

Elementy mechaniki kwantowej

- Mechanika kwantowa – co to jest?
- Fale materii – hipoteza de Broglie'a
- Funkcja falowa
- Równanie Schrödingera

Fale materii de Broglie'a (rok 1923)

- De Broglie zaproponował, że **każdy obiekt fizyczny** który posiada pęd **p** posiada także ***naturę falową*** gdzie długość fali wyraża się zależnością:

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



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

stała
Planck'a
pęd

- Obiekt z pędem może być: np. elektron, jądro atomowe, cały atom, piłka tenisowa,... oraz oczywiście foton.
- Dlaczego zatem rzadko obserwujemy efekty falowe materii wokół nas?
- Popatrzmy na dwa przykłady:

Np. długość fali materii **fotonu** o energii 1eV ($=1.62 \times 10^{-19} \text{ J}$) :

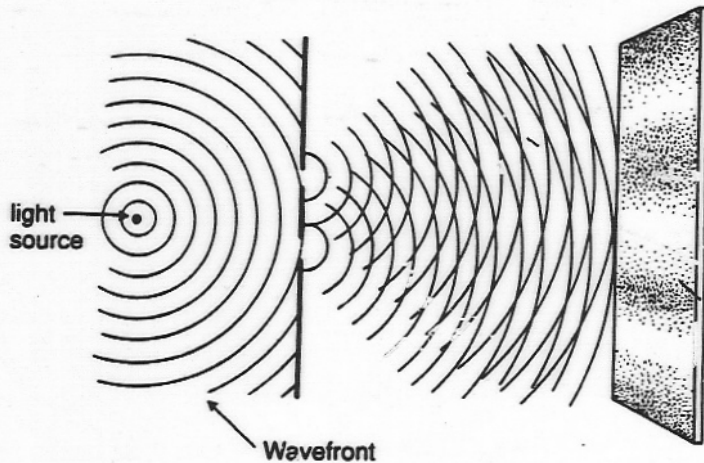
$$E_k = pc = \frac{hc}{\lambda} \quad \Rightarrow \quad \lambda = \frac{hc}{E} \approx \frac{6.63 \times 10^{-34} \text{ Js} \cdot 3 \times 10^8 \text{ m/s}}{1.6 \times 10^{-19} \text{ J}} \approx 1240 \text{ nm}$$

Długość fali materii **elektronu** o energii kinetycznej 1eV:

$$E_k = \frac{mv^2}{2} = \frac{p^2}{2m}$$
$$p = \sqrt{2mE_k}$$
$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2mE_k}} \approx 1.2 \text{ nm}$$

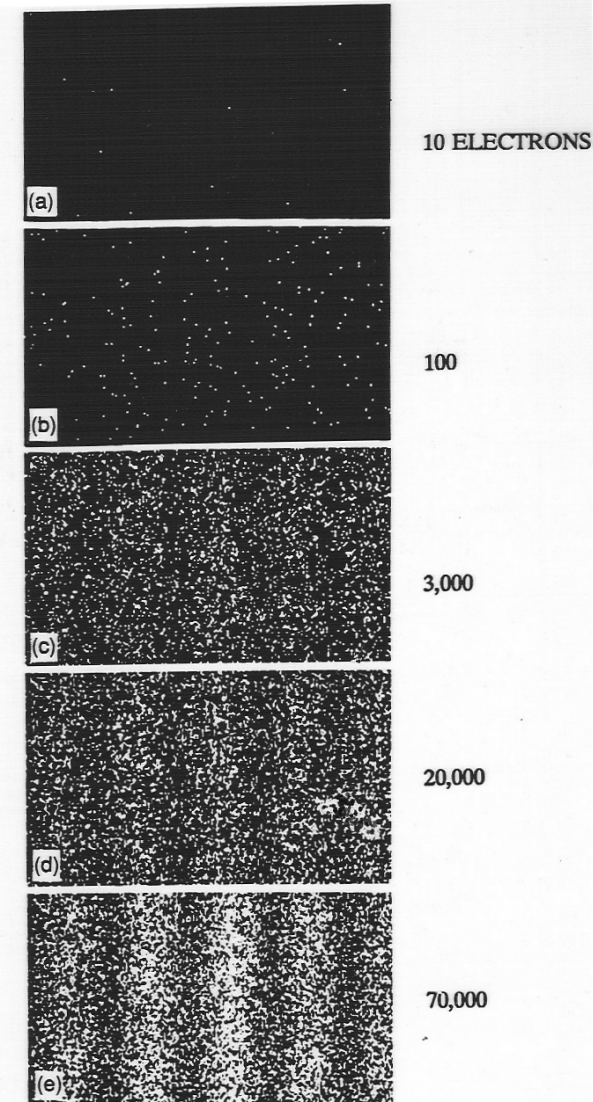
Fale materii de Broglie'a – czy je widać?

Tak ulega dyfrakcji i interferencji światło



- podobnie jak światło, elektrony też mogą ulegać dyfrakcji – czyli mają własności falowe !!!
- siatkę dyfrakcyjną stanowi np. folia aluminiowa (zatem dł. fali dla elektronu jest porównywalna z odległościami między atomami aluminium)
- im więcej elektronów przechodzi przez siatkę dyfrakcyjną, tym efekt dyfrakcyjny jest bardziej widoczny

Dyfrakcja i interferencja elektronów !!!



