

ВСТУП

ФІЗИЧНІ ОСНОВИ КВАНТОВОЇ МЕХАНІКИ

Квантова механіка виникла в 20-і роки 20-го століття. Це теорія атомних явищ. Квантова механіка вивчає поведінку мікрочастинок (електронів, протонів, нейтронів, атомів і молекул).

Мікроскопічні явища $\sim 10^{-10}$ м = 1 Ангстрем (приблизно таку довжину хвилі мають x-гаус (рентгенівські промені), γ -кванти).

Макроскопічні явища від $\sim 10^{-6}$ м = 1мкм (те, що можна побачити в оптичний мікроскоп).

В останні десятиліття виникла фізика мезоскопічних явищ, яка вивчає об'єкти розмірам від 10 до 100 нанометрів (10^{-8} – 10^{-7} м). Цей розділ фізики бурхливо розвивається завдяки сучасним технологіям, які створюють нанооб'єкти. Квантова механіка успішно застосовується для опису властивостей наноструктур.

Ньютонова механіка (1685) встановила закони механічного руху макроскопічних тел.

Хвильові властивості електромагнітного випромінювання, дифракція та інтерференція: Юнг (1803) світло, фон Лауе (1912) рентгенівські промені.

Теорія електромагнітного поля Максвелла (1857) встановила закони електромагнітного поля. Були відкриті електромагнітні хвилі й установлено, що видиме світло – це електромагнітні хвилі певного діапазону (4000-8000Å)

В 1905 з'явилася релятивістська механіка – механіка об'єктів, що швидко рухаються (Лоренц, Пуанкаре, Ейнштейн). Відкритий в 1897 електрон при русі в електромагнітному полі підкорявся законам цієї нової механіки.

Хвилі та речовина фізикою вивчалися окремо!

До початку 20-го століття на обрії класичної фізики було 2 хмаринки: негативний результат досліду Майкельсона по вимірюванню швидкості світла та ультрафіолетова (УФ) катастрофа – нескінченна енергія випромінювання абсолютно чорного тіла.

ЕЛЕКТРОМАГНІТНІ КВАНТИ

Теплове випромінювання абсолютно чорного тіла, Макс Планк (14.12.1900) Доповідь у німецькому фізичному товаристві: «До теорії закону розподілу енергії в нормальному спектрі». **Поглинання й випромінювання енергії світла відбувається порціями, квантами.**

Формула Планка (1900) для спектральної щільності теплового випромінювання й закон Стефана – Больцмана для повної щільності потужності випромінювання

$$\rho(\omega, T) = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3} \frac{\hbar \omega}{e^{\frac{\hbar \omega}{kT}} - 1}; \quad W = \int_0^\infty \rho(\omega, T) d\omega = \sigma T^4;$$

$$\varepsilon = h\nu = \hbar\omega; \quad h = 6.62 \times 10^{-34} \text{ Дж} \cdot \text{с}; \quad c = 3 \times 10^8 \text{ м/с};$$

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

Фотоелектричний ефект, Ейнштейн (1905). Поглинання фотонів електронами.

Фотоефект – це емісія електронів з речовини у вакуум або в іншу речовину під дією електромагнітного випромінювання. Явище відкрив Герц в 1887 році, закони встановили Столетов в 1888 і Ленард в 1899.

В 1905 році Ейнштейн запропонував пояснення, засноване на гіпотезі про те, що світло не тільки поглинається й випромінюється, але й поширюється «квантами», тобто фактично ввів поняття фотона. Формула Ейнштейна для фотоефекта (закон збереження енергії при взаємодії фотона з електроном)

$$\hbar\omega = A_{\text{вих.}} + \frac{mv^2}{2}.$$

Імпульс фотона

$$\varepsilon = \hbar\omega; \quad \varepsilon = \sqrt{c^2 p^2 + m^2 c^4}; \quad m_{ph} = 0; \quad \varepsilon = cp;$$

$$cp = \hbar\omega; \quad p = \hbar \frac{\omega}{c} = \hbar k;$$

$$\vec{p} = \hbar \vec{k}.$$

Поширення світла відбувається дискретно, квантами світла!

