Fala w ujęciu kwantowym

Erwin Schrödinger

Max Born

Werner Heisenberg

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

- E. Schrödinger (1923) – równanie falowe materii

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

- M. Born (1926) – probabilistyczna interpretacja fali materii,

$$PdV = |\Psi|^2 dxdydz \quad \text{gdzie} \quad |\Psi|^2 = \Psi \cdot \Psi^*$$

- W. Heisenberg (1927) – zasada nieoznaczoności

$$\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}; \qquad \Delta E \cdot \Delta t \geq \frac{\hbar}{2},$$

- **Zasada przyczynowości** - stan początkowy ruchu punktu materialnego określa jedynie prawdopodobieństwo położenia w chwilach późniejszych.

W ogólności jeżeli potencjał *U=U(x,y,z,t)* zależy od czasu równanie to dla 3-wymiarów przyjmuje postać

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

Operator energii całkowitej

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

Operator energii kinetycznej

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

Operator energii potencjalnej

$$U$$

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi = E\Psi \longrightarrow \boxed{E\Psi = \hat{H}\Psi} \longleftarrow -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U = \hat{H} \longleftarrow$$

Operator Hamiltona – „hamiltonian”

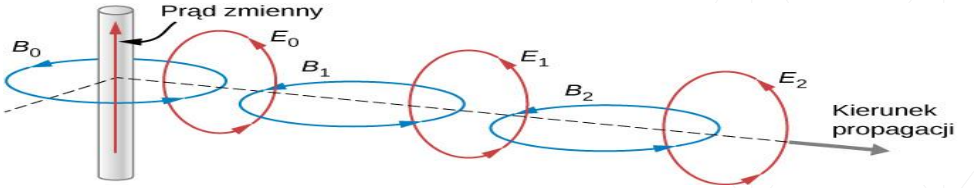
najprostszy zapis równania Schrödingera

równania Newtona – fale dźwiękowe i fale w strunach

$$\frac{\partial^2 y}{\partial t^2} = v^2 \frac{\partial^2 y}{\partial x^2} \qquad y(x,t) = A\sin(\omega t - kx) = A\sin\left[\frac{2\pi}{\lambda}(vt - x)\right]$$

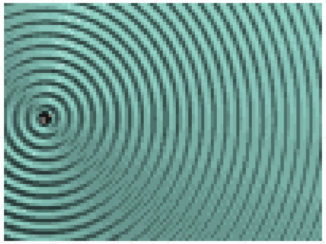
równania Maxwella – fale świetlne

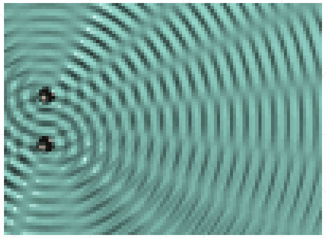
$$\frac{\partial^2 \boldsymbol{\psi}}{\partial t^2} = c^2 \frac{\partial^2 \boldsymbol{\psi}}{\partial x^2}; \quad \boldsymbol{\psi} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{E} \\ \boldsymbol{B} \end{bmatrix}$$



równanie Schrödingera – fale materii (funkcja falowa)

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





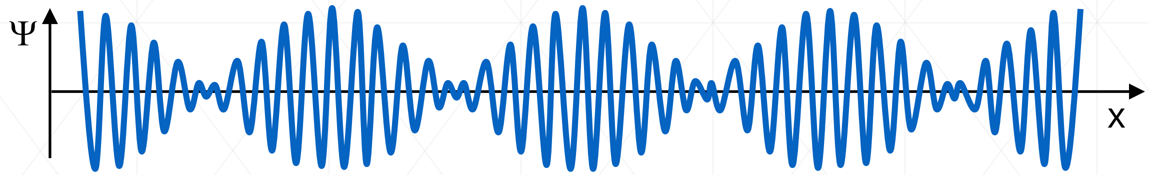
Właściwości fal „klasycznych”

- fale harmoniczne opisane funkcją sinus lub cosinus
- powierzchnia falowa (czoło fali) – zbiór punktów o takiej samej fazie
- linie prostopadłe do powierzchni falowej to promień fali, wskazują kierunek propagacji
- zasada superpozycji: jeśli w ośrodku propagują się dwie fale, to wypadkowe zaburzenie ośrodka jest równe sumie zaburzeń wywołanych przez poszczególne fale
- dowolny ruch falowy można przedstawić jako superpozycję fal harmonicznych – analiza Fouriera