ELECTRON INTERFERENCE THROUGH A DOUBLE SLIT

Funkcja falowa

- Jak matematycznie opisać własności falowe materii? Czy są fale materii?
- Własności falowe materii (cząstek, układów cząstek) opisuje matematycznie pewna **funkcja falowa**

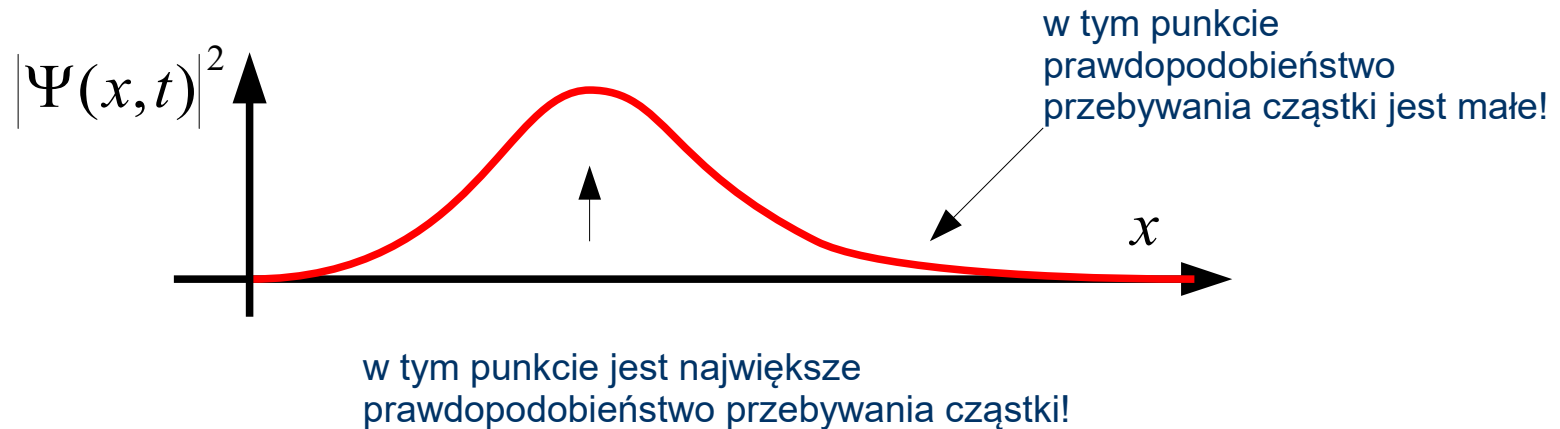
$$\Psi(x, t)$$

Tutaj upraszczamy i rozpatrujemy funkcję falową zależną tylko od jednej współrzędnej przestrzennej (ruch w jednym wymiarze)

- Funkcja falowa ma własności
 - zależy ona od współrzędnych przestrzennych i czasu
 - jest funkcją zespoloną
 - nie ma jednoznacznej interpretacji fizycznej (jest pewnym modelem zachowań falowych opisywanych obiektów)
- Ale moduł funkcji falowej ma interpretację fizyczną !!!
 - *Jeśli w pewnej chwili czasu t przeprowadza się pomiar położenia cząstki, z którą związana jest funkcja falowa $\Psi(x, t)$, to prawdopodobieństwo $P(x, t)dx$ tego, że cząstka znajdzie się pomiędzy współrzędną x a $x+dx$ jest wyrażone kwadratem modułu funkcji falowej*

$$P(x, t) = |\Psi(x, t)|^2 dx = \Psi(x, t) \cdot \Psi(x, t)^* dx$$

Funkcja falowa - interpretacja



- Wniosek: w mechanice kwantowej cząstka nie ma „jednoznacznego” położenia!!! Możemy mówić tylko o pewnym prawdopodobieństwie że cząstka przebywa w danym punkcie.
- Ale musimy przyjąć, że cząstka gdzieś w przestrzeni jest, więc jeśli obliczając prawdopodobieństwo znalezienia cząstki w całej przestrzeni powinniśmy otrzymać:

warunek normalizacji

$$\int_{-\infty}^{+\infty} P(x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi(x, t) \cdot \Psi(x, t)^* dx = 1$$

Jak znaleźć funkcję falową ?

Równanie Schrödinger'a dla poruszającej się cząstki

- Dla cząstki poruszającej się w polu sił o energii potencjalnej $V(\mathbf{x}, t)$ funkcja falowa musi spełniać następujące równanie Schrödinger'a

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(x, t) \right] \Psi(x, t)$$

liczba urojona, stała Planck'a / 2π funkcja falowa, masa operator Laplace'a, energia pot. cząstki

- To równanie jest postulatem (nie da się go wyprowadzić ściśle z innych praw fizyki)
- Rozwiązując to równanie dostajemy funkcje falowe, które zawierają dane-informacje dotyczące stanu tej cząstki (np. gdzie może się znajdować, jaki może mieć pęd)
- W mechanice kwantowej stan cząstki określa się podając funkcję falową, która jest wielkością zespoloną, określoną w dowolnej chwili czasu t i we wszystkich punktach przestrzeni
- Mechanika kwantowa daje nam narzędzie matematyczne do opisu zjawisk zachodzących w obiektach skali atomowej.

Równanie Schrödingera dla poruszającej się cząstki

Często energia potencjalna cząstki $V(x,t)$ nie zależy od czasu wtedy równanie S. upraszcza się i nazywa się stacjonarnym r. S.

wtedy funkcję falową można przedstawić:

$$\Psi(x,t) = \psi(x)e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$$

część „przestrzenna”

część zależna od czasu

a równanie S. ma postać:

**r. Schrödingera
niezależne od czasu**

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(x) \right] \psi(x) = E \psi(x)$$

masa cz. energia potencjalna energia cząstki

Nie wszystkie rozwiązania r. Schrödingera są dobre.

Narzucamy pewne warunki na funkcje falowe własne (i ich pochodne) i wartości własne (wartości energii).

Funkcje falowe i ich pochodne muszą być :

1. skończone (tzn. $\rightarrow 0$ dla $+\infty$ i $-\infty$,aby spełniony był warunek normalizacji)
2. jednoznaczne
3. i ciągłe

energia cząstki związana jest z częstotliwością funkcji falowej

$$E = \hbar\omega$$

$$\omega = E / \hbar$$

Cząstka poruszająca się w stałym potencjale

Założmy na początku, że $V = 0$
(cząstka jest swobodna) wtedy

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(x) = E \psi(x)$$

Proponujemy rozwiązanie (funkcje własne) typu

$$\psi(x) = A e^{ikx}$$

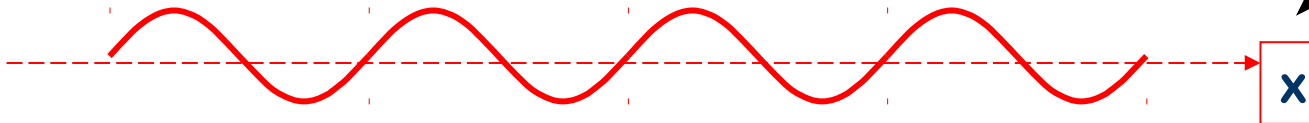
Podstawiając to do równania S. otrzymamy
warunek symbol k równy jest :

