# 6.3. Квантова механіка

Відчуваю на собі вплив квантової механіки: працюю, тільки тоді, коли за мною спостерігають

- 6.3.1. Корпускулярно-хвильовий дуалізм речовини. Гіпотеза де Бройля.
- 6.3.2. Експериментальні докази хвильових властивостей мікрочастинок.
- 6.3.3. Співвідношення невизначеностей Гейзенберга. Межі застосовності квантової механіки.
- 6.3.4. Хвильова функція та її фізичний зміст. Рівняння Шредінгера.

## 6.3.1. Корпускулярно-хвильовий дуалізм речовини. Гіпотеза де Бройля.

**Луї де Бройль** запропонував аксіоматичну квантову теорію, яка лягла в основу хвильової механіки, зокрема **рівняння Шредінгера**, та полягала у розповсюдженні основних законів квантової теорії світла *Планка* - *Айнштайна* на рух **матеріальних частинок** певної маси.

Гіпотеза де Бройля (1923 р.) закріплювала уявлення про матеріальну **єдність** світу.

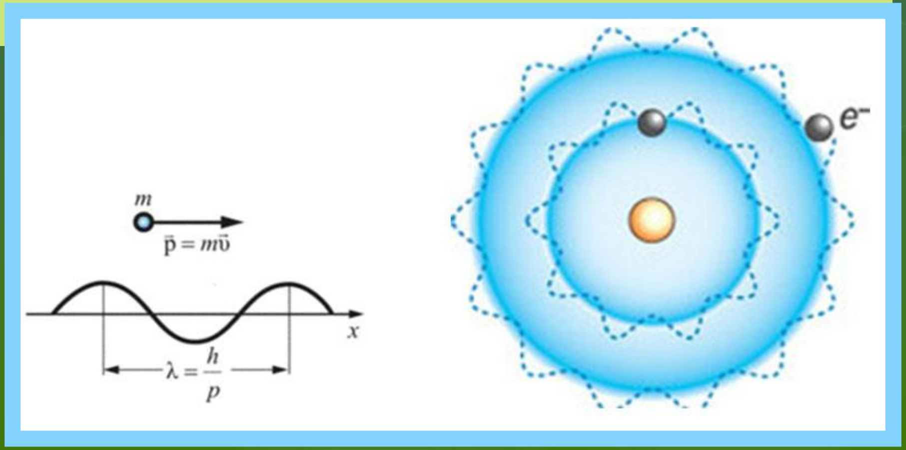
**Гіпотеза де Бройля:**

**корпускулярно-хвильовий дуалізм притаманний не тільки електромагнітному випромінюванню, а й матерії в цілому**.

З цієї гіпотези слідує:

1. Частинкам речовини (корпускулам) також притаманний ***хвильовий процес***.
2. Частинки не випромінюють електромагнітні хвилі! Отже хвилі де Бройля ***не електромагнітної природи***.
3. З цим хвильовим процесом пов'язують ***хвилю ймовірності знаходження частинки в кожній точці простору.***
4. ***Довжина хвилі частинок*** визначається формулою де Бройля.

$$\lambda_{дБ} = \frac{h}{p}$$



# Хвилі де Бройля

## 1. Для тіла масою 1 кг, швидкість 1 м/с

$$\lambda_{\text{дБ}} = \frac{h}{m\upsilon} = 6,63 \cdot 10^{-34}\,\text{м}$$

*класична механіка*

## 2. Для електрона швидкість 10^5 м/с

$$\lambda_{\text{дБ}} = \frac{h}{m\upsilon} = \frac{6,63 \cdot 10^{-34}}{9,1 \cdot 10^{-31} \cdot 10^{5}} \approx 72,9 \cdot 10^{-10}\,\text{м}$$

*квантова механіка*

# Хвильова функція

Де Бройль зв'язав з частинкою, яка вільно рухається плоску хвилю, зміст якої спочатку був незрозумілим. Плоска хвиля, яка рухається у напрямку x, описується рівнянням плоскої хвилі:

$$\xi = A\cos(\omega t - kx) = A\cos\left(\omega t - {2\pi x}/{\lambda}\right)$$

Візьмемо $\xi = \psi$ $\qquad \lambda = {h}/{p} = {2\pi\hbar}/{p}$

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

$$\omega = 2\pi\nu; \quad E = h\nu = 2\pi\hbar\nu = \hbar\omega$$

тоді **рівняння хвилі Де Бройля**

$$\psi = A\cos\left[\frac{1}{\hbar}(Et - px)\right]$$

**або в експоненціальній формі**

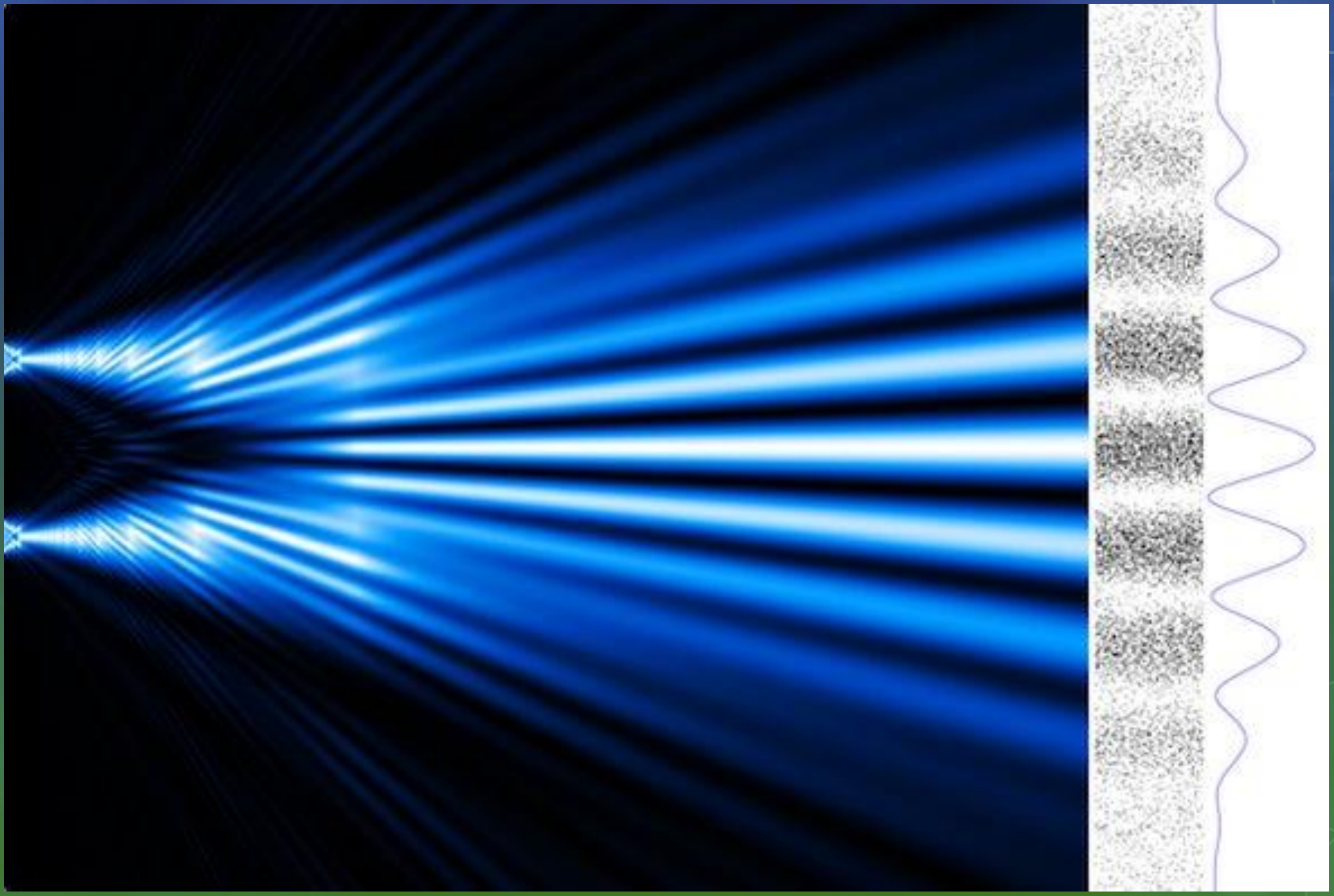
$$\psi = A\exp\left[\left({i}/{\hbar}\right)(px - Et)\right]$$

