

**Неклассическое  
естествознание  
Квантовая механика**

# Излучения абсолютно черного тела

- Любое нагретое тело излучает ЭМ волны (свет) в широком диапазоне, причем интенсивность излучения сильно зависит от его частоты.
- **«Абсолютно черное тело»** - тело, способное поглощать при любой температуре все падающее на него ЭМ излучение. Внутри АЧ полости тепловое излучение непрерывно поглощается и излучается стенками полости, не выходя из нее. При этом энергия, излучаемая нагретым телом в единицу времени, равна поглощаемой им энергией.

# Излучения абсолютно черного тела

- Английские «классические физики» лорд Рэлей (1842-1919) и сэр Джеймс Джинс (1877-1948), используя те же самые теоретические положения, что и Максвелл при создании МКТ, получили для спектральной плотности энергии (тепловой энергии, излучаемой единицей площади в единичном спектральном интервале) выражение

$$W_{\nu, T} = \frac{2\pi\nu^2}{c^2} kT$$

- Это выражение хорошо описывало ход экспериментальной зависимости при низких частотах, но предсказывало бесконечный рост интенсивности в ультрафиолетовой области («ультрафиолетовая катастрофа»).

# Рождение квантовой механики

- Макс Планк (1858-1947) - член Прусской академии, всецело стоявший на позициях классической физики, двадцать лет занимавшийся изучением проблем термодинамики.
- Исследуя необратимый процесс установления равновесия между веществом и излучением, Планк сделал предположение о том, что испускание и поглощение ЭМ энергии происходит не непрерывно, а отдельными порциями -«квантами». **14 декабря 1900 года** Планк представил результаты своей работы Берлинскому физическому обществу – ***родилась квантовая механика.***
- Введенный Планком в физику квант света имеет энергию
- $$E = h\nu, (h=6.63 \cdot 10^{-34} \text{ Дж с}).$$

# Явление фотоэффекта

- Явление внешнего фотоэффекта было открыто в 1887 г. Генрихом Герцем.
- В 1888- 1889 г. А.Г.Столетов (1839-1896) систематически исследовал фотоэффект и обнаружил его основные закономерности:
- 1) наибольшее действие оказывают ультрафиолетовые лучи;
- 2) сила тока возрастает с увеличением освещенности пластины;
- 3) испускаемые под действием света заряды имеют отрицательный знак.
- Спустя 10 лет в 1898 г. Леннард и Томсон, измерив удельный заряд испускаемых частиц, установили, что это электроны.

# Явление фотоэффекта

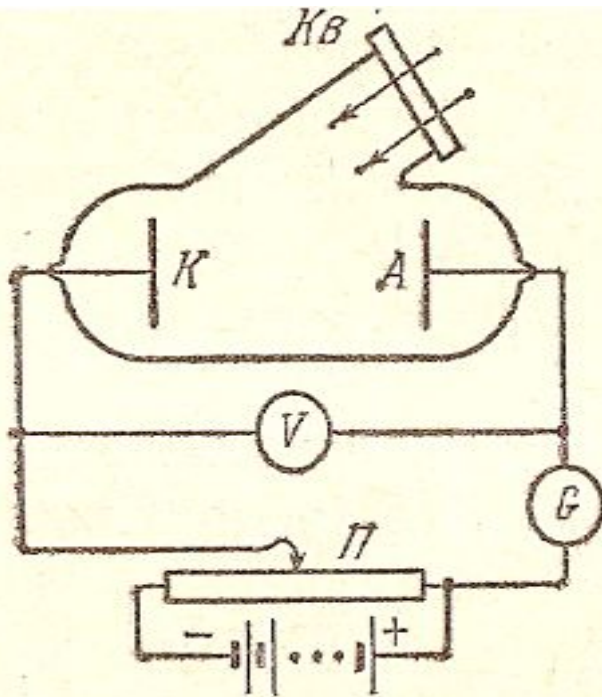


Рис. 9.2.