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

Funkcję falową cząstki można więc zapisać
(uwzględniając zależność od czasu)

$$\Psi(x) = A e^{ikx} e^{-\frac{E}{\hbar}t}$$

Rozwiązanie to przypomina falę biegnącą w kierunku x



tak wygląda fala płaska
 E – energia cząstki
 k – wektor falowy
 p – pęd cząstki $= \hbar k / (2\pi)$

Możliwe jest też, że cząstka poruszać się będzie w
kierunku przeciwnym

$$\Psi(x) = B e^{-ikx} e^{-\frac{E}{\hbar}t}$$

Rozwiązaniem może być też kombinacja

$$\Psi(x) = A e^{ikx} e^{-\frac{E}{\hbar}t} + B e^{-ikx} e^{-\frac{E}{\hbar}t}$$

Cząstka poruszająca się w stałym potencjale

Stałe A i B można spróbować wyznaczyć z warunku normalizacji

Jaka jest gęstość prawdopodobieństwa ?

$$P(x, t) = \Psi(x, t) \cdot \Psi(x, t)^* dx = A^* e^{-i(kx - \frac{E}{\hbar}t)} A e^{i(kx - \frac{E}{\hbar}t)} = A^* A$$

Jak znormalizować tę funkcję?

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi(x, t) \cdot \Psi(x, t)^* dx = A^* A \int_{-\infty}^{+\infty} dx = 1 \quad \Rightarrow \quad A^* A = 0$$

???

coś jest nie tak,

Cząstka może być wszędzie z jednakowym prawdopodobieństwem

Wy tłumaczenie:

Przyjęto nierealistyczną postać funkcji falowej – nieskończenie rozciągłą falę

Funkcja falowa powinna mieć raczej kształt „paczki falowej” – złożenie wielu fal płaskich o różnych wektorach falowych k

Okazuje się że „paczka falowa” jest też rozwiązaniem r. S.

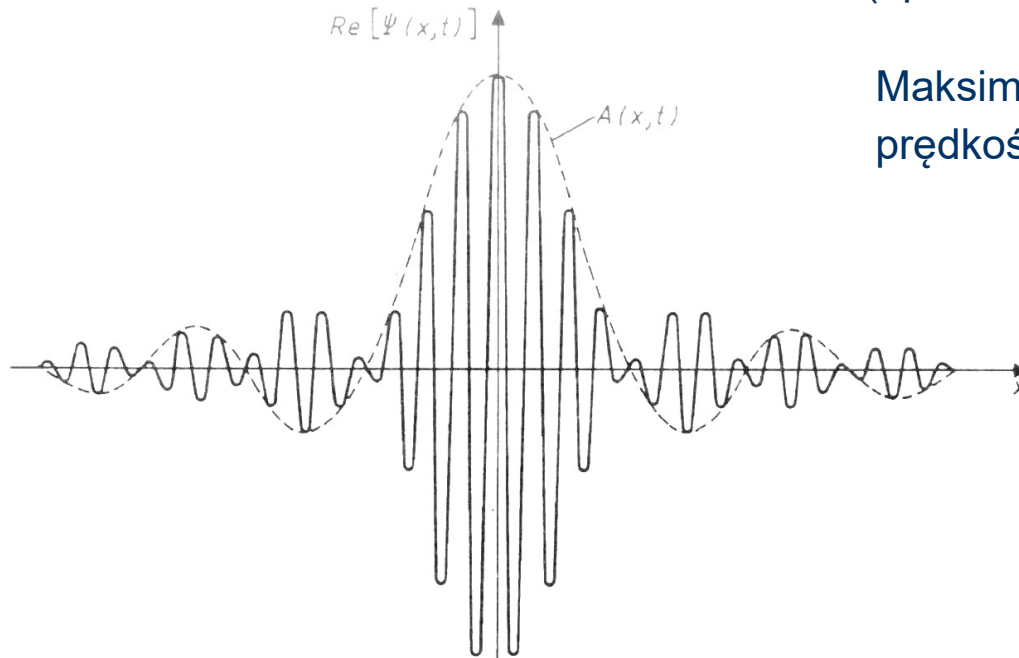
Cząstka poruszająca się w stałym potencjale

Paczka falowa ?

Jest złożeniem wielu fal o różnych wektorach falowych k

(np. w zakresie $k - \Delta k < k < k + \Delta k$)

Maksimum pakietu porusza się z prędkością cząstki v_{cz}



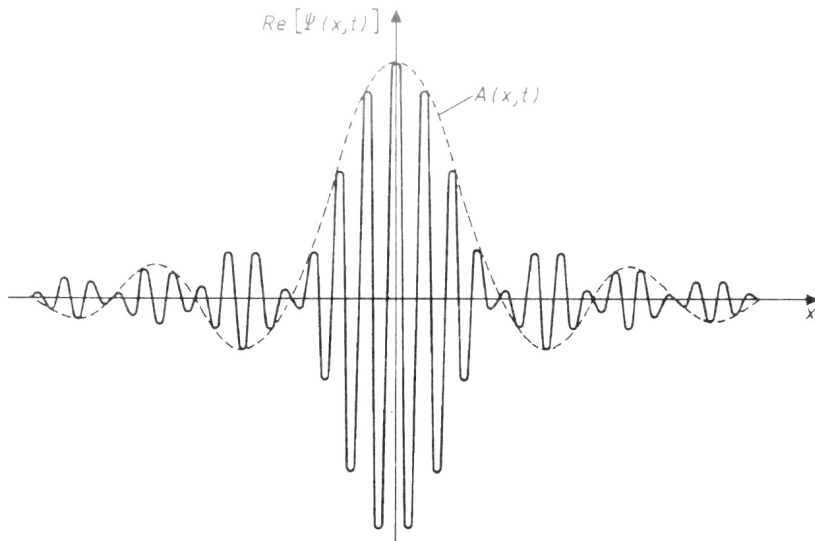
Paczka falowa spełnia warunek, że cząstka powinna być choć w przybliżeniu zlokalizowana, ale jej pęd (który jest związany z wektorem falowym k) nie jest dokładnie określony – zawiera się w zakresie

$$p - \Delta p < p < p + \Delta p$$

$$\text{ponieważ : } p = \hbar k / (2\pi)$$

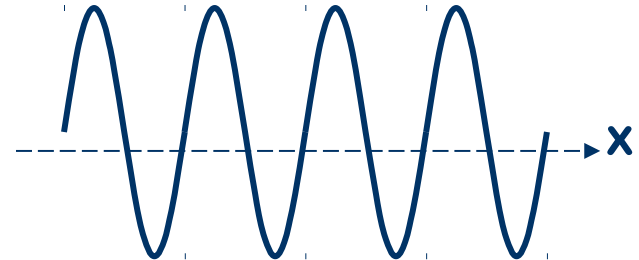
Cząstka poruszająca się w stałym potencjale