# Луї де Бройль
# 1923

15.08.1892
09.03.1987

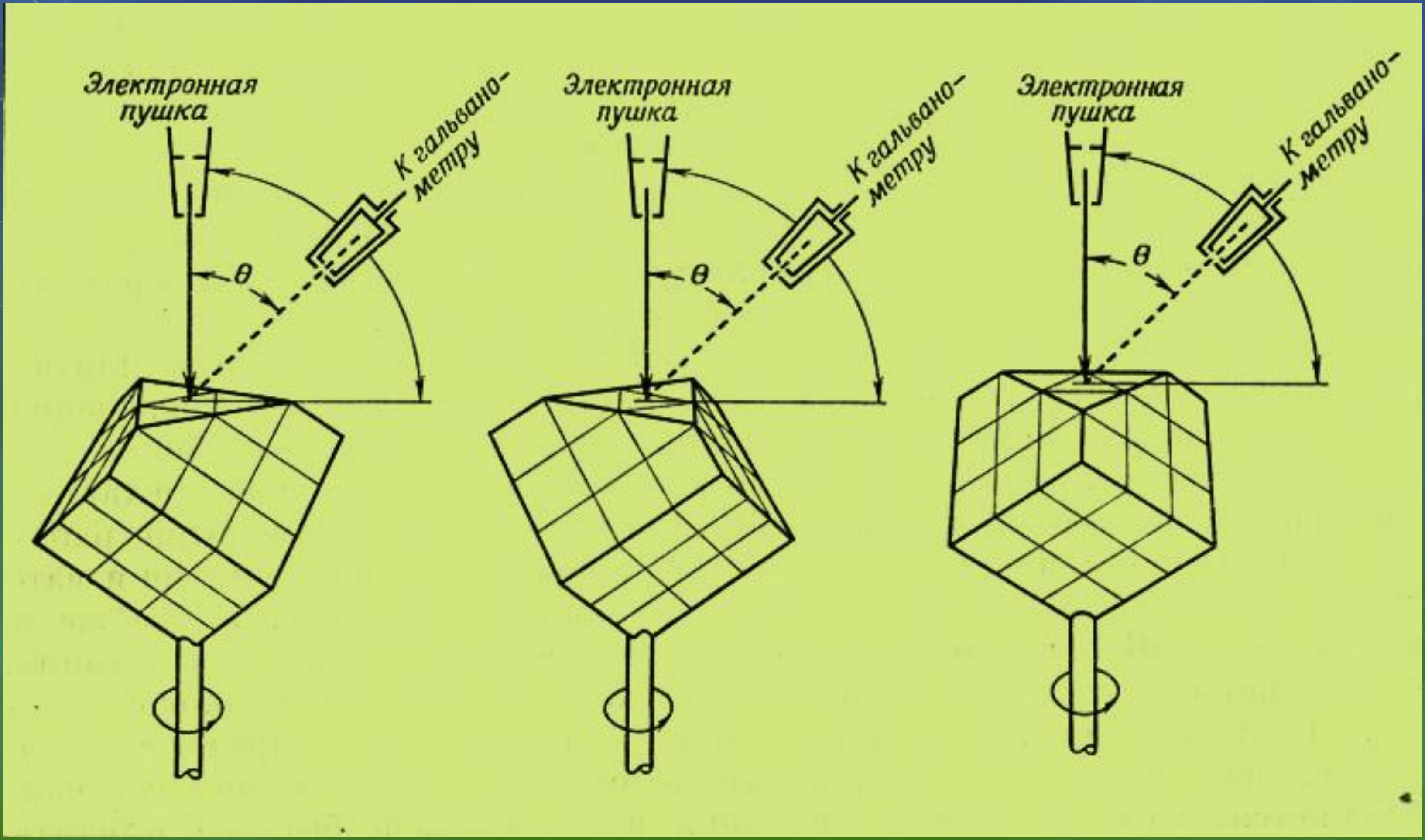
- Сформулював гіпотезу про хвильові властивості матеріальних частинок (хвилі де Бройля або хвилі матерії), що поклала початок розвитку хвильової механіки
- Запропонував оригінальну інтерпретацію квантової механіки (теорія хвилі-пілота, теорія подвійного рішення)
- Розвивав релятивістську теорію частинок з довільним спином, зокрема фотонів (нейтринна теорія світла)
- Займався питаннями радіофізики, класичною і квантовою теоріями поля, термодинаміки та інших розділів фізики

