Лекція № 2

Час розпливання хвильового пакету. Уточнене співвідношення невизначеності

На минулій лекції розглянули хвильовий пакет (прямокутний імпульс) та вивели в лінійному наближенні співвідношення $\Delta x \Delta p \sim h$. Це є оцінка розміру хвильового пакета або співвідношення невизначеності Гейзенберга. Врахуємо наступний доданок у розкладанні енергії в ряд Тейлора

$$\varepsilon(p) \approx \varepsilon_0 + \upsilon_0(p - p_0) + \frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2 \varepsilon}{\partial p^2}\right)_0 (p - p_0)^2; \quad p - p_0 = \Delta p.$$

Для нерелятивістської частинки

$$\varepsilon = \frac{p^2}{2m}; \quad \left(\frac{\partial^2 \varepsilon}{\partial p^2}\right)_0 = \frac{1}{m}.$$

Фаза хвилі (показник експоненти $\frac{px - \varepsilon(p)t}{\hbar}$) суттєво зміниться при

$$\frac{1}{2\hbar}\frac{1}{m}\Delta t(\Delta p)^2 \sim \pi; \quad \Delta p \sim \frac{h}{\Delta x}.$$

Час розпливання хвильового пакету

$$\Delta t \sim \frac{m(\Delta x)^2}{h}.$$

Для мікрочастинок хвильовий пакет через дисперсію розпливається практично миттєво, а для макрочастинок – існує нескінченно довго (Δt більше часу життя Всесвіту).

Співвідношення невизначеності з урахуванням розпливання хвильового пакету треба записати у вигляді нерівності

$$\Delta x \Delta p \geq h.$$

«ПРИНЦИПИ» КВАНТОВОЇ МЕХАНІКИ

Принцип відповідності (Н.Бор, 1923). Це третій постулат Бора

При "$h \to 0$" закони та співвідношення квантової механіки переходять у закони й співвідношення класичної механіки. Цей принцип використовується для знаходження квантових аналогів класичних величин.

Принцип доповнюваності (Н.Бор, 1927)

Сформульований Бором в 1927 році. Відповідно до принципу доповнюваності хвильовий та корпускулярний описи мікропроцесів не виключають і не замінюють, а доповнюють один одного. Для формування уяви про мікрооб'єкт необхідний синтез цих двох описів.

На першій лекції вже сформулювали

Принцип суперпозиції:

Якщо квантова система може перебувати в станах із ХФ $\psi_1, \psi_2, ..., \psi_N$, то ХФ, що є лінійною комбінацією (суперпозицією) ХФ $\psi_1, \psi_2, ..., \psi_N$ вигляду $\psi = \sum_{i=1}^{N} C_i \psi_i$ також є ХФ, що описує один з можливих станів квантової системи. Принцип суперпозиції означає, що диференціальне рівняння квантової механіки – лінійне.

Принцип причинності у квантовій механіці

Ми вивчаємо властивості мікрочастинок за допомогою макроскопічних приладів. Опис мікрочастинок повинний хоча б частково включати класичні поняття. Вплив приладу принципово не може бути зроблене малим, а результат взаємодії приладу з електроном (при дифракції) однозначним. Можна лише говорити про ймовірність того або іншого значення імпульсу електрона після проходження їм щілини. Можна говорити тільки про ймовірність того або іншого результату вимірювання. Така природа мікрочастинок: поведінка мікрочастинок характеризується статистичними закономірностями.

Поведінка окремої частинки, а не тільки ансамблю частинок підкоряється статистичним закономірностям!

Сформулюємо **закон причинності** математично. Нехай відомий квантовий стан частинки в початковий момент часу $t = t_0$, тобто відома її хвильова функція (ХФ) $\Psi(\vec{r}, t_0)$. Якщо відомі всі впливи на частинку, то можна однозначно визначити ХФ при $t \geq t_0$. Зі змісту ХФ випливає, що тим самим ми можемо передбачити ймовірності того, величини, які характеризують частинку (енергія, імпульс, радіус-вектор) будуть мати те або інше значення в будь-який момент $t > t_0$. Іншими словами, можемо визначити $dW = |\Psi(\vec{r}, t)|^2 dV$, знайти ймовірності отримання при вимірюванні того або іншого значення імпульсу, координати, енергії та ін., обчислити середні значення імпульсу, координати, енергії та ін.

Хвильове рівняння Шредінгера (РШ).

Принцип причинності + принцип суперпозиції + принцип відповідності дозволяють «вивести» основне рівняння квантової механіки – хвильове рівняння Шредингера (1926).

