

I.6 Zasada nieoznaczoności Heisenberga. Interpretacja probabilistyczna i równanie Schroedingera

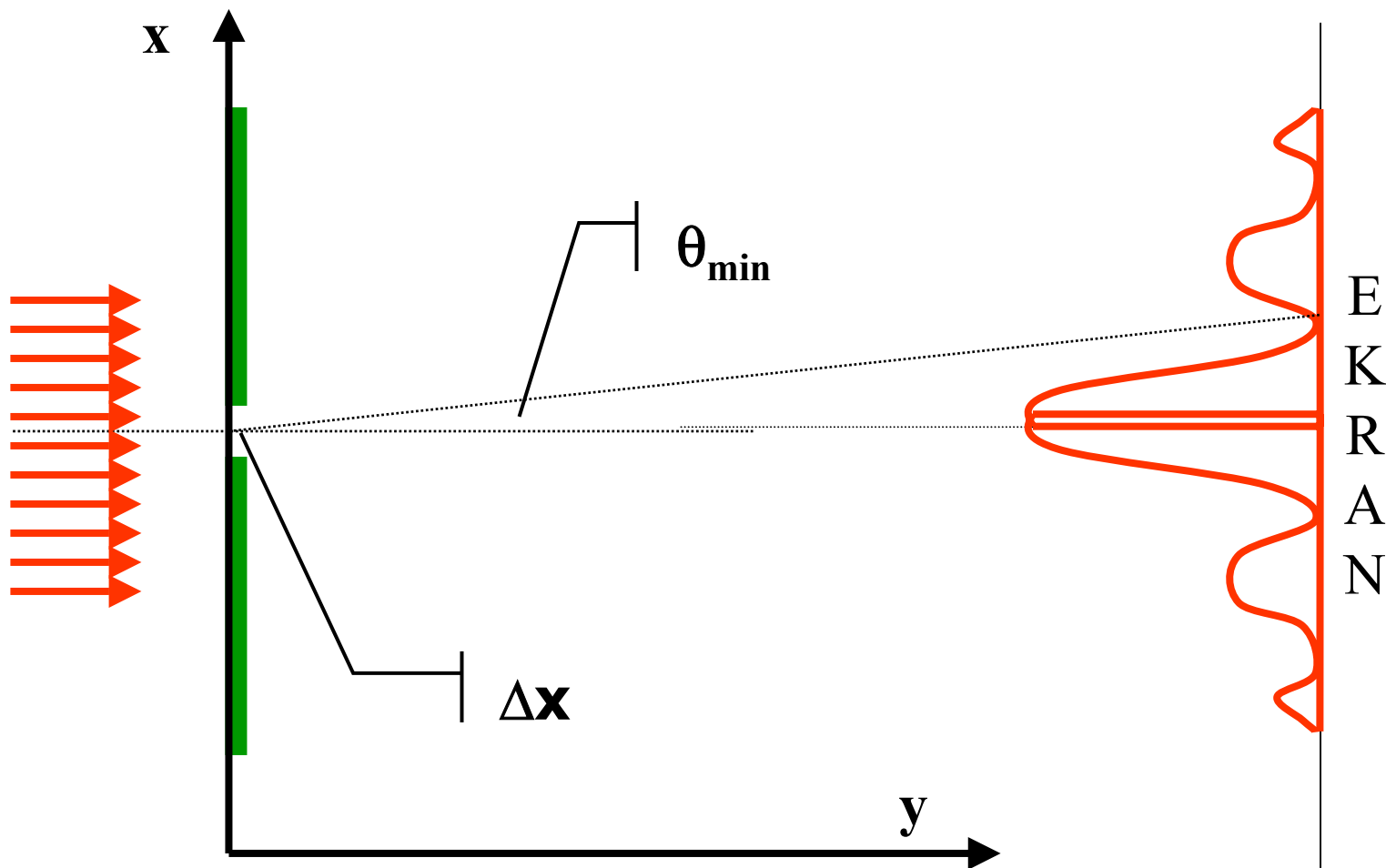
Interpretacja probabilistyczna-połączenie opisu korpuskularnego i falowego

Rozważmy doświadczenie mające na celu zlokalizowanie elektronów w kierunku poprzecznym do ich ruchu. W celu ich zlokalizowania użyjemy szczeliny o szerokości Δx .