# 6.3.2. Експериментальні докази хвильових властивостей мікрочастинок



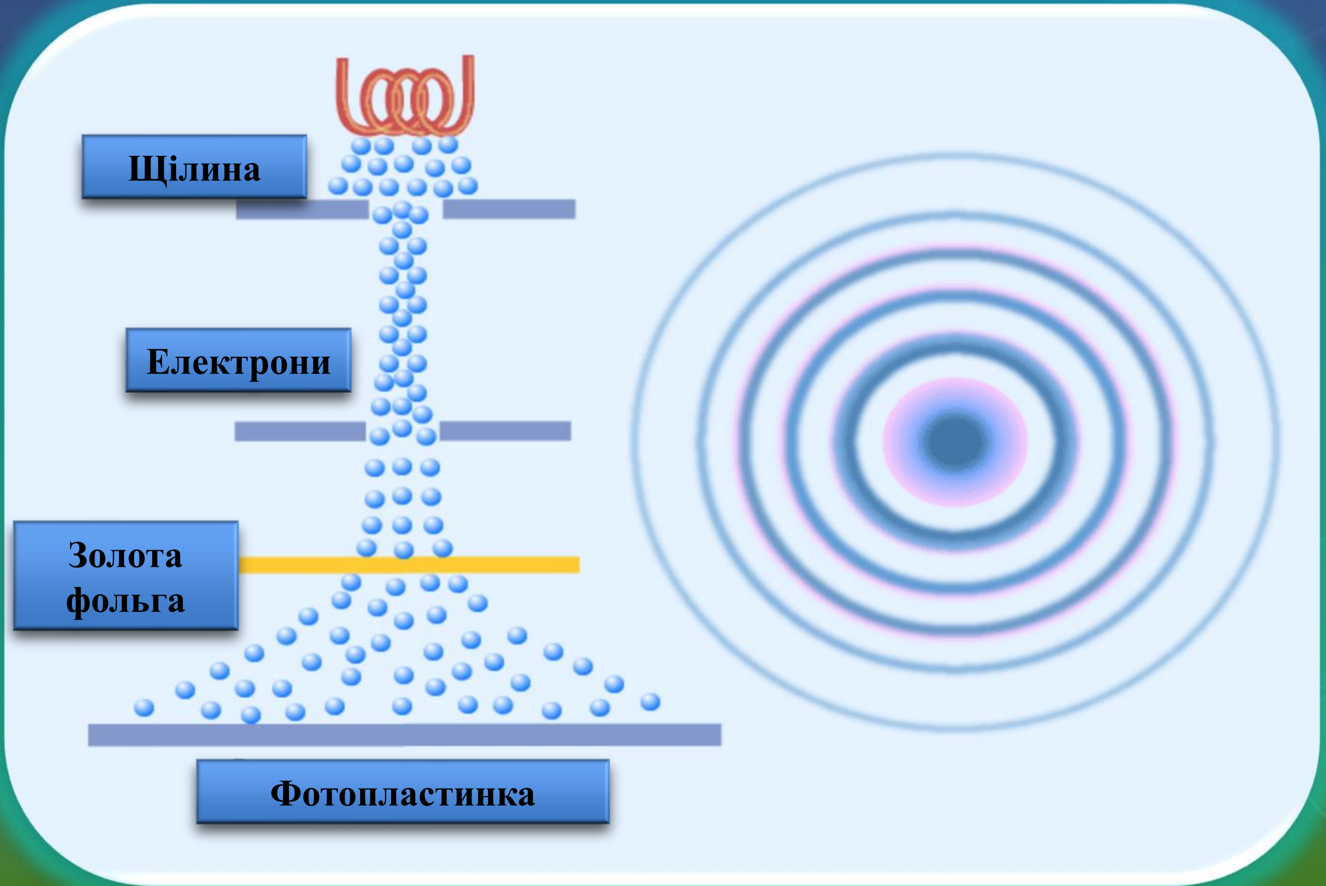
# 1927 р. американські фізики К. Девиссон і Л. Джермер

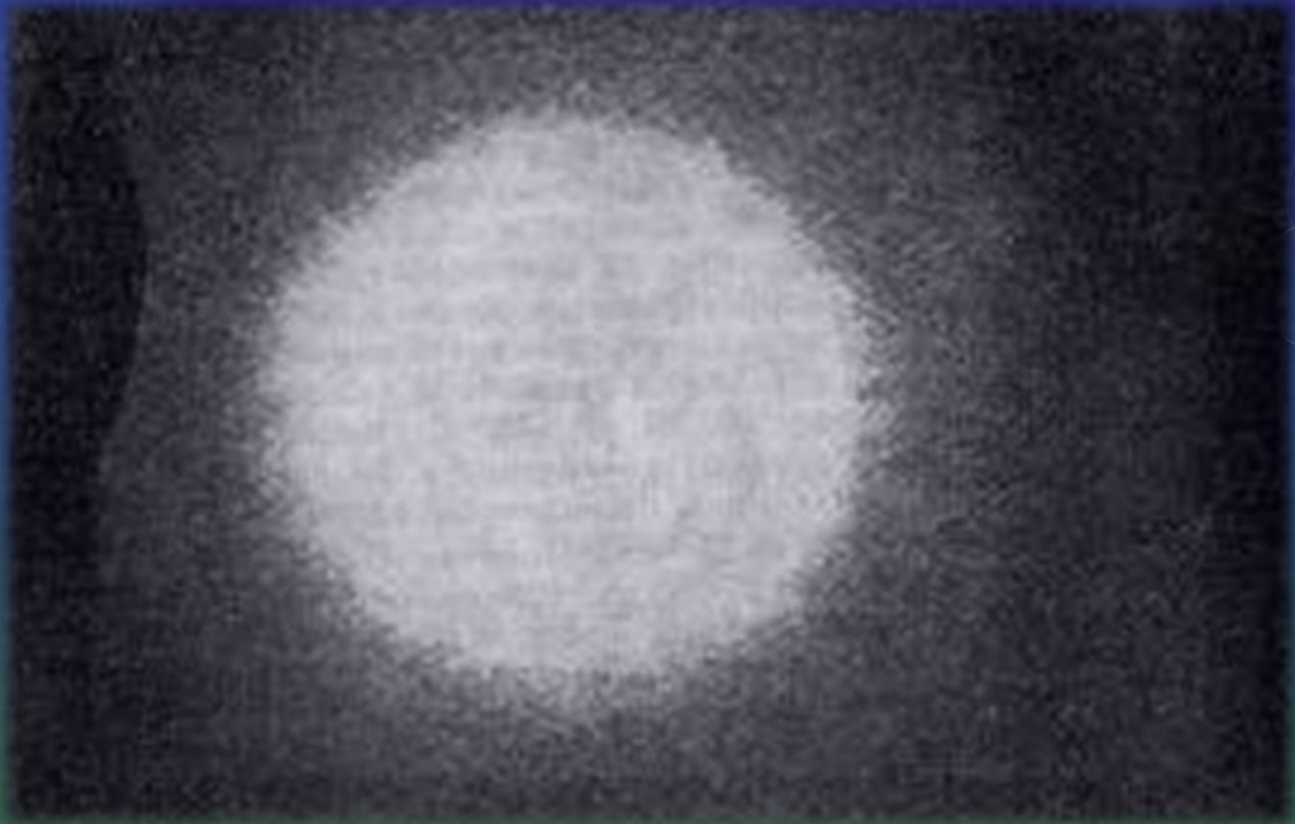
## Дифракція електронів на кристалі нікелю (дифракція Вульфа – Бреггів)