РШ – це рівняння руху квантової частинки. Задати закон руху – визначити ХФ квантовой частинки.

Отже, завдання ХФ у початковий момент t_0 і завдання всіх взаємодій квантової системи дозволяє знайти еволюцію квантової системи. Еволюція визначається зміною ХФ з часом $\frac{\partial \Psi(\vec{r},t)}{\partial t}$. Рівняння, яке ми шукаємо, повинне бути першого порядку по *t*. Повинне бути лінійним та однорідним. Зміну хвильової функції задамо дією на неї лінійного оператора $\hat{H}\Psi(\vec{r},t)$.

Сконструюємо найпростіше диференціальне рівняння, якому задовольняє плоска монохроматична хвиля та суперпозиція плоских монохроматичних хвиль. Далі ми узагальнимо рівняння на випадок частинки в зовнішньому полі та на випадок довільної квантової системи.

$$\Psi(\vec{r},t) = Ae^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\vec{r}-Et)}; \quad \vec{p}\vec{r} = p_x x + p_y y + p_z z;$$

$$\frac{\partial \Psi(\vec{r},t)}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar}E\Psi(\vec{r},t); \quad \frac{\partial^2 \Psi(\vec{r},t)}{\partial x^2} = -\frac{p_x^2}{\hbar^2}\Psi(\vec{r},t); \quad ...$$

$$E = \frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2m} = \frac{p^2}{2m};$$

$$i\hbar\frac{\partial \Psi(\vec{r},t)}{\partial t} = E\Psi(\vec{r},t); \quad -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi(\vec{r},t) = \frac{p^2}{2m}\Psi(\vec{r},t).$$

РШ для вільної частинки

$$i\hbar\frac{\partial \Psi(\vec{r},t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi(\vec{r},t) \qquad (1)$$

Як і повинно бути, це рівняння не містить енергії, імпульсу частинки, йому також задовольняє й суперпозиція плоских монохроматичних хвиль

$$\Psi(\vec{r},t) = \int A(\vec{p},E)e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\vec{r}-Et)}d^3\vec{p}dE$$

Рівняння (1) – першого порядку по t, так що йому задовольняє тільки комплексна ХФ. Серед розв’язків (1) є й монохроматичні хвилі (частинка з певною енергією)

$$\Psi(\vec{r},t)=\psi(\vec{r})e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$$

Замість (1) пишемо

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(\vec{r})=E\psi(\vec{r});\quad E=\frac{p^2}{2m}.(2)$$

Енергія вільної частинки зберігається. Зберігається сума кінетичної й потенційної енергії для частки в потенціальному зовнішньому полі

$$E=\frac{p^2}{2m}+U(\vec{r});\quad \frac{p^2}{2m}=E-U(\vec{r}).$$

Замінимо в (2) $E=\frac{p^2}{2m}\to E-U(\vec{r})$. У результаті такої підстановки

отримуємо **стаціонарне РШ для частинки в постійному зовнішньому полі**

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(\vec{r})+U(\vec{r})\psi(\vec{r})=E\psi(\vec{r}).\quad (3)$$

Повернемося до ХФ, що залежить від часу, у правій частині (3) замінимо $E\Psi(\vec{r},t)\to i\hbar\frac{\partial\Psi(\vec{r},t)}{\partial t}$ та знайдемо **хвильове РШ для частинки в зовнішньому полі**

$$i\hbar\frac{\partial\Psi(\vec{r},t)}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi(\vec{r},t)+U(\vec{r},t)\Psi(\vec{r},t).\quad (4)$$

Рівняння (4) називають також нестаціонарним РШ. В ангійській мові використовуються терміни “time-dependent” and “time-independent” для нестаціонарного (хвильового) та стаціонарного РШ відповідно.

Для розв’язку УШ потрібно

1. задати початкову умову $\Psi(\vec{r},t_0)$
2. Задати граничні умови. У загальному випадку ця вимога скінченності (умови нормування), безперервності й однозначності ХФ та її перших похідних (всюди, крім особливих точок)