Zgodnie z teorią falową elektron po przejściu przez szczelinę podlegnie dyfrakcji, a natężenie fali elektronowej o amplitudzie Ψ będzie proporcjonalne do kwadratu jej amplitudy:

$$I(\vec{r}, t) d_3 r = |\Psi(\vec{r}, t)|^2 d_3 r$$

Interpretacja probabilistyczna cd.



Interpretacja probabilistyczna cd.

Natężenie jest proporcjonalne do prawdopodobieństwa znalezienia elektronu w objętości $d_3\mathbf{r}$ dookoła punktu $\vec{\mathbf{r}}$.

$$p(\vec{\mathbf{r}}, t)d_3\mathbf{r} = |\Psi|^2 d_3\mathbf{r}$$

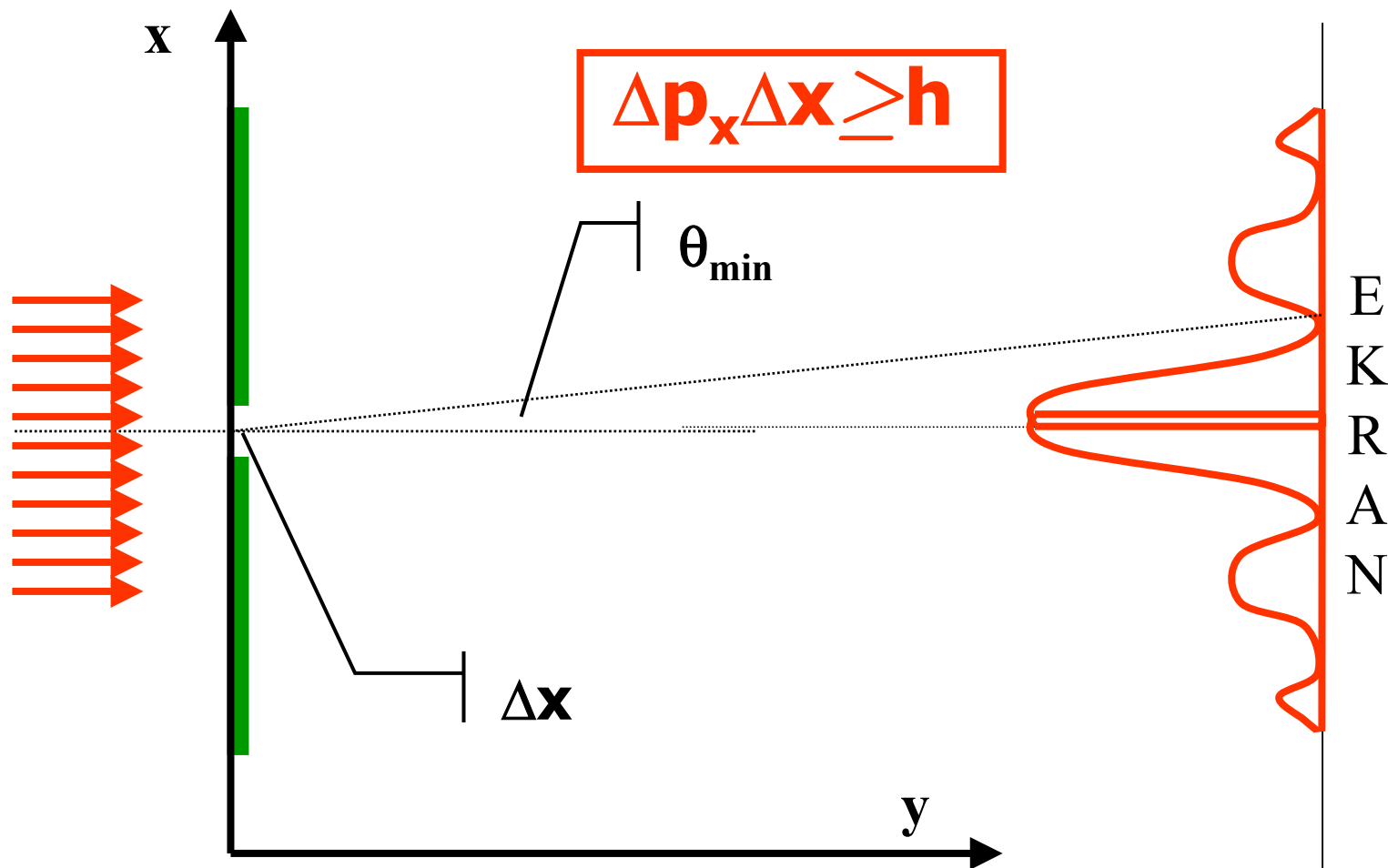