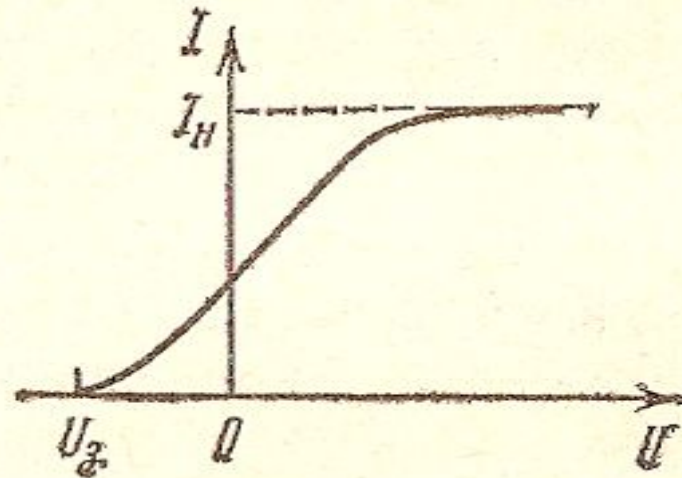


Рис. 9.3.

# Явление фотоэффекта

- ***Внешний фотоэффект*** представляет собой испускание электронов поверхностью металла, освещаемого светом. Эксперимент показал, что энергия фотоэлектронов не зависит от интенсивности падающего света, а определяется только его частотой.
- В 1905 г. А.Эйнштейн показал, что все закономерности фотоэффекта можно объяснить, если предположить, что свет поглощается некоторыми порциями ( квантами).

# Явление фотоэффекта

- Уравнение фотоэффекта
- $$h\nu = A_{\text{ВЫХ}} + mV_{\text{макс}}^2 / 2$$
- Для каждого конкретного металла, характеризуемого своим значением  $A_{\text{ВЫХ}}$ , существует некоторая минимальная частота падающего света (или, соответственно, максимальная длина волны), при которой фотоэффект возможен. Это граничное значение определяет «красную границу» фотоэффекта
- $$\nu_{\text{кр}} = A_{\text{ВЫХ}} / h; \lambda_{\text{кр}} = hc / A_{\text{ВЫХ}}$$
- Таким образом, свет не только испускается, но и поглощается в виде квантов.