Термін «фотон» був введений в 1926 році американським хіміком Льюїсом.

Ефект Комптона (1923). Пружне розсіювання фотонів (γ -квантів) на вільних електронах (графіт, Li, Be, Na, K, Fe, Ni, Cu). Нове підтвердження гіпотези фотонів. Використовуємо закони збереження енергії й імпульсу та отримуємо формулу для зміни (зменшення) частоти фотона після розсіювання на вільному нерухливому електроні

$$\begin{cases} \hbar\omega + mc^2 = \hbar\omega' + \varepsilon'_e; \\ \hbar\vec{k} = \hbar\vec{k}' + \vec{p}'_e. \end{cases}$$

$$\omega' = \frac{\omega}{1 + \frac{2\hbar\omega}{mc^2} \sin^2 \frac{\theta}{2}}.$$

Комбінаційний принцип Ритберга–Ритца (1908) підтверджує як теорію електромагнітних квантів (корпускулярну теорію світла), так і дискретність значень енергій атомів. Нижче наводиться формула Бальмера–Ритберга(1885) для лінійчатого спектра атома водню

$$\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right), \quad m > n.$$

ДИСКРЕТНІ ЗНАЧЕННЯ ФІЗИЧНИХ ВЕЛИЧИН

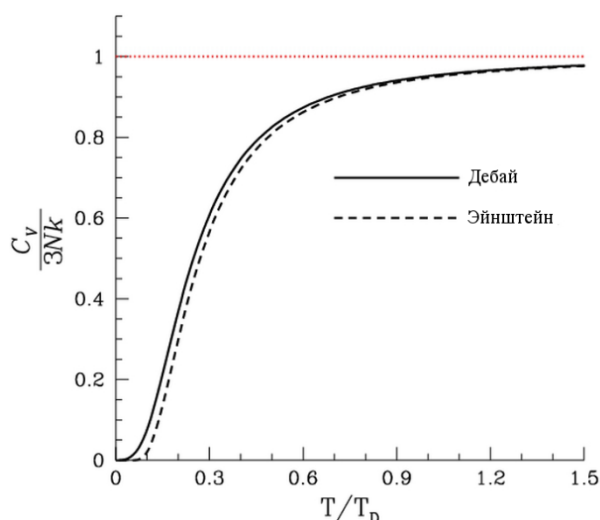
Дискретність енергії атомів

Комбінаційний принцип Ритберга – Ритца (1908) (різниці термов).

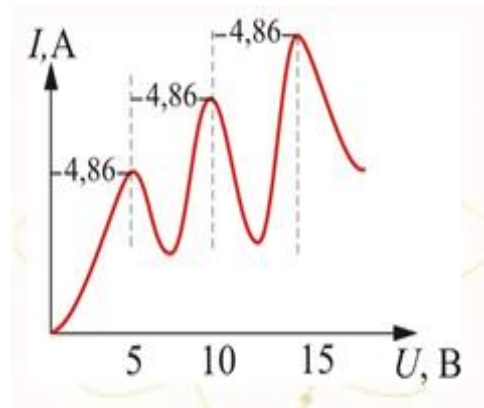
Питомі теплоємності твердих тел. Ейнштейн (1907), Дебай (1912) розглянули атоми як гармонічні осцилятори з дискретним набором енергій. Більш точна теорія теплоємності «по Дебаю» дає при низьких температурах залежність

$$C \sim T^3, \quad T \ll T_D.$$

T_D – температура Дебая.



Дослід Франка–Герца (1913) по пропусканню пучка електронів з певною енергією через пари ртуті підтверджує дискретність стійких енергетичних станів атомів. Розсіювання стає непружним за умови, що $eU = \Delta E$. Електрон віддає свою енергію атому, який переходить у збуджений стан з наступним випромінюванням фотона, а струм при цьому падає (див. мал.).



Дослід Штерна-Герлаха (1922). Проліт парамагнітних атомів через неоднорідне магнітне поле, просторове квантування магнітного й механічного моментів

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$$

$$F = \mu_z \frac{\partial H_z}{\partial Z} \sim L_z$$

Пучок атомів розбивається на ряд пучків (див. мал.). Дослід також підтверджує існування у електрона власного механічного моменту – спіну.