Paczka falowa



- położenie cząstki bardziej lokalizowane
- nie znana dokładna wielkość wektora falowego k (bliżej nieokreślony jest pęd p)

Fala płaska



- położenie cząstki nieokreślone
- znana dokładna wielkość k
więc pęd cząstki znany jest dokładnie
 $p = \hbar k / (2\pi) = \hbar / (\lambda 2\pi)$

Zasada nieoznaczoności Heisenberga

W 1927 Heisenberg odkrył, że ta niepewność co do określenia pędu i położenia cząstek ma zasadnicze znaczenie w fizyce kwantowej

Jeśli pomiar położenia cząstki jest wykonany z dokładnością Δx i jednocześnie można zmierzyć pęd cząstki w kierunku x z dokładnością Δp to iloczyn tych wielkości nie może być mniejszy niż $h/4\pi$

$$\Delta x \Delta p_x \geq \frac{h}{4\pi}$$

Niemożliwe jest jednoczesne dokładne wyznaczenie położenia i pędu cząstki

Zasada nieoznaczoności Heisenberga

Piłka o masie 50g porusza się z prędkością 30.0 m/s. Jeśli prędkość mierzona jest z dokładności 0.10% jaka jest minimalna niepewność pomiaru położenia piłki

Piłka jest obiektem nie-relatywistycznym. Zatem jej pęd $p = mv$ i jego niepewność pomiarowa wynosi

Dane:

$v = 30 \text{ m/s}$
 $\Delta v = 0.10\%$
 $m = 50.0 \text{ g}$

$$\begin{aligned}\Delta p &= m(\Delta v) = m(\delta v \cdot v) \\ &= (50.0 \times 10^{-2} \text{ kg})(1.0 \times 10^{-3} \cdot 30 \text{ m/s}) = 1.5 \times 10^{-2} \text{ kg} \cdot \text{m/s}\end{aligned}$$

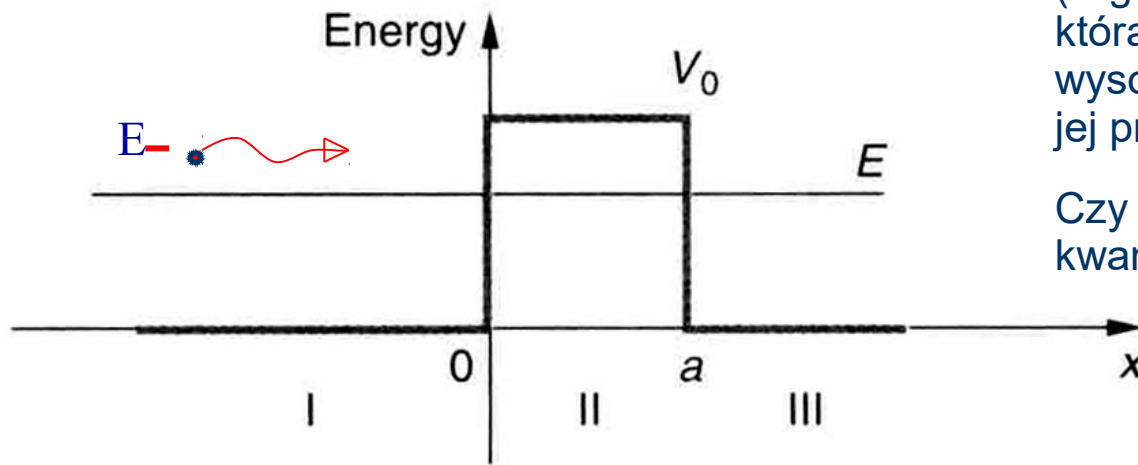
szukane:

$\Delta x = ?$

$$\Delta x \geq \frac{h}{4\pi(\Delta p)} = \frac{6.63 \times 10^{-24} \text{ J} \cdot \text{s}}{4\pi(1.5 \times 10^{-3} \text{ kg} \cdot \text{m/s})} = 3.5 \times 10^{-32} \text{ m}$$

Przykład : Częstka „przechodząca” przez barierę

Rozważamy ruch cząstki w polu o potencjale przedstawionym w postaci bariery (przy czym $V_0 > E$)



(Wg mech. klasycznej np. kulka która pędzi na przeszkodę o dużej wysokości. Kulka nie jest w stanie jej przeskoczyć).

Czy tak samo jest w mechanice kwantowej?

ZAŁOŻENIA

Dla każdego z obszarów konstruujemy równanie

dla obszaru $x < 0$ i $x > a$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(x) = E \psi(x)$$

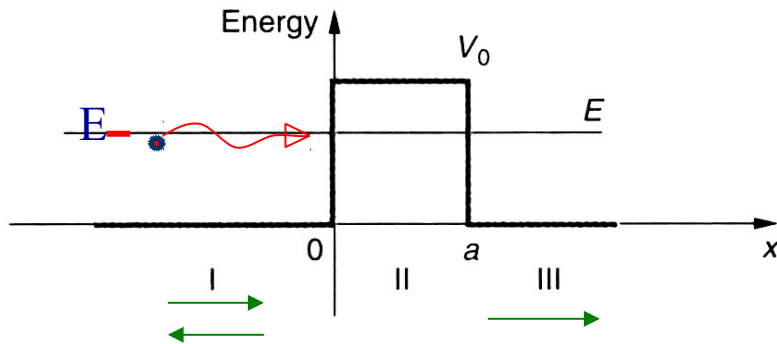
dla obszaru $0 < x < a$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(x) = (E - V_0) \psi(x)$$