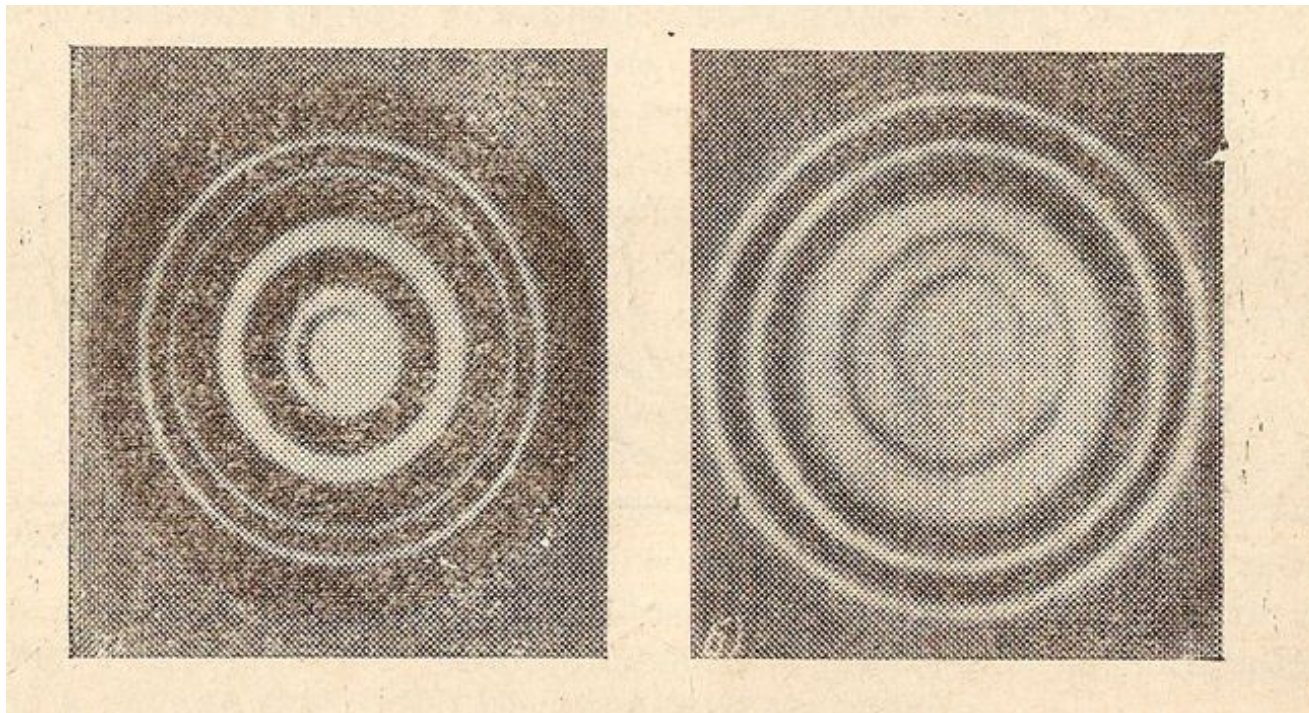
# Корпускулярно-волновой дуализм

- Эйнштейн выдвинул радикально новое понятие: дуализм «волна-частица»
- Свет представляет собой сложный материальный объект, который обладает как волновыми, так и корпускулярными свойствами.
- Волновые и корпускулярные характеристики связаны соотношениями:
  - $E = h\nu$ ,  $p = E/c = h/\lambda$

# Корпускулярно-волновой дуализм

- В 1923 году выпускник Парижской Сорбонны принц *Луи де Бройль* обобщил идею Эйнштейна о дуализме «волна-частица» со света на материю.
- Соотношение, связывающее импульс с длиной волны, справедливо и для частиц вещества. Любой частице, имеющей импульс  $p$ , может соответствовать волна, длина которой определяется соотношением
- $$\lambda = h/p.$$
- Вскоре в опытах по дифракции электронов на кристаллической решетке были доказаны волновые свойства электронов.

# Дифракция электронов и R-лучей



# Теория атома

## Закономерности в атомных спектрах

- В 1885 г. швейцарский школьный учитель математики Йохан Бальмер обнаружил, что длины волн серии линий атома водорода, лежащей в области видимого спектра связаны соотношением
- $$\nu = R (1/n^2 - 1/m^2),$$
- $R=3.29 \cdot 10^{15}$  Гц – постоянная Ридберга,
- $n$  и  $m$  – целые числа.
- Исходя из полученной формулы, Бальмер предсказал существования спектральных серий водорода в ультрафиолетовой и инфракрасной области, которые были обнаружены спустя 20 лет.

# Теория атома

## Открытие радиоактивности

В первые годы XX века были обнаружены новые типы излучений - **радиоактивные**, названные  $\alpha$ ,  $\beta$ , и  $\gamma$ -излучением. Явление радиоактивности занимались Антуан Беккерель (1852-1908) и супруги Пьер (1859-1906) и Мари (1867-1934) Кюри

# Теория атома

## Опыты Резерфорда

- В 1907 г. профессор физики Манчестерского университета Эрнст Резерфорд (1871-1937), изучавший проблемы радиоактивности, и его сотрудники исследовали прохождение  $\alpha$ -частиц через тонкую металлическую фольгу.

Основываясь на экспериментальных данных Резерфорд в 1911 г. предложил **ядерную модель атома:**

- в центре атома расположено тяжелое положительно заряженное ядро с зарядом  $Ze$  и размерами, не превышающими  $10^{-12}$  м;
- вокруг ядра расположено  $Z$  электронов, распределенных по всему объему, занимаемому атомом, размеры атома порядка  $10^{-10}$  м.

# Теория атома

- **Ядерная модель** оказалась в противоречии с законами классической механики и электродинамики.
- Поскольку система неподвижных зарядов не может находиться в состоянии устойчивого равновесия, Резерфорду пришлось предположить, что электроны движутся вокруг ядра по криволинейным траекториям.
- Но в этом случае электрон движется с ускорением, и согласно законам классической электродинамики он должен излучать электромагнитные волны, теряя при этом энергию, в результате чего должен в конечном счете упасть на ядро.