Rozważmy dwie fale harmoniczne o nieco różnych częstościach $d\omega << \omega$

$$y_1 = A_o \sin\big((\omega + d\omega)t - (k + dk)x\big) \qquad y_2 = A_o \sin\big((\omega - d\omega)t - (k - dk)x\big)$$

$$y = y_1 + y_2 = 2A_o \cos(d\omega \cdot t - dk \cdot x) \cdot \sin(\omega t - kx)$$



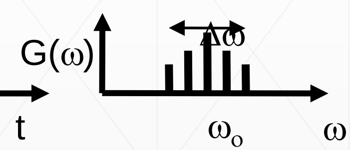
W wyniku superpozycji dwóch fal otrzymaliśmy fale harmoniczną o częstości nośnej ω i modulowanej amplitudzie przenoszonej z prędkością grupową v_g

$$d\omega \cdot t - dk \cdot x = const$$

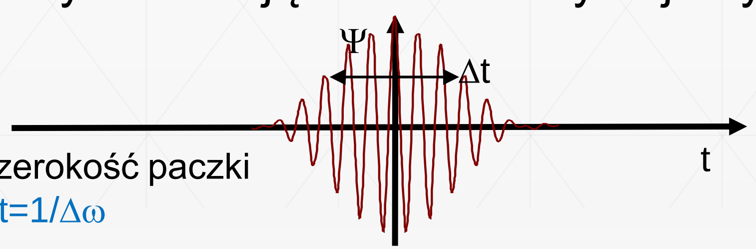
$$d\omega \cdot dt - dk \cdot dx = 0$$

$$v_g = \frac{dx}{dt} = \frac{d\omega}{dk}$$ - prędkość grupowa

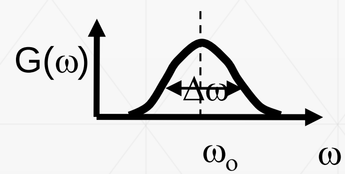
Korzystając z szeregu Fouriera dodając większą liczbę fal o częstościach bliskich ω_o uzyskuje się stłumienie bocznych dudnień. Poniżej wykres dla sumy 5 fal.



Przy sumowaniu nieskończonej liczby fal o częstościach bliskich ω_o i amplitudach opisanych funkcją Gaussa otrzymujemy pojedynczą tzw. paczkę falową.



szerokość paczki
$\Delta t = 1/\Delta\omega$



$$y(t) = \int_0^{\infty} G(\omega) \cos \omega t \, d\omega$$

Zatem skończone ciągi falowe w praktyce występują w postaci paczek falowych, które to mają następujące cechy:

1. paczka falowa powstaje w wyniku superpozycji fal harmonicznych o częstościach z przedziału $\Delta\omega$ i amplitudach opisanych funkcją Gaussa

2. im mniejsze $\Delta\omega$ tym bardziej paczka falowa rozmyta jest w czasie

3. paczka falowa rozchodzi się z prędkością grupową

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

4. danej paczce falowej można przyporządkować odpowiednie pasmo liczb falowych Δk (tak jak pojedynczej fali liczbę falową k)

$$\Delta k = \left(\frac{dk}{d\omega}\right)\Delta\omega = \frac{\Delta\omega}{v_g} = \frac{1}{v_g \cdot \Delta t} = \frac{1}{\Delta x}$$

5. w paczce falowej zachodzi zależność pomiędzy prędkością fazową oraz prędkością grupową

$$v_g = v - \lambda \frac{dv}{d\lambda}$$

6. Fale harmoniczną można przedstawić również w zapisie zespolonym:

$$\psi(x,t) = A_o e^{i(\omega t - kx)} = A_o e^{i\omega t} e^{-ikx}$$

sens fizyczny ma tylko część rzeczywista zespolonej reprezentacji fali

Funkcja falowa - rozwiązanie równania Schrödingera

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

- Na bazie dualizmu korpuskularno-falowego przypisywaliśmy cząstkom własności falowe podając długość fali materii de Broglie'a stowarzyszonej z daną cząstką.

- Tym samym za Erwinem Schrödingerem reprezentować tą fale będzie szczególne rozwiązanie jego równania, które nazwiemy *funkcją falową Ψ.*

- Ze względu na fakt, iż równanie Schrödingera określone jest w dziedzinie zespolonej (z lewej strony występuje „*i*”), to i jego rozwiązanie będzie reprezentowane przez funkcję zespoloną (na razie nie wiemy jaką) – wiemy tylko, że zespolona funkcja falowa $\Psi(x,y,z,t)$ jest ogólnie funkcją współrzędnych i czasu.