# Дифракція електронів на тонкій полікристалічній пластині золота

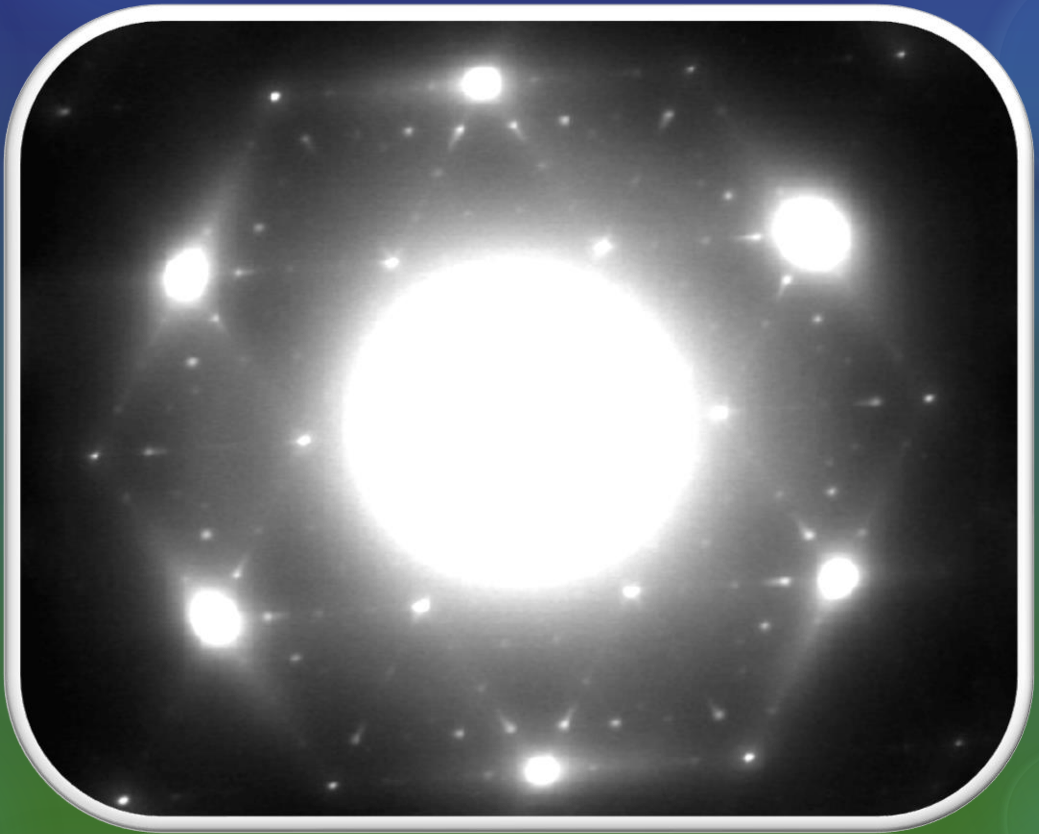
**1928 р. англійський фізик Г. Томсон**





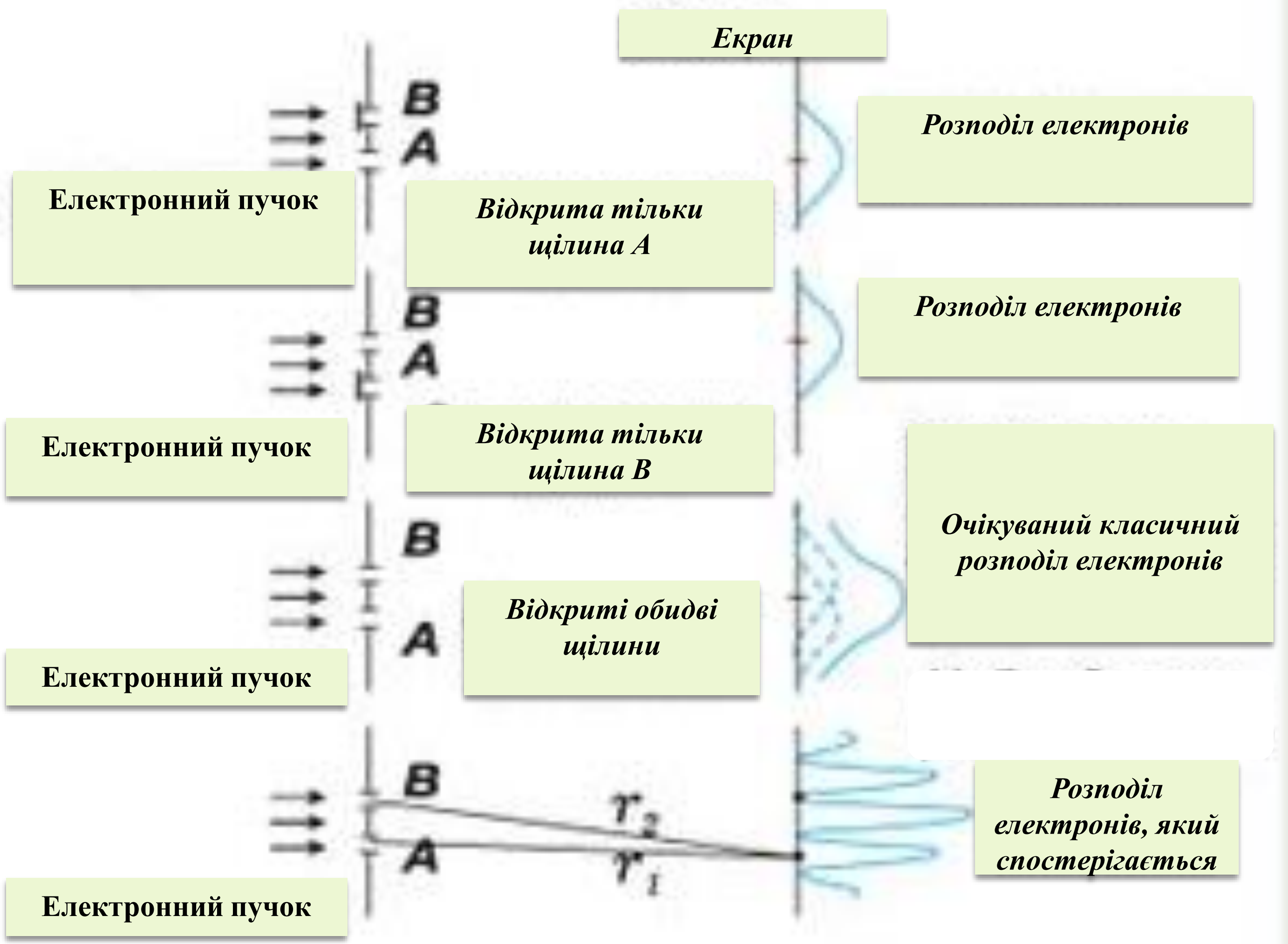
Перша фотографія дифракції електронів, яку отримали Дж. П. Томсон і А. Рід, направляючи електрони на тонку целулоїдну плівку. (Nature, **1927**.)
Світлова пляма в центрі оточена кільцями, що нагадують гало довкола Сонця