Bariera potencjału

ZAŁOŻENIA

Rozwiązania poszukujemy w postaci funkcji



$$\psi_I(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x} \quad \text{dla } x < 0$$

$$\psi_{II}(x) = Ce^{ik_2x} + De^{-ik_2x} \quad \text{dla } 0 < x < a$$

$$\psi_{III}(x) = Fe^{ik_1x} + Ge^{-ik_1x} \quad \text{dla } x > a$$

Trzeba uwzględnić fakt, że w obszarze $x > a$ nie powinno być fali odbitej, zatem $G=0$

gdzie k daje się wyznaczyć jako

$$k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

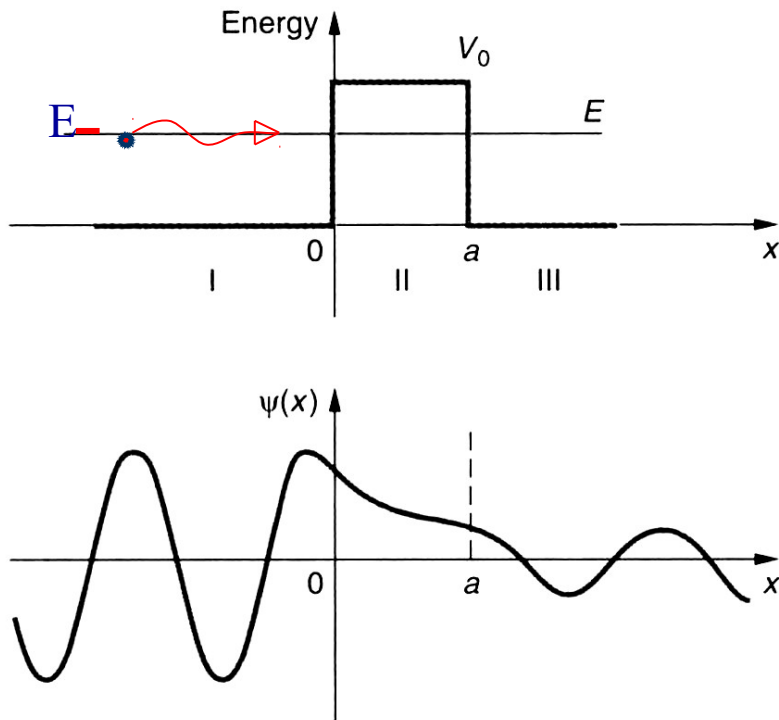
$$k_2 = \frac{\sqrt{2m(E - V_0)}}{\hbar}$$

Uwaga! Mimo że stwierdziliśmy, że fala płaska niezbyt dobrze opisuje cząstkę (lepsza jest paczka falowa) to jednak dla uproszczenia nadal próbujemy to rozwiązanie - przecież paczka falowa jest kombinacją pewnej liczby fal płaskich, zatem i dla paczki falowej tok rozumowania będzie bardzo podobny.

Bariera potencjału

ZAŁOŻENIA

Aby wyznaczyć stałe A,B,C,D należy wykorzystać warunki zszycia funkcji własnych i ich pochodnych



$$\psi_I(0) = \psi_{II}(0)$$

$$\psi_{II}(a) = \psi_{III}(a)$$

$$\frac{d\psi_I(0)}{dx} = \frac{d\psi_{II}(0)}{dx}$$

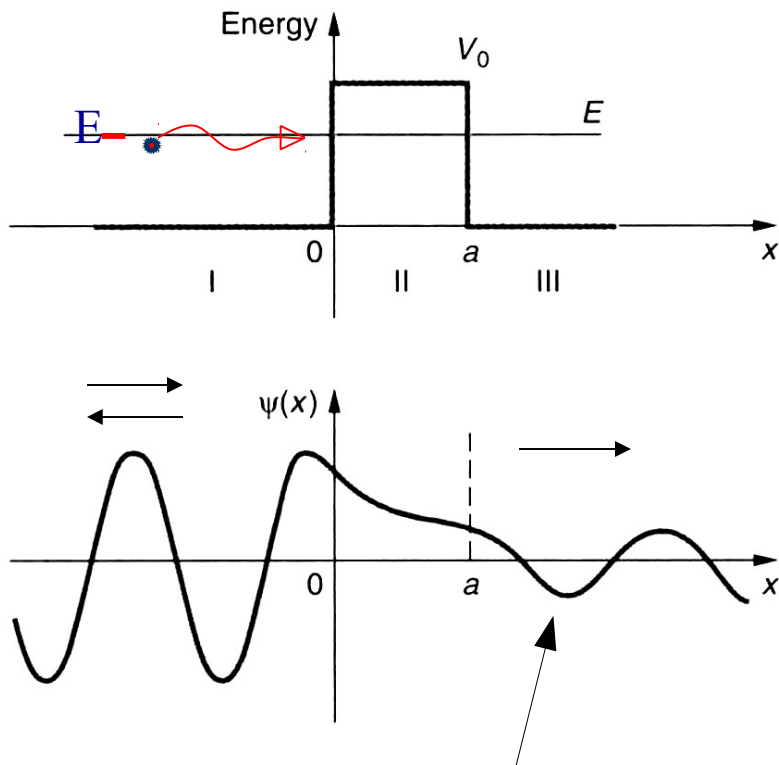
$$\frac{d\psi_{II}(a)}{dx} = \frac{d\psi_{III}(a)}{dx}$$

Te 4 równania dają możliwość wyznaczenia stałych A,B,C,D,F.

Parametry A,B,C,F nie są równe 0

Bariera potencjału

WNIOSKI



Funkcja falowa (a więc także jej moduł) nie zanika za barierą (jest „słabsza”, ale istnieje skończone prawdopodobieństwo znalezienia cząstki poza barierą)

Okazuje się że istnieje pewne prawdopodobieństwo przejścia cząstki przez barierę potencjału, pomimo że energia cząstki jest mniejsza od wysokości bariery!

Możliwość przechodzenia przez barierę maleje ze wzrostem szerokości bariery.