Обернення часу в УШ

$$t\to -t,\quad \Psi_{оберн.}(\vec{r},t)\to\Psi^*(\vec{r},-t)$$

Вектор щільності потоку імовірності. Рівняння безперервності

Це закон збереження числа частинок у квантовій механіці. Зміна ВФ у часі й просторі підкоряється певному закону збереження. Імовірність виявити частинку в об'ємі V у момент t

$$\int_V |\Psi(\vec{r},t)|^2 \, dV$$

Диференціюємо цю величину за часом

$$\begin{aligned}&\frac{\partial}{\partial t}\int_V |\Psi(\vec{r},t)|^2 \, dV = \int_V \frac{\partial}{\partial t}\left[\Psi^*(\vec{r},t)\Psi(\vec{r},t)\right]dV = \\ &\int_V \left[\frac{\partial \Psi^*(\vec{r},t)}{\partial t}\Psi(\vec{r},t) + \Psi^*(\vec{r},t)\frac{\partial \Psi(\vec{r},t)}{\partial t}\right]dV.\end{aligned} \qquad (5)$$

З РШ (4) випливає, що

$$\frac{\partial \Psi(\vec{r},t)}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi(\vec{r},t) + U(\vec{r},t)\Psi(\vec{r},t)\right);$$

$$\frac{\partial \Psi^*(\vec{r},t)}{\partial t} = -\frac{1}{i\hbar}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi^*(\vec{r},t) + U(\vec{r},t)\Psi^*(\vec{r},t)\right)$$

Перетворимо (5)

$$\frac{\partial}{\partial t}\int_V |\Psi(\vec{r},t)|^2 \, dV = \int_V \frac{\hbar}{2mi}\left[\Psi(\vec{r},t)\Delta\Psi^*(\vec{r},t) - \Psi^*(\vec{r},t)\Delta\Psi(\vec{r},t)\right]dV$$

$$\Delta = \nabla \cdot \nabla; \quad \Delta\Psi^*(\vec{r},t) = \nabla \cdot \nabla\Psi^*(\vec{r},t);$$

$$\mathrm{div}\Big(\Psi(\vec{r},t)\nabla\Psi^*(\vec{r},t)\Big) = \Psi(\vec{r},t)\Delta\Psi^*(\vec{r},t) + \nabla\Psi(\vec{r},t)\nabla\Psi^*(\vec{r},t);$$

$$\mathrm{div}\Big(\Psi^*(\vec{r},t)\nabla\Psi(\vec{r},t)\Big) = \Psi^*(\vec{r},t)\Delta\Psi(\vec{r},t) + \nabla\Psi^*(\vec{r},t)\nabla\Psi(\vec{r},t);$$

Різниця

$$\Psi(\vec{r},t)\Delta\Psi^*(\vec{r},t) - \Psi^*(\vec{r},t)\Delta\Psi(\vec{r},t) = \mathrm{div}\Big(\Psi(\vec{r},t)\nabla\Psi^*(\vec{r},t) - \Psi^*(\vec{r},t)\nabla\Psi(\vec{r},t)\Big)$$

$$-\frac{\partial}{\partial t}\int_V |\Psi(\vec{r},t)|^2 \, dV = \oint_S \frac{\hbar}{2mi}\mathrm{div}\left[\Psi^*(\vec{r},t)\nabla\Psi(\vec{r},t) - \Psi(\vec{r},t)\nabla\Psi^*(\vec{r},t)\right]d\vec{S}$$

Введемо вектор щільності потоку ймовірності

$$\vec{j} = \frac{\hbar}{2mi}\left[\Psi^*(\vec{r},t)\nabla\Psi(\vec{r},t) - \Psi(\vec{r},t)\nabla\Psi^*(\vec{r},t)\right]$$

$$= \frac{\hbar}{m}\operatorname{Im}\left[\Psi^*(\vec{r},t)\nabla\Psi(\vec{r},t)\right].$$

Згадаємо, що щільність імовірності – це $\rho = |\Psi(\vec{r},t)|^2$ й запишемо рівняння неперервності в інтегральній формі

$$-\frac{\partial}{\partial t}\int_V |\Psi(\vec{r},t)|^2\, dV = \oint_S \vec{j}\, d\vec{S}.$$

Зменшення в одиницю часу ймовірності виявити квантову частинку в об'ємі V рівняється ймовірності того, що частинка перетне за одиницю часу замкнену поверхню S. В диференціальній формі маємо

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \operatorname{div}\vec{j} = 0.$$

Обчислимо вектор щільності потоку ймовірності для вільної частинки для ХФ $\Psi(\vec{r},t) = Ae^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\vec{r} - Et)}$

$$\vec{j} = \frac{\hbar}{2mi}|A|^2\left[\frac{i}{\hbar}\vec{p} - \left(-\frac{i}{\hbar}\vec{p}\right)\right] = \frac{\vec{p}}{m}|A|^2 = \vec{v}\,|A|^2\,.$$

Для дійсної хвильової функції $\psi^* = \psi,$ тому $\vec{j} = 0.$ Потоку частинок немає.