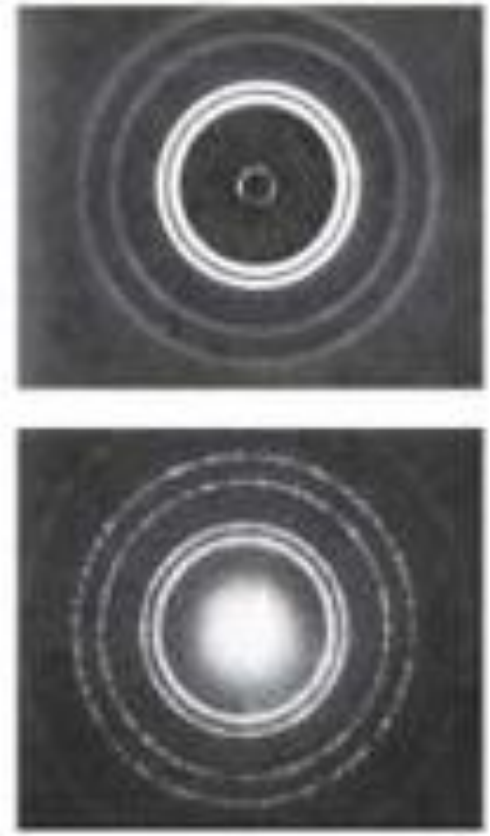
# Дифракція окремих !!! електронів – В.А. Фабрикант 1949



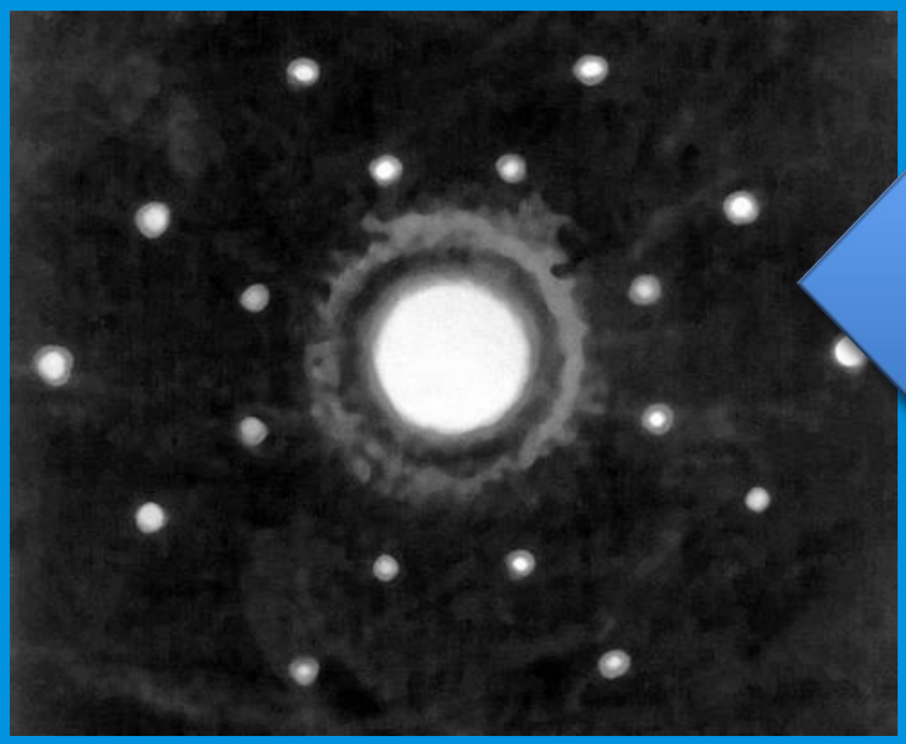
Електрон, так само як і фотон, інтерферує сам із собою!

# Схема досліду дифракції електронів



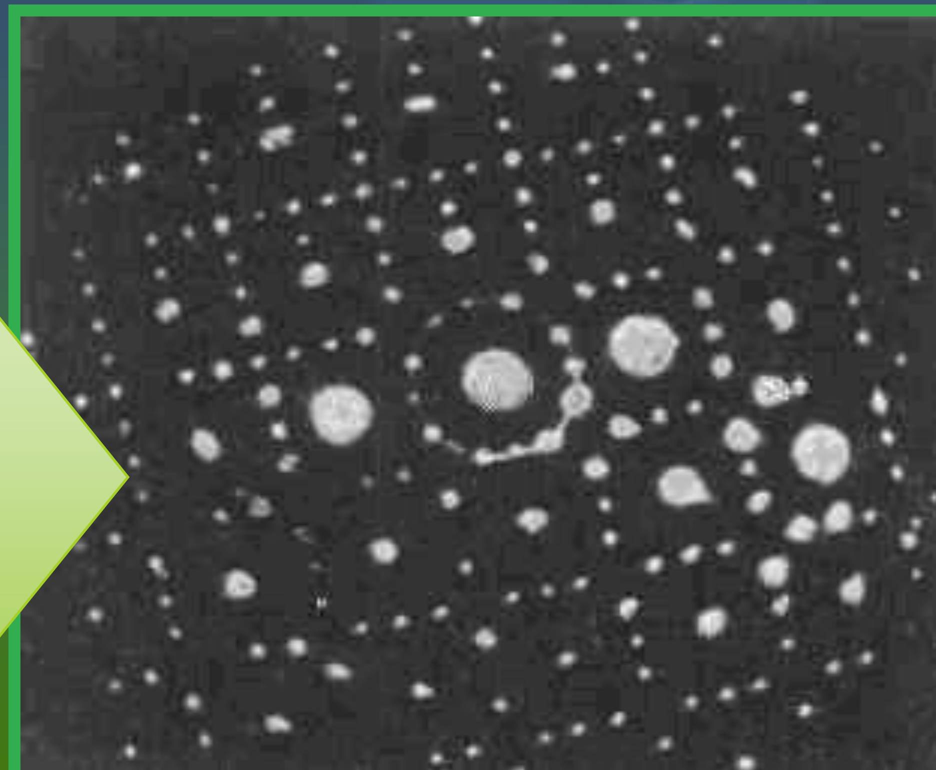



Дифракція рентгенівських променів (вгорі) та електронних пучків (знизу) на кристалі алюмінію