Współczynnik „przejścia” przez barierę jest proporcjonalny do

$$T \approx e^{-2k_2 a} \approx e^{\frac{-4\pi\sqrt{2m(V_0-E)}}{h}a}$$

Zależy więc od **m** masy, różnicy **(V-E)** oraz szerokości bariery **a**

Jest to efekt czysto kwantowy, sprzeczny z fizyką klasyczną.

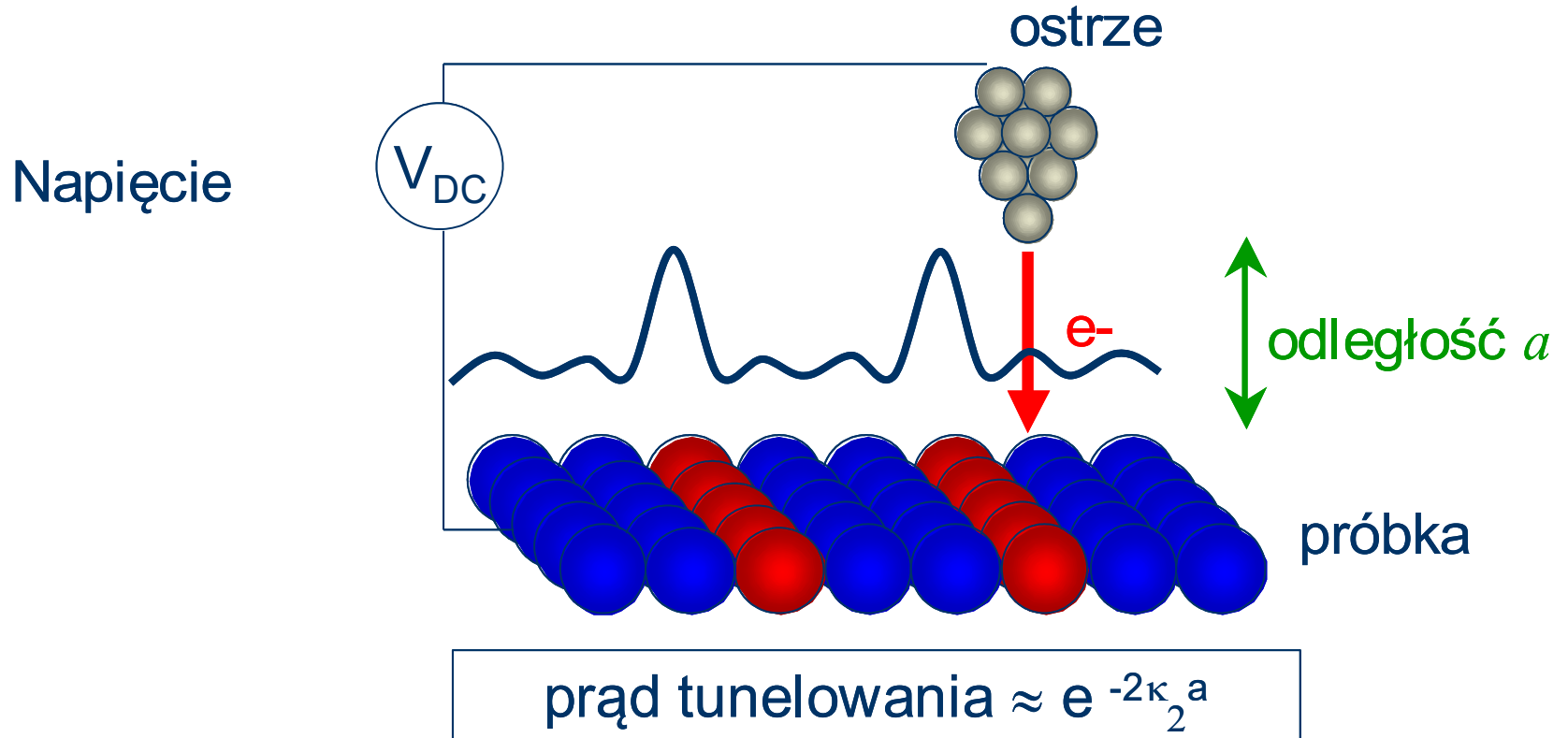
Zjawisko to nosi nazwę **przenikania przez barierę** lub **zjawiska tunelowego**



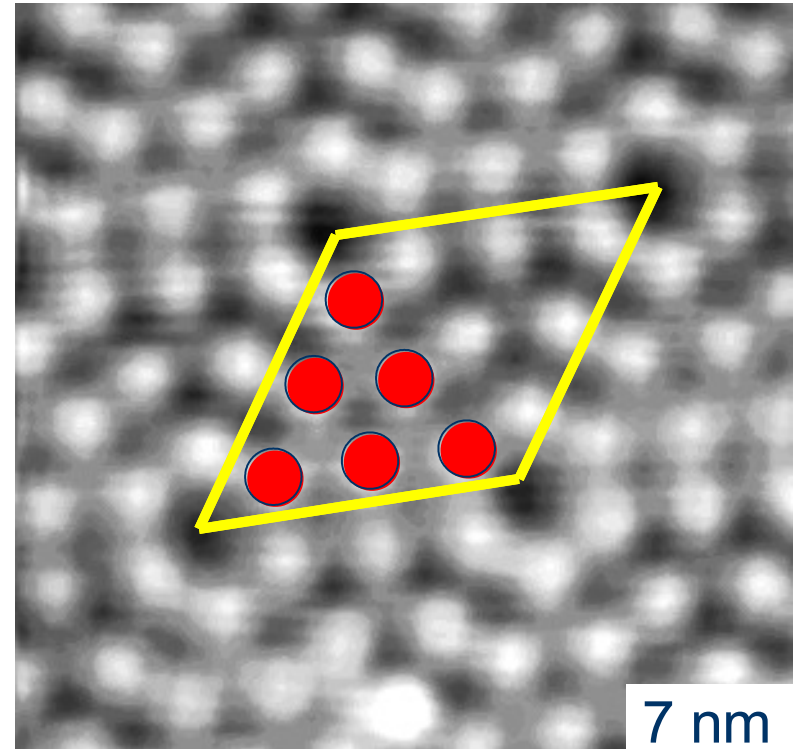
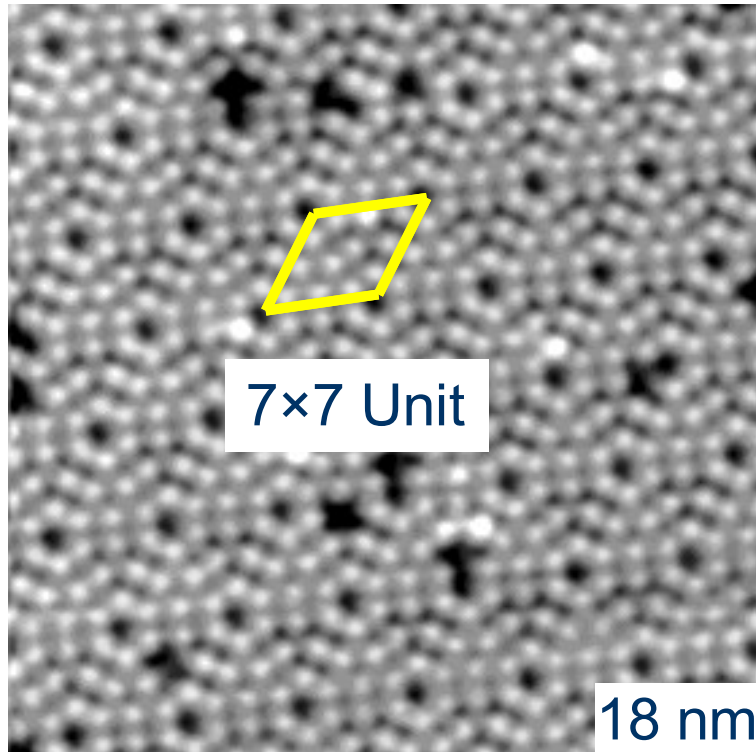
Pytanie?