ДИФРАКЦІЯ ЕЛЕКТРОНІВ, АТОМІВ, МОЛЕКУЛ

Дослід Девідсона – Джермера (1927). Відбиття пучка електронів від поверхні монокристалів нікелю.

Дослід Томсона (1928). Пропускання електронів через тонку полікристалічну пластинку.

Дослід Фабриканта – Бібермана – Сушкіна (1947). Пропускання електронів по одному через тонку полікристалічну пластинку.

В 80-і роки минулого століття поставлений класичний досвід по дифракції електронів на двох щілинах за допомогою Скануючого тунельного мікроскопу (СТМ). Спостерігалися дифракційні явища атомів, молекул.

Подробиці – у презентації!

ГІПОТЕЗА ДЕ БРОЙЛЯ (1924)

В геометричній оптиці розглядаються промені світла. В хвильовій оптиці світло – це електромагнітні хвилі. Це корпускулярно-хвильовий дуалізм. При

поширенні світло поводить ся як хвиля, а при взаємодії з речовиною світло поводить ся, як потік частинок – квантів світла, названих пізніше (в 1926 році) «фотонами». Маса спокою фотона дорівнює нулю. Енергія фотона дорівнює $\varepsilon = \hbar\omega = cp$, отже, імпульс фотона

$$p = \frac{\hbar\omega}{c}, \quad \frac{\omega}{c} = k = \frac{2\pi}{\lambda};$$

$$\vec{p} = \hbar\vec{k}.$$

Довжина хвилі

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

Це плоска монохроматична хвиля

$$f = Ae^{i(\vec{k}\vec{r} - \omega t)}.$$

Фазова швидкість фотона $v_{phase} = \omega/k = \varepsilon/p = c$. Групова швидкість фотона $v_{group} = \partial\omega/\partial k = \partial\varepsilon/\partial p = c$. Для фотона групова й фазова швидкості збігаються й не залежать від довжини хвилі. Немає дисперсії електромагнітних хвиль.

Отже, є класична механіка, у якій частинки матерії рухаються по певних траєкторіях, але немає хвильової механіки!

Де Бройль висунув гіпотезу, згідно з якою руху частинки зіставляється якесь хвильове поле (хвильовий процес). Це і є хвильова механіка, яку ми тепер називаємо квантовою механікою.

Гіпотеза де Бройля: руху вільної частинки з енергією ε та імпульсом $\vec{p}$ зіставляється плоска монохроматична хвиля з частотою ω й хвильовим вектором $\vec{k}$:

$$\begin{cases} \varepsilon = \hbar\omega; \\ \vec{p} = \hbar\vec{k}; \end{cases} \quad \psi(\vec{r}, t) = Ae^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\vec{r} - \varepsilon t)}.$$

$\psi(\vec{r}, t)$ – хвильова функція частинки. По припущенню де Бройля довжина хвилі, яка зіставляється частинці, визначається так само, як і для електромагнітних хвиль

$$\lambda_D = \frac{2\pi\hbar}{p} = \frac{h}{p}.$$

Для хвиль матерії фазова й групова швидкості різні!

$$\text{Нерелятивістська частинка: } \varepsilon = \frac{p^2}{2m}; \quad v_{phase} = \frac{p}{2m}; \quad v_{group} = \frac{p}{m} = 2v_{phase}.$$

Релятивістська частинка:

$$\varepsilon = \sqrt{c^2 p^2 + m^2 c^4}; \quad v_{phase} = c \left[1 + \left(\frac{mc}{p} \right)^2 \right]^{1/2} > c!!!; \quad v_{group} = \frac{c^2 p}{\sqrt{c^2 p^2 + m^2 c^4}} = \frac{c^2 p}{\varepsilon} < c.$$

Для релятивістської частинки фазова швидкість виявляється більше, ніж швидкість світла. Хвилі де Бройля не мають фізичного змісту.