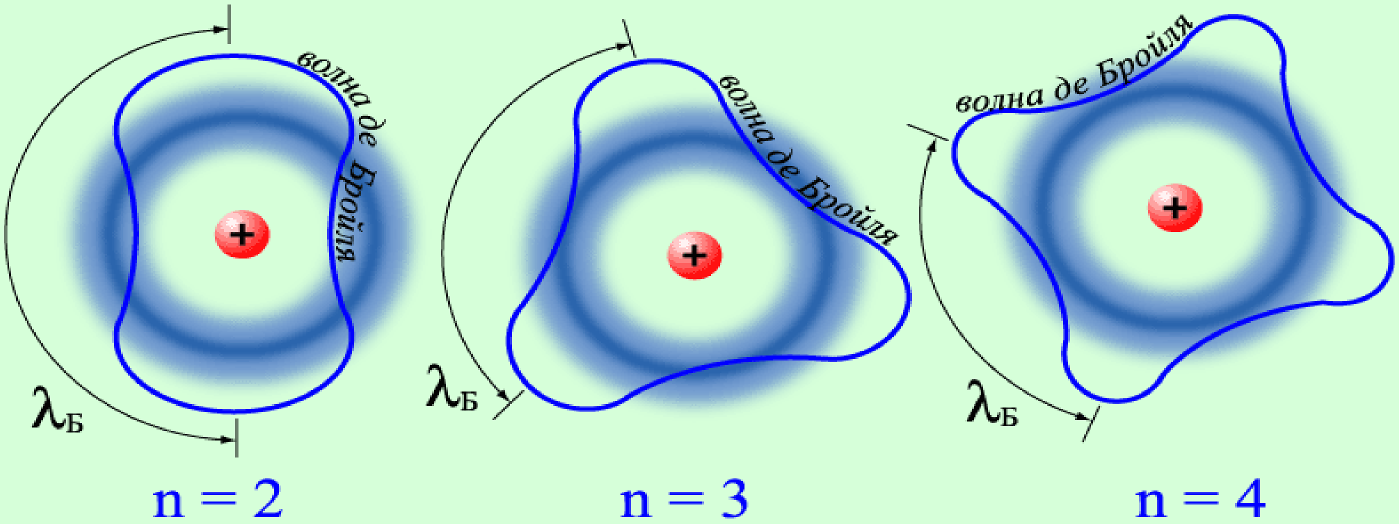


Дифракція
нейтронів
на монокристалі NaCl

Дифракція електронів на монокристалі моногідрату хлористого барію



# Інтерпретація хвиль де Бройля




$$\lambda_{дБ} = \frac{h}{p}$$

***На довжині окружності кожної стаціонарної орбіти вкладається ціле число n довжин хвиль де Бройля***

$$\ell_n = n\lambda_{дБ}$$

# Інтерпретація хвиль де Бройля
## ( статистичне тлумачення)

***Інтенсивність*** **хвилі матерії (де Бройля), тобто квадрат модуля амплітуди** $I \sim |A|^2$**, у будь-якому місці простору, пропорційна до** ***імовірності,*** **з якою можна знайти частинку в цьому місці**

# 6.3.3. Співвідношення невизначеностей Гейзенберга. Межі застосовності квантової механіки.

Завдання: якими є розміри електрона та яку область простору він заповнює – тобто, яка ***локалізація хвилі де Бройля***?

Вирішення:

I. Класична механіка

- частинка має цілком визначені координати ***x*** та відповідні імпульси ***p***;
- сукупність положень частинки в просторі є траєкторією;
- можна визначити імпульс частинки на її траєкторії в будь-який наступний момент часу.

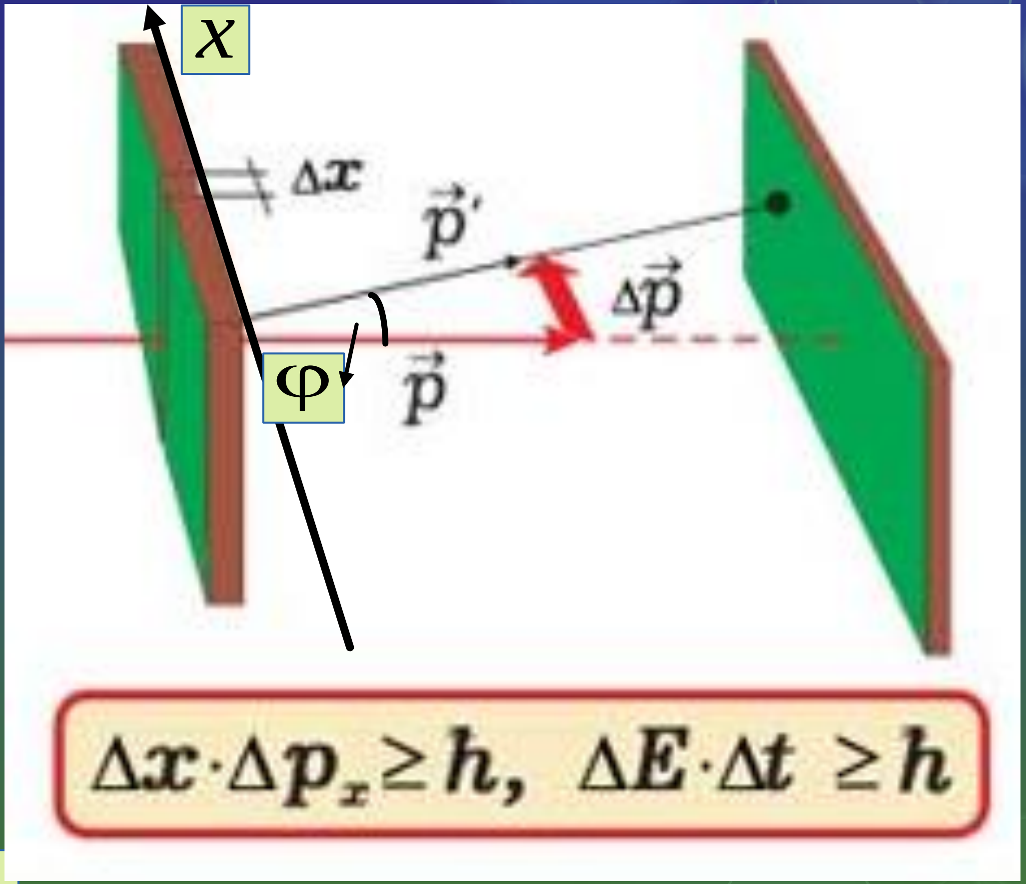
II. Квантова механіка

- хвиля це ***протяжний об'єкт***, який заповнює певну область простору;
- довжина хвилі у даній точці простору ***не має сенсу***!
- неможливо ***одночасно*** визначити координату та імпульс хвилі де Бройля.