- ♦ Czym różni się mechanik samochodowy od mechanika kwantowego ?
- ♦ Mechanik kwantowy potrafi wjechać samochodem do garażu nie otwierając bramy!

Skaningowy mikroskop tunelowy



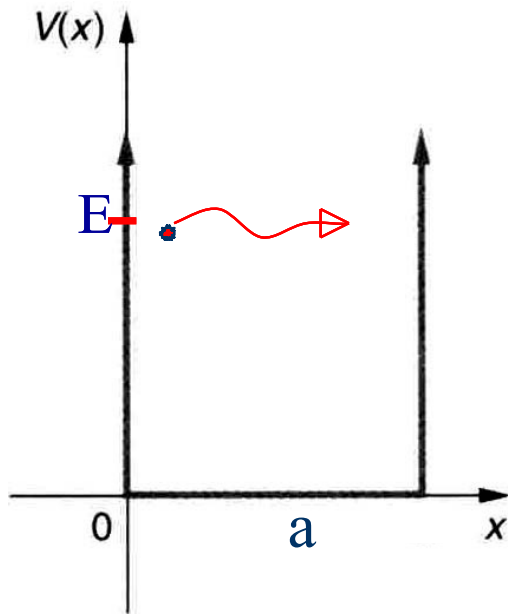
Skaningowy mikroskop tunelowy



● = atom

Przykład : Częstka w studni potencjału

Mamy studnię potencjału o nieskończonej głębokości



$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{dla } 0 < x < a \\ \infty & \text{dla } x \leq 0 \text{ i } x \geq a \end{cases}$$

Fizycznie odpowiada to sytuacji gdy cząstka zamknięta jest w studni o doskonale odbijających ściankach, np. elektron uwięziony w pewnym obszarze o wielkości a

ZAŁOŻENIA

Ponieważ $V(x) = \infty$ dla $x > a$ i $x < 0$ to funkcje własne muszą być równe 0

$$\psi(x) = 0 \text{ dla } x > a \text{ i } x < 0$$

Wewnątrz studni równanie S. ma postać

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(x) = E \psi(x)$$

Cząstka w studni potencjału

Rozwiązania tego równania są opisane funkcją

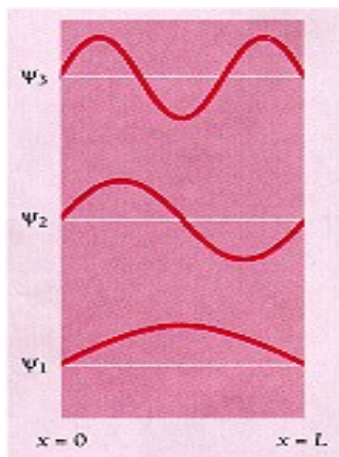
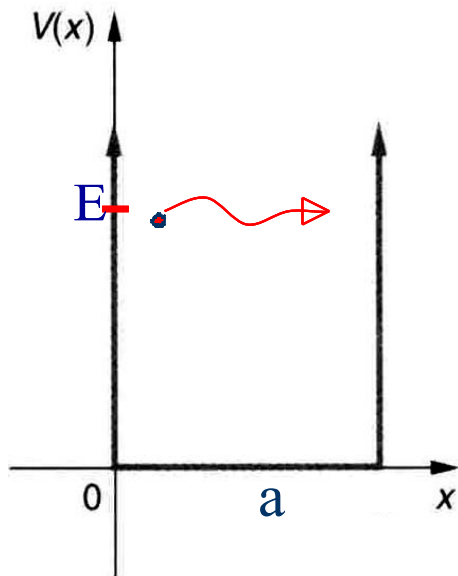
$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \quad \text{gdzie} \quad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

Z warunków brzegowych i ciągłości funkcji wynika

$$0 = A + B \quad \text{czyli} \quad A = -B$$

zatem

$$\psi(x) = A(e^{ikx} - e^{-ikx}) = C \sin(kx) = C_n \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)$$



przybiera postać funkcji stojącej.

Możemy dopuścić tylko takie wartości

Zatem mamy tu bardzo ważny wniosek.

ENERGIA JEST SKWANTOWANA!

$n=1,2,3\dots$

$$k_n a = n \pi$$

$$E_n = \frac{n^2 h^2}{8ma^2}$$

Cząstka w studni potencjału - wnioski

ENERGIA JEST KWANTOWANA!