- Jednakże za Bornem (1926) następuje probabilistyczna interpretacja fal materii

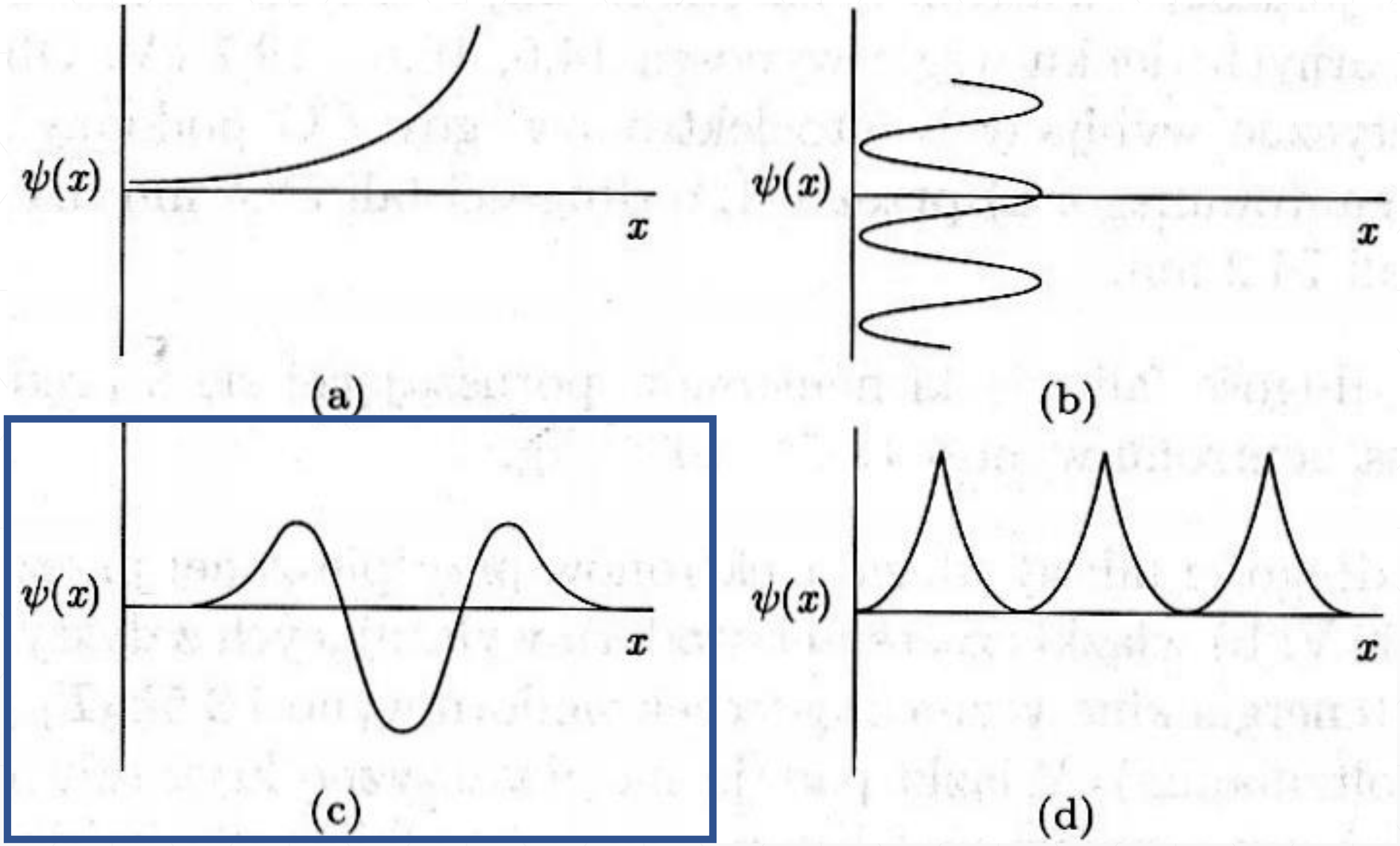
$$PdV = |\Psi|^2 dxdydz \quad \text{gdzie} \quad |\Psi|^2 = \Psi \cdot \Psi^*$$

Zatem warunki formalne na *funkcje falową* Ψ:

- unormowania tzn. pdp całkowite = 1 $\quad \int_V |\Psi|^2 \, dV = 1$
- jednoznaczności, ciągłości wraz z pierwszą pochodną i ograniczoności $|\Psi| < \infty$
- zasada superpozycji $\Psi = \Psi_1 + \Psi_2$

Właściwości funkcji falowej

która z niżej przedstawionych funkcji spełnia właściwości funkcji falowej ?