https://youtu.be/taFAEdoE008?si=8uOLxg99v79yj5om

# Вернер Карл Гейзенберг 1927

05.12.1901-
01.02.1976




$$\Delta p_x = p\sin\varphi = \frac{h}{\lambda}\sin\varphi$$

$$\Delta x \sin\varphi = \lambda$$

$$\Rightarrow$$

$$\Delta x \times \Delta p_x = h$$

# Співвідношення невизначеностей Гейзенберга

Добуток **невизначеності координати** мікрочастинки та **невизначеності імпульсу** цієї частинки вздовж даної координатної вісі є величною не менше за $\hbar$:

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \hbar$$

$$\Delta y \cdot \Delta p_y \geq \hbar$$

$$\Delta z \cdot \Delta p_z \geq \hbar$$

$$\Delta x = 0; \cdot \Delta p_x = \infty$$

**- точно відома координата, не визначений імпульс (швидкість)**

$$\Delta x = \infty; \cdot \Delta p_x = 0$$

**- частинка з однаковою імовірністю знаходиться в будь-якій точці простору**

# Співвідношення невизначеностей Гейзенберга

Добуток **невизначеності величини енергії** мікрочастинки та **невизначеності часу** існування також є величиною не менше $\hbar$:

$$\Delta E \cdot \Delta t \geq \hbar$$

$$\Delta E = 0; \cdot \Delta t = \infty$$

$\Longrightarrow$

1. **Якщо стан атома стаціонарний, то електрон може знаходитись на орбіті нескінченно довго**
2. **Енергія стаціонарного стану має цілком визначене значення**

https://www.youtube.com/watch?v=FJWFxCsbrN0&ab_channel=%D0%92%D1%81%D0%B5%D1%81%D0%B2%D1%96%D1%82UA

# 6.3.4. Хвильова функція та її фізичний зміст. **Рівняння Шредінгера**


12.08.1887 - 04.01.1961

Австрійський фізик-теоретик, один з творців квантової механіки.

Лауреат Нобелівської премії з фізики (1933)

# Рівняння Шредінгера

***Основне рівняння квантової механіки*** **записано (постульовано) для опису поведінки частинки з урахуванням її *хвильових властивостей.***

*(як рівняння Ньютона в класичній механіці).* $\boxed{\sum_{i=1}^{N} \vec{F}_i = \frac{d\vec{p}}{dt}}$

***Розв'язуючи рівняння Шредінгера, можна отримати хвильову функцію системи, яка надає інформацію про ймовірність знаходження частинки у певному стані та її енергетичний спектр.***

В застосуванні до ***стаціонарних станів*** (**$E_{пот} \neq f(t)$**) електрона в атомі має вигляд:

$$\Delta\Psi + \frac{2m}{\hbar^2}\left[E_{пов} - E_{пот}(\vec{r})\right] \cdot \Psi = 0$$

де:

**Ψ** – хвильова функція, яка залежить від просторових координат (x, y, z) і часу t;

***m*** – маса частинки;

***$E_{пов}$*** – повна енергія частинки,

***$E_{пот}$*** – потенціальна енергія частинки;

**Δ** – оператор Лапласа, який визначає енергетичний стан системи

Для хвильової функції ΔΨ :

$$\Delta\Psi = \frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\Psi}{\partial z^2}$$

# Хвильова функція Ψ та її фізичний зміст

1. Хвильова функція Ψ є функцією координат та часу

$$\psi = A\cos\left[\frac{1}{\hbar}(Et - px)\right]$$

2. Хвильова функція Ψ, яка описує мікрочастинку, перебуває з нею у співвідношенні, аналогічному співвідношенню між амплітудою світлової (ЕМ) хвилі та *імовірністю* знаходження в заданому місці фотона

3. *Квадрат амплітуди світлової* (ЕМ) хвилі визначає *імовірність* потрапляння фотона в задану точку поверхні, тоді

***М. Борн:***

***Квадрат модуля амплітуди хвильової функції*** $|\Psi|^2$ ***для будь-якої точки простору помножений на елементарний об'єм dV , що включає цю точку, є густиною імовірності dP знаходження мікрочастинки в межах об'єму dV:***

$$dP = \left|\Psi_{(x,y,z,t)}\right|^2 \cdot dV$$

$$dV = dx \cdot dy \cdot dz$$

***Отже, квадрат модуля амплітуди хвильової функції має зміст густини імовірності*** **(тобто визначає густину величини в такому самому розумінні, як густина енергії, густина заряду тощо)**

http://physics.zfftt.kpi.ua/mod/book/view.php?id=302&chapterid=109

# Хвильова функція Ψ та її фізичний зміст


Хвилі де Бройля є не реальними фізичними хвилями,
а **«хвилями імовірності»** або **«хвилями інформації»**.
Це накладає на хвильову функцію частики досить жорсткі математичні обмеження:

1. Імовірність події, що може відбутися в даному місці і в даний час, не може мати одразу два або більше значень. Тому: хвильова функція має бути ***однозначною***

2. Положення та швидкість частинки не можуть змінюватись миттєво, тому хвильова функція та її похідні мають бути ***неперервною*** (гладкою).

3. Імовірність за означенням не може бути більшою за одиницю, отже хвильова функція має бути ***обмеженою.***

Ця вимога підлягає ***умові нормування*** хвильової функції:

$$\int_0^1 \left|\Psi(x,t)\right|^2 dx = 1$$

Інтегрування ведеться по всій області існування підінтегральної функції, тобто області, де ***може знаходитись*** частинка.

***Умова нормування*** має простий зміст – вона формально виражає сам ***факт присутності частинки в заданій області простору протягом заданого інтервалу часу***!