Cząstka może mieć tylko określone energie →

$$E_n = \frac{n^2 h^2}{8ma^2}$$

(jej energia nie może przyjmować dowolnych wartości)

Każdej energii odpowiada pewna funkcja falowa



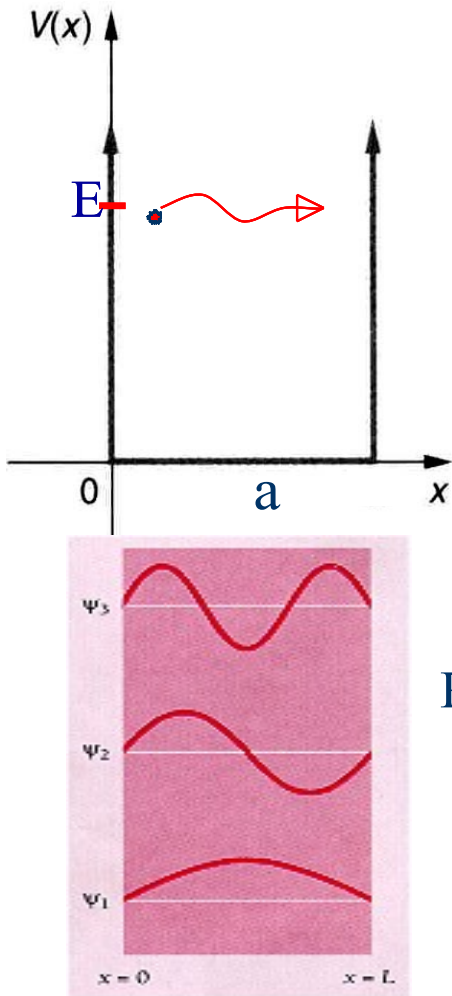
$$\psi(x) = C_n \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)$$

$$k_n a = n\pi$$

$$n=1,2,3\dots$$

Po przeprowadzonej normalizacji:

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)$$



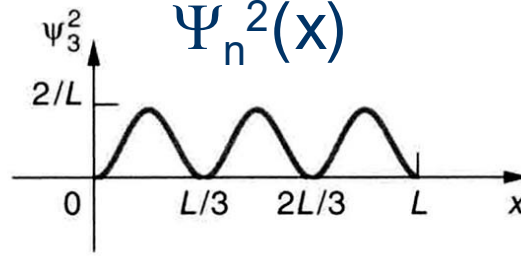
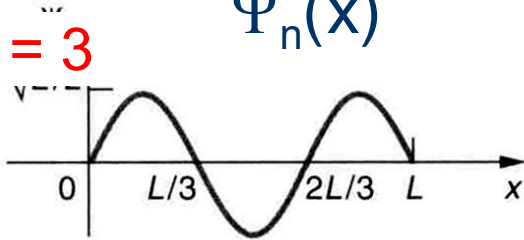
Cząstka w studni potencjału - wnioski

$\Psi_n(x)$

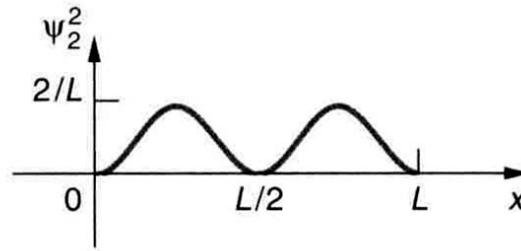
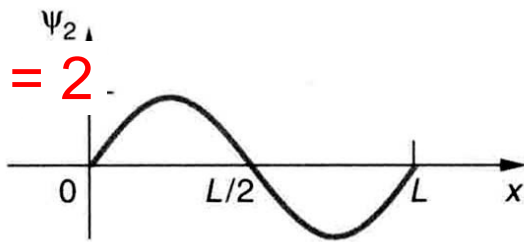
$\Psi_n^2(x)$

Energia kwantowana

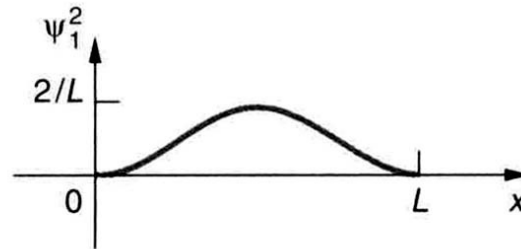
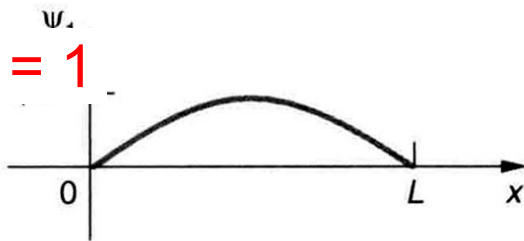
$n = 3$



$n = 2$

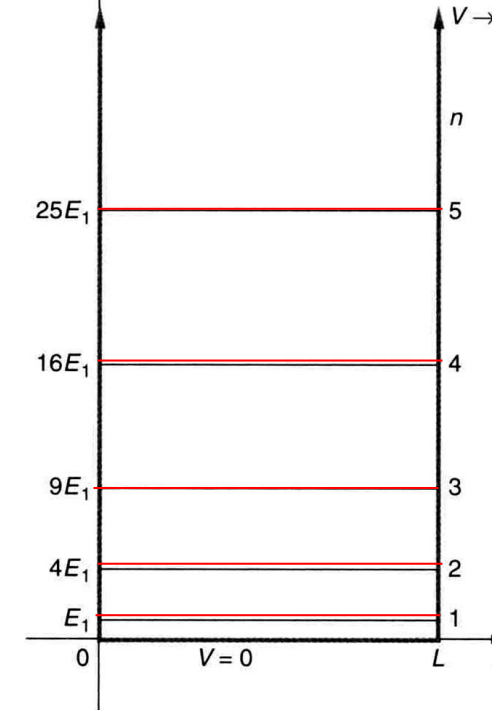


$n = 1$



postać funkcji falowej dla studni potencjału

gęstość prawdopodobieństwa
znalezienia cząstki



„poziome energetyczne” – cząstka ma tylko określone energie

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)$$

$$E_n = \frac{n^2 h^2}{8ma^2} = n^2 \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2}$$

Znaczenie: np. Jeśli elektron będzie uwięziony w dość małym obszarze to będzie miał tylko “dyskretne” wartości energii. Tak np. jest w atomie gdzie elektron wiązany jest siłą elektrostatyczną z jądrem atomowym