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.

Jaka jest postać funkcji falowej?

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

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

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

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

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

$$\Psi = Ae^{i(k_o x - \omega t)} \qquad |\Psi|^2 = \Psi^*\Psi = \left(Ae^{-i(k_o x - \omega t)}\right)\left(Ae^{i(k_o x - \omega t)}\right) = A^2$$

Zatem jeżeli pęd cząstki posiada <u>określoną wartość</u>, 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 dla cząstki swobodnej

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

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 tzw. stacjonarnego jednowymiarowego równania Schrödingera:

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

m, E – masa i całkowita energia mechaniczna cząstki, *U(x)* – energia potencjalna w danym obszarze

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

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

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

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

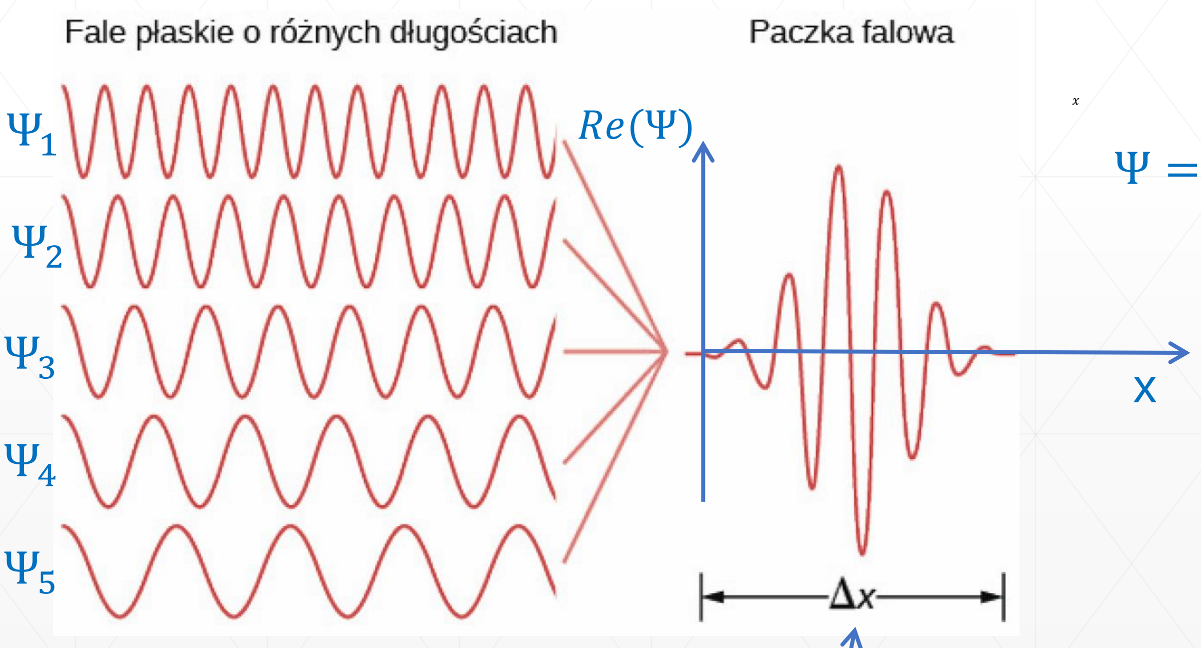
przyjmując B=0 (cząstka porusza się w kierunku dodatnich x)

$$\Psi(x,t) = \Psi(x)e^{-i\omega t} = Ae^{i(kx-\omega t)} \qquad k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}E} = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}\frac{p^2}{2m}} = \frac{p}{\hbar} \qquad \lambda = \frac{2\pi}{k} = \frac{2\pi}{p}\hbar = \frac{h}{p}$$

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

Cząstka jako 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 falowa traktować jako zaburzenie typu falowego utworzone wskutek oddziaływania nakładających się fal (funkcji falowych materii). 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.



$$\Psi = \Psi_1 + \Psi_2 + \Psi_3 + \Psi_4 + \Psi_5$$

Szerokość paczki falowej (także materii) Δx zależy od szerokości widma $\Delta\lambda$ fal składowych.