Хвильова функція. Статистичне трактування хвильової функції

Квантовій частинці зіставляється деяке хвильове поле (хвильовий процес), який описується, загалом кажучи, комплексною функцією. Цю функцію називають хвильовою функцією та позначають зазвичай $\psi(\vec{r}, t)$. В 1926 році німецький фізик Макс Борн запропонував статистичне трактування хвильової функції (ХФ):

$$dW \sim |\psi(\vec{r}, t)|^2 dV.$$

Квадрат модуля ХФ пропорційний імовірності виявити частинку в елементі об'єму dV в момент часу t . Сама ж ХФ фізичного змісту не має. Якщо нормувати ХФ на одиницю $\int |\psi(\vec{r}, t)|^2 dV = 1$, то

$$dW = |\psi(\vec{r}, t)|^2 dV.$$

Щільність імовірності (розподіл імовірності по координатах, partition function) – це

$$\rho(\vec{r}, t) = |\psi(\vec{r}, t)|^2.$$

Імовірність виявити частинку в кінцевому об'ємі V у момент t визначається, як

$$W(V) = \int_V |\psi(\vec{r}, t)|^2 dV.$$

ХФ визначається з точністю до фазового множника $e^{i\alpha}$ – $\psi(\vec{r}, t)$ та $e^{i\alpha}\psi(\vec{r}, t)$ описують один й той самий квантовий стан (має фізичний сенс тільки квадрат модуля ХФ!)

Узагальнимо поняття ХФ на багаточастинкову систему – $\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N, t)$.

Квантовій системі з багатьма ступенями свободи зіставляється одна ХФ!

Статистичне трактування

$$dW = |\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N, t)|^2 dV_1 dV_2 \dots dV_N;$$

$$dW(\vec{r}_1, t) = dV_1 \int |\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N, t)|^2 dV_2 \dots dV_N;$$

ХФ системи невзаємодіючих частинок – добуток одночастинкових ХФ.

Для ХФ, заданої в узагальнених координатах з N ступенями свободи, маємо

$$dW = |\psi(q_1, q_2, \dots, q_N, t)|^2 dq_1 dq_2 \dots dq_N; \int |\psi(q_1, q_2, \dots, q_N, t)|^2 dq_1 dq_2 \dots dq_N = 1$$

Принцип суперпозиції:

Якщо квантова система може перебувати в станах із ХФ $\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_N$, то ХФ, що є лінійною комбінацією (суперпозицією) ХФ $\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_N$ вигляду

$$\psi = \sum_{i=1}^N C_i \psi_i \text{ також є ХФ, що описує один з можливих станів квантової}$$

системи. Принцип суперпозиції означає, що диференціальне рівняння квантової механіки – лінійне. Окремим випадком застосування принципу суперпозиції є розклад довільної функції на плоскі монохроматичні хвилі. Плоска хвиля з певним імпульсом і енергією

$$\psi_{\vec{p}}(\vec{r}, t) = A(\vec{p}) e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\vec{r} - \epsilon t)}$$

Загальний вид розв'язку хвильового рівняння – це суперпозиція плоских монохроматичних хвиль із усіма можливими значеннями хвильового вектора $\vec{k} = \vec{p}/\hbar$:

$$\psi(\vec{r}, t) = \int A(\vec{p}) e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\vec{r} - \epsilon t)} d^3 \vec{p}$$

Це теж ХФ вільної частинки, але такої, що не має певного значення імпульсу. З математичної точки зору – це перетворення Фур'є (інтеграл Фур'є). Обернене перетворення Фур'є визначає амплітуди

$$A(\vec{p}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int \psi(\vec{r}, t) e^{-\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\vec{r} - \epsilon t)} d^3 \vec{r}$$

Перетворення Фур'є можна записати симетрично

$$\psi(\vec{r}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int C(\vec{p}) e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\vec{r} - \epsilon t)} d^3 \vec{p}; C(\vec{p}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int \psi(\vec{r}, t) e^{-\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\vec{r} - \epsilon t)} d^3 \vec{r}.$$

Хвильові пакети. Співвідношення невизначеності.