Zasada nieoznaczoności

Lokalizacja fali elektronowej: kąt pod jakim widzimy 1 minimum dyfrakcyjne

$$\sin \theta_{\min} = \frac{\lambda}{d} = \frac{\lambda}{\Delta x}$$

W wyniku dyfrakcji pojawia się więc składowa poprzeczna, x-owa pędu elektronu. Ma ona charakter statystyczny, gdyż nie wiemy o jaki kąt ugnie się konkretny elektron przechodzący przez szczelinę.

Zasada nieoznaczoności



Zasada nieoznaczoności cd.

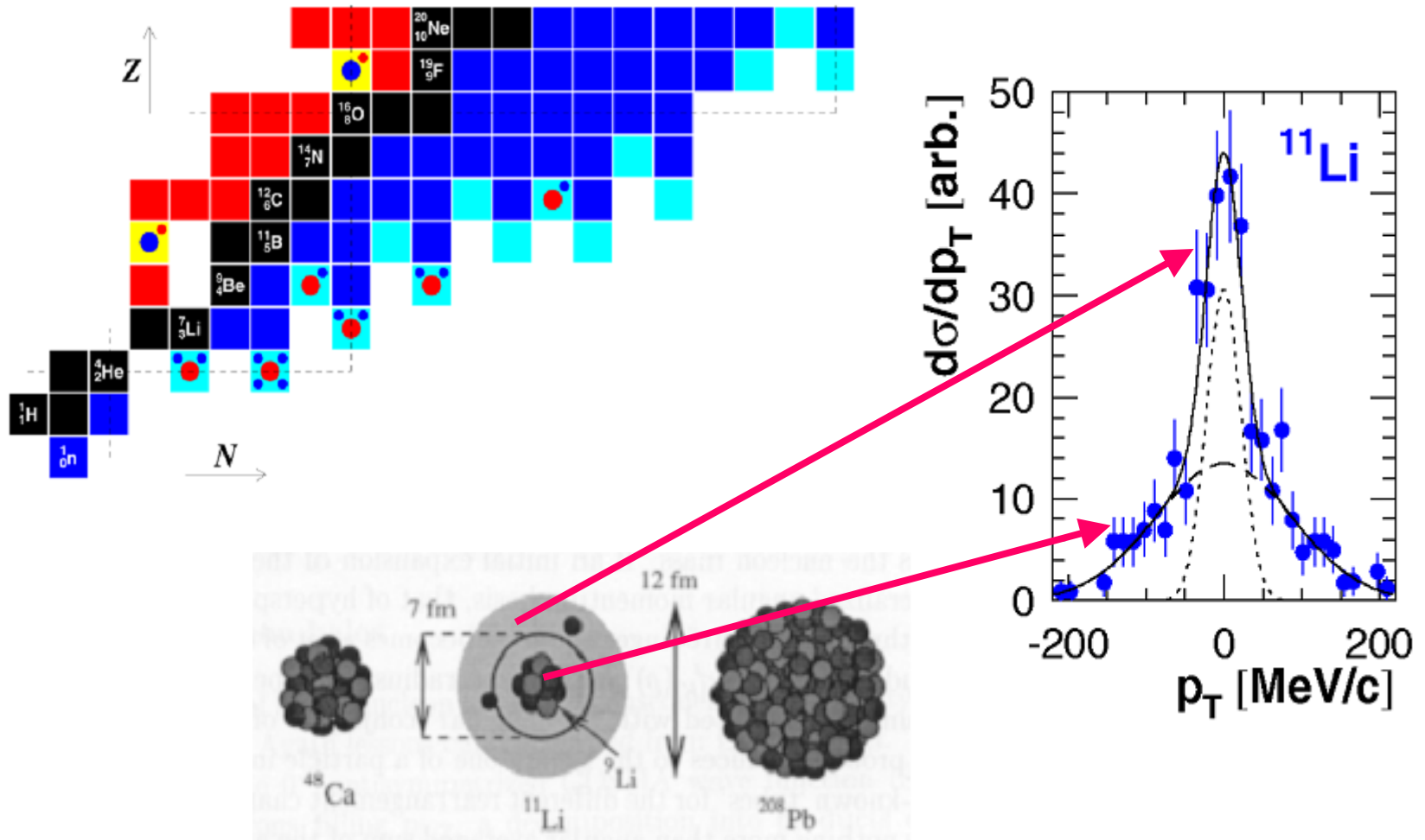
Rozmycie statystyczne x-owej składowej pędu jest nie mniejsze niż $p \cdot \sin \theta_{\min}$:

$$\Delta p_x \geq p \sin \theta_{\min} = \frac{h}{\lambda} \frac{\lambda}{\Delta x}$$

czyli

$$\Delta p_x \Delta x \geq h$$

Jest to zasada nieoznaczoności Heisenberga

Zasada nieoznaczoności a neutrony w ^{11}Li 

Zasada nieoznaczoności i stany związane

Klasycznie atom wodoru (zagadnienie Keplera, orbita kołowa)

Związek między energią cząstki E i odległością od jądra

$$E = -\frac{1}{2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \xrightarrow{r \rightarrow 0} -\infty$$

Naiwnie ale kwantowo, korzystając z zasady nieoznaczoności:

Nieoznaczoność położenia dookoła jądra jest rzędu promienia orbity.

Nieoznaczoność pędu jest rzędu pędu:

$$\Delta x \approx r$$

$$\Delta p \approx p \approx \frac{h}{\Delta x} = \frac{h}{r}$$

Zasada nieoznaczoności i stany związane cd.

Poszukajmy minimalnej energii:

$$E \approx \frac{h^2}{2mr^2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

$$\frac{dE}{dr} = -\frac{h^2}{mr_{\min}^3} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{\min}^2} = 0 = -4\pi\epsilon_0 h^2 + me^2 r_{\min}$$

$$r_{\min} = \frac{4\pi\epsilon_0 h^2}{me^2} = 2.07 \cdot 10^{-9} \text{ m} \quad \text{wynik dokładny} = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{me^2}$$

$$E_{\min} = -\frac{1}{2} \frac{me^4}{(4\pi\epsilon_0 h^2)^2} = -0.35 \text{ eV}$$

wynik dokładny $(2\pi)^2$ większy = -13.6 eV

Interpretacja probabilistyczna cd.

Natężenie jest proporcjonalne do prawdopodobieństwa znalezienia elektronu w objętości $d_3\mathbf{r}$ dookoła punktu $\vec{\mathbf{r}}$.

$$p(\vec{\mathbf{r}}, t)d_3\mathbf{r} = |\Psi|^2 d_3\mathbf{r}$$

Obliczanie funkcji falowej - równanie Schroedingera

Argumentacja Schroedingera dla cząstek swobodnych:

- Chcemy, żeby pakiety falowe spełniały pewne równanie różniczkowe. Oznacza to, że:
 - Fale płaskie $\Psi(\vec{r}, t) = \exp(i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t))$ powinny je spełniać,
 - Spełniona powinna być zasada superpozycji.
- Rozwiązania powinny spełniać związek de Broglie'a dla cząstek swobodnych:

$$E = \frac{p^2}{2m}; \quad \text{czyli } \hbar\omega = \frac{(\hbar k)^2}{2m}$$

Obliczmy

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -i\omega \Psi \xrightarrow{\times i\hbar} -i^2 \hbar\omega \Psi = E \Psi$$

Równanie Schroedingera cd.

Jak otrzymać $p^2/2m$?

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} = -(\mathbf{k}_x^2 + \mathbf{k}_y^2 + \mathbf{k}_z^2) \Psi = -\mathbf{k}^2 \Psi \xrightarrow{\times \frac{\hbar^2}{2m}} -\frac{(\hbar \mathbf{k})^2}{2m} \Psi$$

Ostatecznie dostajemy następujące równanie, które spełniają fale płaskie:

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

Równanie jest liniowe w czasie- spełniona jest zasada superpozycji

Równanie Schroedingera cd.

Uogólnienie na przypadek cząstki w potencjale V :

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

Wielkości fizyczne operatorami działającymi na funkcję falową

Żeby ze związku dyspersyjnego przejść do równania Schroedingera musimy zastąpić energię i pęd przez operatory działające na funkcję falową:

$$E = \frac{p^2}{2m}$$

$$E \rightarrow \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right) \Psi \quad \vec{p} \rightarrow \left(\frac{\hbar}{i} \nabla \right) \Psi$$

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right) \Psi = -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} \Psi$$