Prędkość grupowa paczki falowej materii

Klasycznie:

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

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

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

Paczka falowa przemieszcza się z prędkością równą prędkości cząstki

W przypadku dużych prędkości rozważania relatywistyczne dają ten sam wynik:

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

różniczkując obie strony równania

$$2EdE = 2pc^2dp$$

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

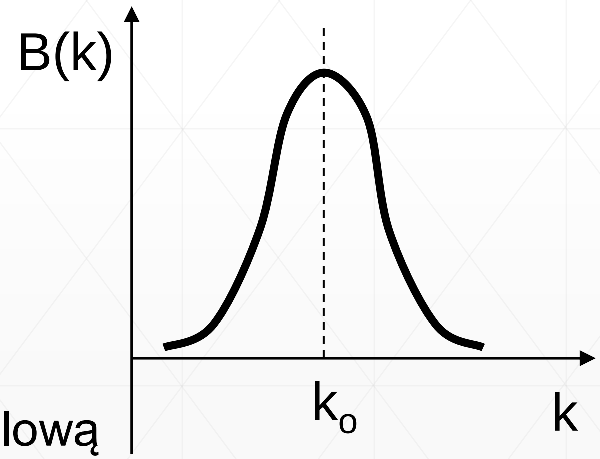
Superpozycja fal monochromatycznych

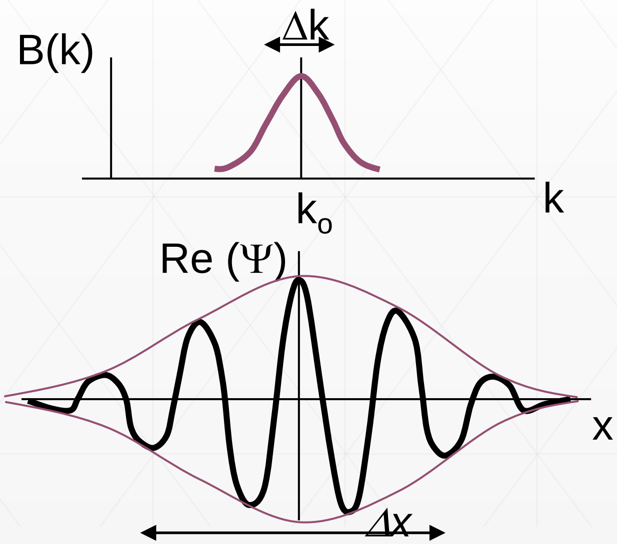
Rzeczywista paczka falowa powstaje w wyniku superpozycji nieskończenie wielu fal o różnych długościach (wektorach falowych), którym odpowiadają różne wartości pędu $p = \hbar k$ Stąd sumowanie zastępujemy całkowaniem.

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

współczynniki Fouriera

Amplitudy tych fal *B(k)*, zwane współczynnikami Fouriera, posiadają również postać funkcji Gaussa wokół wartości k_o odpowiadającej pędowi elektronu p_o





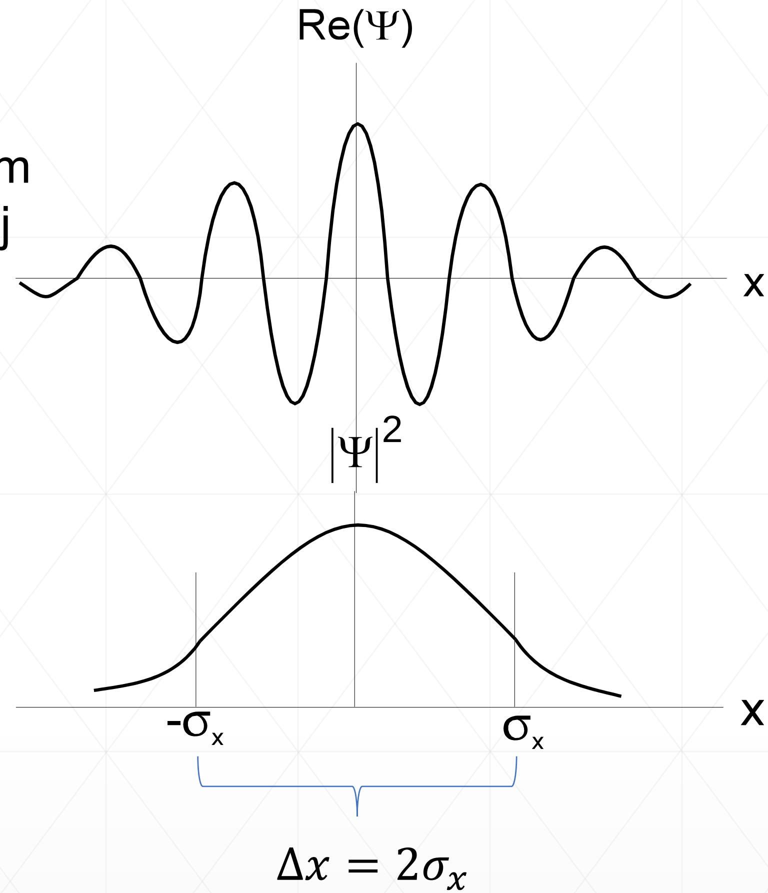
Pomiędzy funkcją falową $\Psi(x)$, a współczynnikami Fouriera *B(k)* istnieje ścisły związek