Нехай хвиля поширюється уздовж осі x

$$\psi(x,t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}} \int_{-\infty}^{\infty} A(p) e^{\frac{i}{\hbar}(px - \varepsilon t)} dp.$$

Розглянемо прямокутний імпульс (прямокутний хвильовий пакет)

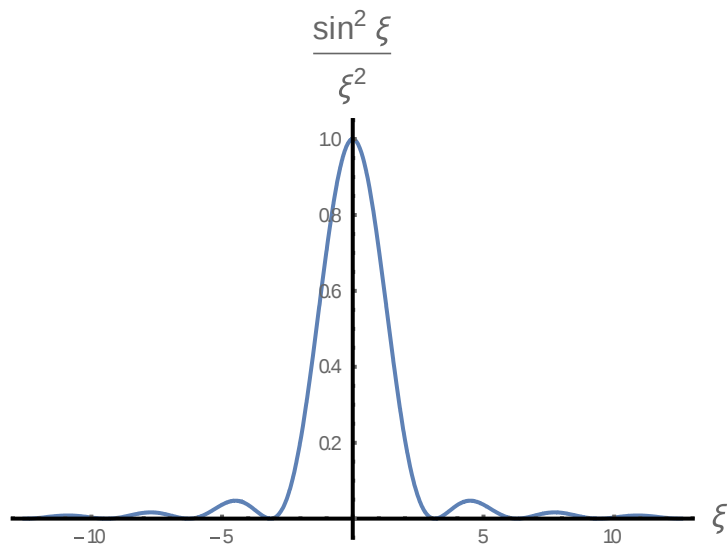
$$A(p) = \begin{cases} A_0, & |p - p_0| \leq \frac{\Delta p}{2}; \\ 0, & |p - p_0| > \frac{\Delta p}{2}. \end{cases}$$

$$\begin{aligned} \psi(x,t) &= \frac{A_0}{(2\pi\hbar)^{1/2}} \int_{p_0 - \frac{\Delta p}{2}}^{p_0 + \frac{\Delta p}{2}} e^{\frac{i}{\hbar}[px - \varepsilon(p)t]} dp = \left\{ \begin{array}{l} p' = p - p_0; dp' = dp; \\ \varepsilon(p) \approx \varepsilon(p_0) + v_0(p - p_0) = \varepsilon_0 + v_0 p' \end{array} \right\} = \\ &= \frac{A_0}{(2\pi\hbar)^{1/2}} e^{\frac{i}{\hbar}(p_0 x - \varepsilon_0 t)} \int_{-\frac{\Delta p}{2}}^{\frac{\Delta p}{2}} e^{\frac{i}{\hbar}[x - v_0 t]p'} dp' = \frac{A_0}{(2\pi\hbar)^{1/2}} e^{\frac{i}{\hbar}(p_0 x - \varepsilon_0 t)} \frac{e^{\frac{i(x - v_0 t)\Delta p}{2\hbar}} - e^{-\frac{i(x - v_0 t)\Delta p}{2\hbar}}}{\frac{i}{\hbar}[x - v_0 t]} = \\ &= \frac{A_0 \Delta p}{(2\pi\hbar)^{1/2}} e^{\frac{i}{\hbar}(p_0 x - \varepsilon_0 t)} \frac{\sin\left[\frac{(x - v_0 t)\Delta p}{2\hbar}\right]}{\left[\frac{(x - v_0 t)\Delta p}{2\hbar}\right]}. \end{aligned}$$

Маємо

$$\rho(x,t) = |\psi(x,t)|^2 = \left[\frac{A_0 \Delta p}{(2\pi\hbar)^{1/2}} \right]^2 \left(\frac{\sin \xi}{\xi} \right)^2; \quad \xi = \frac{(x - v_0 t)\Delta p}{2\hbar}.$$

У лінійному наближенні прямокутний імпульс рухається, як єдине ціле (див. рис)



Нехай $t = 0$, $\xi_0 = \frac{x\Delta p}{2\hbar}$. Імовірність суттєво відмінна від нуля при $-\pi < \xi_0 < \pi$.

Один по одному величини маємо

$$\Delta\xi_0 \sim \pi; \quad \frac{\Delta x \Delta p}{2\hbar} \sim \pi; \quad \Delta x \Delta p \sim 2\pi\hbar; \quad \Delta x \Delta p \sim h.$$

До чого приводить врахування наступного доданка в розкладанні $\varepsilon(p)$, розглянемо в наступній лекції.