

Элементы квантовой механики. Основные понятия и формулы.

Формула де Бройля связывает длину волны λ , соответствующую микрочастице, с ее импульсом $\vec{p} = m\vec{v}$:

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

Для нерелятивистской частицы ($v \ll c$)

$$\lambda = \frac{h}{mv} \quad \text{или} \quad \lambda = \frac{h}{\sqrt{2mE_k}},$$

где m – масса частицы; v – ее скорость; E_k – кинетическая энергия частицы.

Для релятивистской частицы ($v \approx c$)

$$p = mv = \frac{m_0v}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}};$$

$$\lambda = \frac{h}{m_0v} \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}} \quad \text{или} \quad \lambda = \frac{hc}{\sqrt{E_k(E_k + 2m_0c^2)}},$$

где m_0 – масса покоя частицы; c – скорость света в вакууме; E_k – кинетическая энергия частицы.

Иногда импульс частицы удобно выражать через ее кинетическую энергию E_k :

для нерелятивистской частицы ($v \ll c$)

$$p = \sqrt{2m_0E_k};$$

для релятивистской частицы ($v \approx c$)

$$p = \frac{1}{c} \sqrt{E_k(E_k + 2E_0)},$$

где $E_0 = m_0c^2$ – энергия покоя частицы; c – скорость света в вакууме.

В случае релятивистской частицы, когда $pc \approx E_0 = m_0c^2$, связь импульса p с полной энергией E частицы и длиной волны

$$E = \sqrt{E_0^2 + p^2c^2}; \quad \lambda = \frac{hc}{\sqrt{E^2 - E_0^2}}.$$

Полная энергия релятивистской частицы

$$E = E_k + E_0,$$

где E_k – кинетическая энергия частицы; E_0 – энергия покоя частицы.

В случае, когда $E \ll E_0$,

$$E = pc \quad \text{или} \quad \lambda = \frac{hc}{E}.$$

Соотношение неопределенностей Гейзенберга, сопряженных величин для координаты x и проекции импульса p_x на ось x :

$$\Delta x \Delta p_x \geq \hbar,$$

где Δx – неопределенность координаты x частицы, Δp_x – неопределенность проекции импульса частицы на ось x .

Соотношение неопределенностей Гейзенберга для энергии ΔE и времени жизни состояния Δt :

$$\Delta E \Delta t \geq \hbar,$$

где ΔE – неопределенность энергии; Δt – время жизни квантовой системы в данном энергетическом состоянии.

Энергия свободно движущейся частицы массой m :

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{p_x^2}{2m},$$

где $p_x = \hbar k$ – импульс частицы; $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ – волновое число; λ – длина волны де Бройля.

Собственные значения энергии E_n частицы, находящейся на n -ном энергетическом уровне в одномерной прямоугольной бесконечно глубокой потенциальной яме,

$$E_n = n^2 \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ml^2},$$

где l – ширина ямы; m – масса частицы; $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ – волновое число.

Плотность вероятности нахождения частицы в соответствующем месте пространства:

$$\omega = |\Psi|^2,$$

где Ψ – волновая функция частицы.

Волновая функция, описывающая состояние частицы в одномерной прямоугольной бесконечно глубокой потенциальной яме:

$$\Psi(x) = \sqrt{\frac{2}{l}} \sin \frac{n\pi}{l} x,$$

где l – ширина ямы; x – координата частицы в яме ($0 < x < l$); n – квантовое число ($n = 1, 2, 3 \dots$).

Вероятность нахождения частицы в объеме dV (для стационарных состояний):

$$dW = |\Psi^2| dV.$$

Вероятность обнаружения частицы в объеме V :

$$W = \int_V dW = \int_V |\Psi|^2 dV.$$

Условие нормировки вероятностей:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi|^2 dV = 1.$$

Вероятность обнаружения частицы в интервале от x_1 до x_2

$$P(x) = \int_{x_1}^{x_2} |\Psi|^2 dx.$$

Уравнение Шредингера для стационарных состояний:

$$\Delta \Psi + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U) \Psi = 0,$$

где Ψ – волновая функция, описывающая состояние частицы; m – масса частицы; Δ – оператор Лапласа; U – потенциальная энергия частицы в данной точке поля; E – энергия частицы.