Paczki falowe materii

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

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

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



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

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: $\Delta x \sim \lambda/2$.

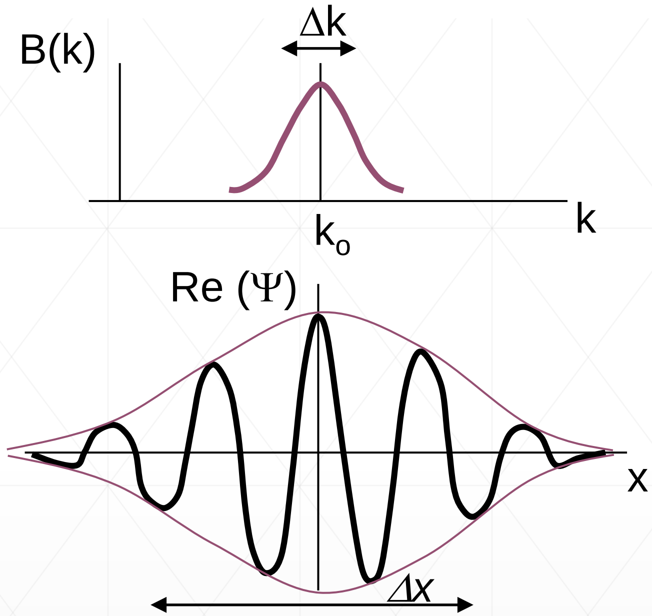
Wówczas: $\Delta x = \frac{\lambda}{2} = \left\{\lambda = \frac{h}{p}\right\} = \frac{h}{2p}$, gdzie $p = mv$ jest pędem cząstki.

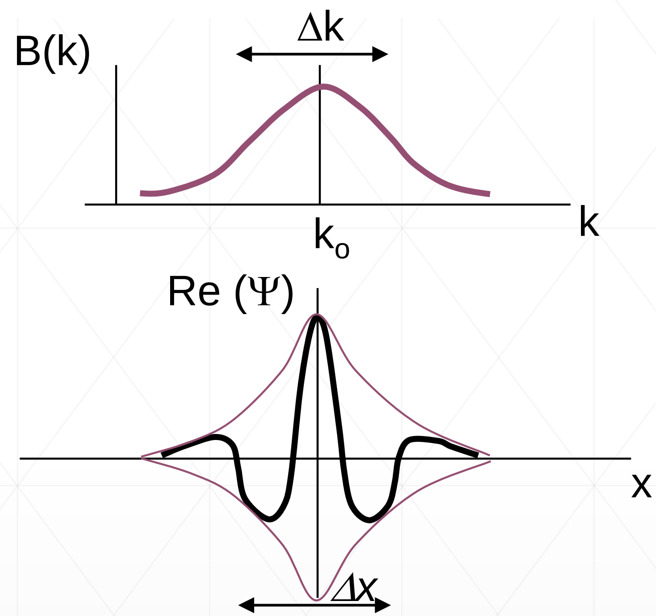
Zakładając, że nieokreśloność pędu jest tego samego rzędu co pęd, mamy $\Delta p = p = mv$.