# Хвильова функція та її фізичний зміст

$$dP = \left|\Psi_{(x,y,z,t)}\right|^2 \cdot dV$$

$$\Psi = A\sin(\omega x + \alpha)$$

$$\omega = \frac{n\pi}{\ell}, \text{при } n = 1,2,3\ldots$$

$$\Rightarrow$$

$$\Psi = A\sin\left(\frac{n\pi}{\ell}x\right)$$

Хвильова функція має задовольняти умову ***нормування імовірностей:***

$$\iiint_V |\Psi|^2 dV = 1$$

Тобто перебування частинки десь у просторі *dx, dy, dz* є *достовірна подія*

$$\int_0^1 \Psi^2 dx = 1 \Rightarrow A^2\int_0^1 \Psi^2 dx = 1 \Rightarrow$$

$$A^2\int_0^\ell \sin^2\left(\frac{n\pi}{\ell}x\right)dx = 1 \Rightarrow A^2\frac{\ell}{2} = 1 \Rightarrow A = \sqrt{\frac{\ell}{2}} \Rightarrow$$

$$\Psi = \sqrt{\frac{\ell}{2}}\sin\left(\frac{n\pi}{\ell}x\right), \text{ де } n = 1,2,3\ldots$$

# Хвильова функція та її фізичний зміст

$$\Psi = \sqrt{\frac{\ell}{2}}\sin\left(\frac{n\pi}{\ell}x\right), \text{ де } n = 1, 2, 3...$$

Рис. 1а – графічне відображення ***власних функцій*** Ψ для різних значень *n*

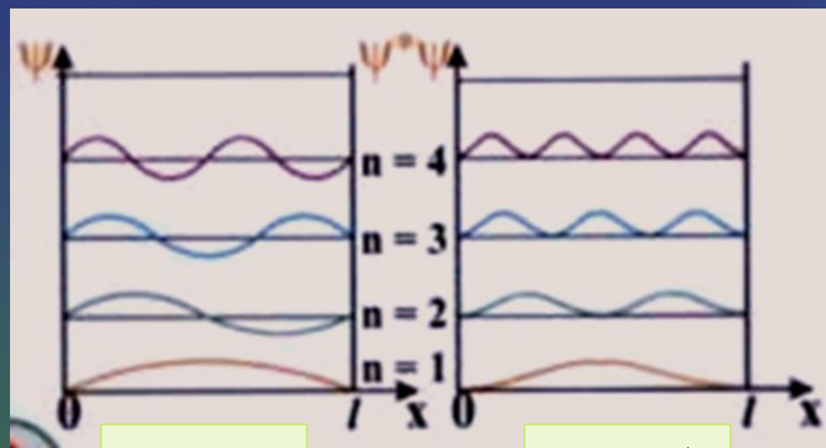



Рис. 1а

Рис. 1б

Рис. 1б – графічне відображення ***густини імовірності***

$$|\Psi|^2 = \Psi^* \Psi$$

виявлення частинки на різних відстанях від стінок ями для різних значень *n*

Здобуті результати несумісні з поняттям траєкторії руху частинки у класичній механіці.

Наприклад, за *результатами квантової механіки* при ***n*=2** частинку не можна виявити всередині ями, хоча вона однаково часто буває як у лівій, так і у правій половині ями.

З погляду *класичної механіки* всі положення частинки в ямі рівно імовірні.

**Рівняння Шредінгера для опису руху частинки в нескінченній глибокій одновимірній ($x$) потенціальній ямі – в атомі на орбіті, довжиною $\ell$**

Нехай потенціальна енергія частинки в ямі в межах $0 < x < \ell$ дорівнює нулю $E_{пот} = 0$.

Тоді в рівнянні Шредінгера при $0 < x < \ell$ потенціальна енергія $E_{пот} = 0$.

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}E_{пов} \cdot \Psi = 0 \quad \Rightarrow \quad \omega^2 = \frac{2m}{\hbar^2}E_{пов}$$

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} + \omega^2 \cdot \Psi = 0 \quad \Rightarrow \quad \Psi = A\sin(\omega x + \alpha)$$

На границі $x = 0$:

$$\left\{\begin{array}{l} \Psi(0) = 0 \Rightarrow \\ \Psi(0) = A\sin\alpha \Rightarrow \\ \alpha = 0 \end{array}\right.$$

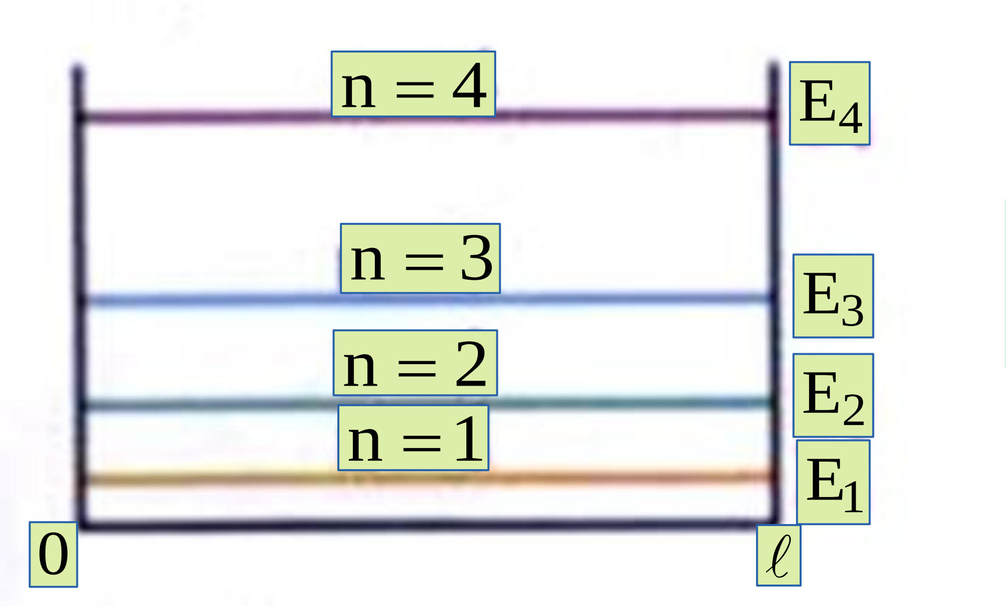
На границі $x = \ell$:

$$\left\{\begin{array}{l} \Psi(\ell) = A\sin\omega x \Rightarrow \\ \Psi(\ell) = A\sin\omega\ell \Rightarrow \\ \omega\ell = n\pi \Rightarrow \\ \omega = \frac{n\pi}{\ell}, \text{при } n = 1, 2, 3\ldots \end{array}\right.$$

$$\Longrightarrow \quad \frac{n^2\pi^2}{\ell^2} = \frac{2m}{\hbar^2}E_{пов}$$

$$E_{пов} = \frac{\pi^2\hbar}{2m\ell^2}n^2, \text{ при } n = 1, 2, 3\ldots$$

# Енергія електрона в атомі




$$E_{пов} = \frac{\pi^2\hbar}{2m\ell^2}n^2,\ \text{при}\ \ n = 1, 2, 3\ldots$$

**1. Рівні енергії частинки в атомі є *дискретними***

**2. Енергія частинки *квантується***

**3. Енергія *вільних* електронів може приймати *будь-які значення***

https://youtu.be/taFAEdoE008?si=8uOLxg99v79yj5om