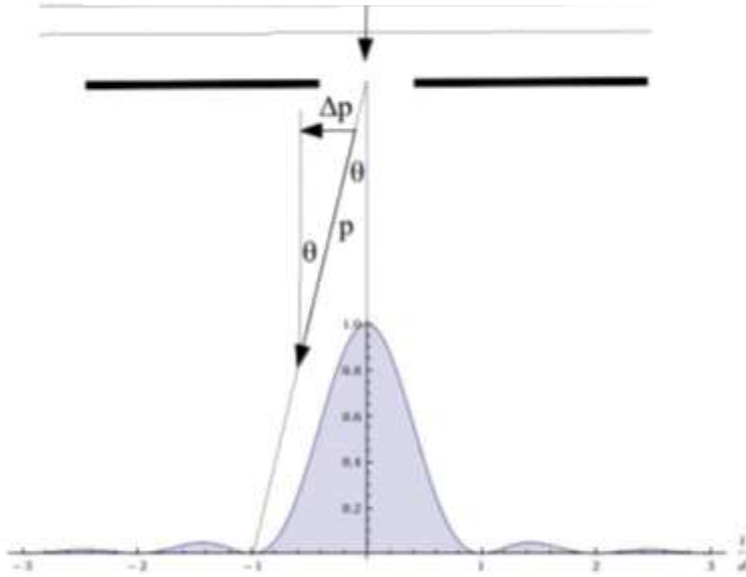
Zasada nieoznaczoności określa granice możliwości naszych pomiarów.

Jest jednym z fundamentalnych twierdzeń mechaniki kwantowej:

- wyjaśnia dyfrakcję na szczelinie
- energie cząstek są zawsze większe od zera
- elektron nie spada na jądro atomowe

Zasada Nieoznaczoności Heisenberga - przykład zastosowania

Strumień elektronów ulega dyfrakcji na szczelinie o szerokości Δx .



Przejście przez szczelinę o szerokości Δx możemy potraktować jak pomiar współrzędnej: znamy położenie elektronu z dokładnością do szerokości szczeliny $\Delta x = d$. Nie możemy jednak określić dokładnie pędu elektronu w kierunku poziomym. Pęd w kierunku poziomym jest statystycznie rozmyty, a wielkość tego rozmycia wynosi:

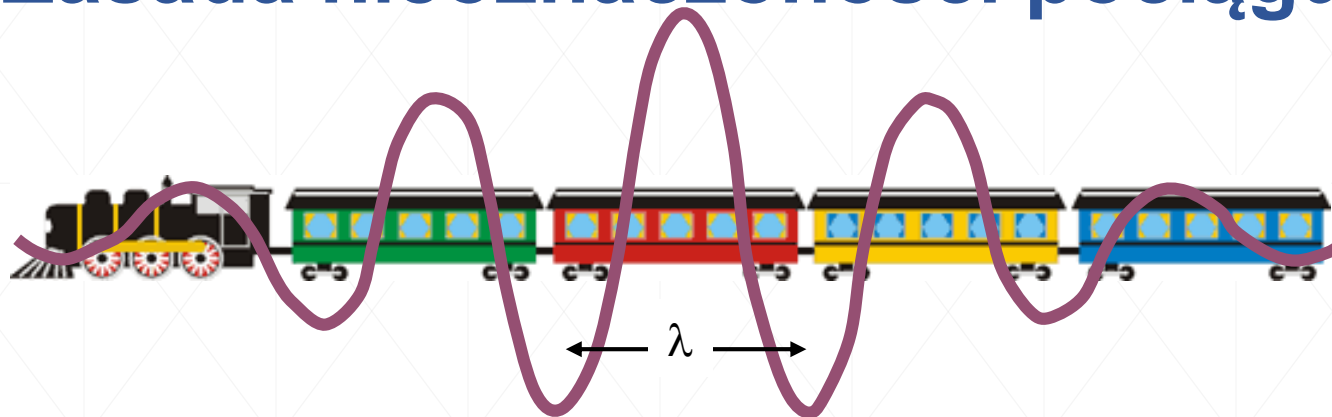
$$\Delta p = p \cdot \sin \theta = p \frac{\lambda}{d}$$

Mnożąc nieoznaczoność poziomej współrzędnej przez nieoznaczoność poziomego pędu, otrzymujemy:

$$\Delta x \cdot \Delta p = \frac{\lambda}{2} p = \frac{h}{2}$$

Pokazaliśmy, że dyfrakcja elektronów na szczelinie jest konsekwencją zasady nieoznaczoności Heisenberga. Jeśli dokładniej chcemy znać wartość współrzędnej, to musimy za to zapłacić większym rozmyciem pędu, czyli im mniejsza szczelina tym większe ugięcie wiązki elektronów – szerszy prążek dyfrakcyjny.

Zasada nieoznaczoności pociągu



chcemy zmierzyć prędkość pociągu wiedząc, że każdy wagon ma długość λ
minęło nas n wagonów w ciągu czasu t
pokonana przez pociąg droga wynosi

$$l = n\lambda \quad \Delta l = \lambda/2$$

średnia prędkość
pociągu wynosi

$$v = \frac{l}{t} = \frac{n\lambda}{t}$$

$$\Delta v = \frac{\Delta l}{t} = \frac{\lambda}{2t} = \frac{v}{2n}$$

im większy przedział czasu tym pomiar prędkości dokładniejszy, ale maleje dokładność
położenia pociągu w chwili pomiaru

$$\Delta x = l/2 = n\lambda/2 \quad \Delta x \cdot \Delta v = \frac{v\lambda}{4} \quad \Delta x \cdot \Delta p = \frac{p\lambda}{4}$$

w mechanice kwantowej pociąg to paczka falowa o długości fali λ rozciągająca się na
obszar $l = n\lambda$

$$\lambda = \frac{h}{p}$$



$$\Delta x \cdot \Delta p = \frac{h}{4} \approx \hbar$$

Równanie Schrödingera

W naszych rozważaniach ograniczyliśmy się do przypadku stacjonarnego, jednowymiarowego równania Schrödingera. W ogólności jeżeli potencjał $U=U(x,y,z,t)$ zależy od czasu równanie to dla trzech wymiarów przyjmuje postać

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi + U\Psi$$

Operator energii całkowitej

Operator energii kinetycznej

Operator energii potencjalnej

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \equiv -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2$$

U

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = E\Psi$$

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

Operator Hamiltona – „hamiltonian”

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

najprostszy zapis równania Schrödingera

Dzięki wykorzystaniu zapisu operatorowego uzyskuje się klarowną formułę₂₁ zawierającą w sobie skomplikowane funkcje matematyczne.