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 położeni jest nieco mniejsze wynoszące: $\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{h}{4\pi}$ czyli

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





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

$$\Delta x \sim \frac{1}{\Delta k} \qquad \Delta p = \hbar \Delta k \qquad \Delta x \sim \frac{\hbar}{\Delta p}$$

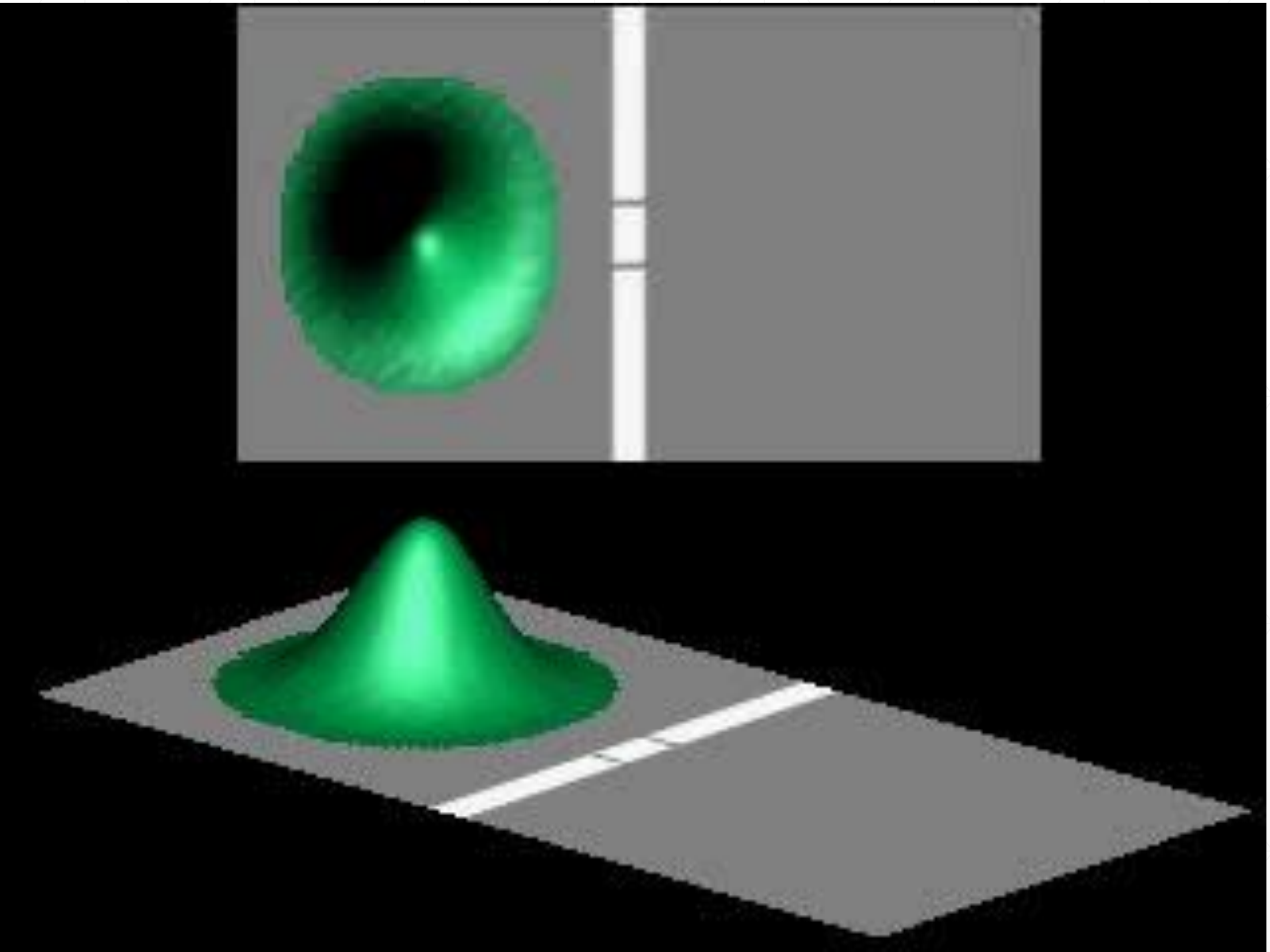
niemożliwe jest jednoczesne dokładne określenie wartości współrzędnej i pędu cząstki $\Delta x \cdot \Delta p_x \approx \hbar$

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

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

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

gdzie ΔE jest niepewnością pomiaru energii cząstki.



Dyfrakcja elektronu na dwóch szczelin.

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