# Теория атома Бора

Молодой датский студент Нильс Бор в начале 1912 года подготовил для Резерфорда работу «О строении атомов и молекул».

## *Два постулата:*

- Из бесконечного числа электронных орбит, разрешенных классической механикой, реализуются только некоторые дискретные орбиты, удовлетворяющие определенным квантовым условиям. **Электрон, находясь на такой орбите, не излучает ЭМ волн.**
- Излучение испускается или поглощается в виде светового кванта при переходе электрона из одного стационарного состояния в другое. Величина кванта энергии  **$h\nu = E_1 - E_2$**



# Теория атома Бора

- Согласно постулату Бора осуществляются только те электронные орбиты, для которых момент импульса кратен постоянной Планка

$$L = mvR = n h/2\pi$$

- Квантовые условия Бора получили простое объяснение на основе дуализма «волна-частица», примененного к находящимся на стационарных орбитах электронам. На длине орбиты должно укладываться целое число волн

$$2\pi R = n \lambda.$$

- Используя соотношение де Бройля, легко получить условие квантования момента импульса.

# Теория атома Бора

Используя классическое описание движения электрона как вращения в кулоновском поле ядра, Бор получил аналитические выражения для радиусов стационарных орбит и энергий соответствующих состояний атома:

- $$r_n = \left( \frac{h^2 4\pi\epsilon_0}{4\pi^2 m q^2} \right) n^2 = r_1 n^2 \quad , \text{ где } r_1 = 0.53 \text{ \AA} = 0.53 \cdot 10^{-10} \text{ м}$$
$$Ry = -13.6 \text{ эВ.}$$

$$E_n = -\frac{1}{n^2} \cdot \frac{m q^4}{8 h^2 \epsilon_0^2} = Ry \cdot \frac{1}{n^2}$$

- Теория Бора позволила объяснить спектры атома водорода. Рассчитанное теоретически значение постоянной Ридберга лишь на несколько процентов отличалось от полученного Бальмером.

# Теория атома

Состояние каждого электрона в атоме характеризуется четырьмя квантовыми числами:

- главным  $n$  ( $n=1, 2, \dots$ )
- азимутальным  $l$  ( $l=1, 2, \dots, n-1$ )
- магнитным  $m_l$  ( $m_l=-l, \dots, -1, 0, +1, \dots, +l$ )
- спиновым  $m_s$  ( $m_s=+1/2, -1/2$ )

В нормальном (невозбужденном) состоянии атома электроны должны располагаться на самых низких доступных для них энергетических уровнях.

- Швейцарский физик-теоретик Вольфганг Паули (1900-1958)
- Согласно принципу Паули, **в одном и том же атоме (или другой квантовой системе) не может быть двух электронов, обладающих одинаковой совокупностью квантовых чисел.**

# Теория атома

- В атоме каждому  $n$  состоянию могут соответствовать

$n=1$  – 2 электрона,

$n=2$  – 8 электронов,

$n=3$  – 18 электронов и т.д.

- Совокупность электронов, имеющих одинаковые значения главного квантового числа  $n$ , образует **оболочку**.

Значение $n$	1	2	3	4	...
Обозначение оболочки	K	L	M	N	...

- Принцип Паули дает объяснение повторяемости свойств атомов. Аналогичными свойствами обладают атомы с одинаковым количеством электронов во внешней оболочке - см. **периодическую систему элементов Менделеева**

# Квантовая механика

**«Старая» квантовая теория**, созданная Планком, Эйнштейном, де Бройлем, Резерфордом, Бором, Зоммерфельдом, Паули и др., смогла объяснить:

- спектр атома водорода;
- квантование энергии в стационарных состояниях атома;
- периодическую систему Менделеева.

## **Рождение новой квантовой механики.**

С июня 1925 года по июнь 1926 года, было опубликовано три оригинальных и независимо сделанных варианта полной квантовой теории:

- Матричная квантовая механика – Вернер Гейзенберг (1901-1976)
- Волновая механика – Эрвин Шредингер (1877-1961)
- Квантовая алгебра – Пауль Дирак (1902-1984)

# Квантовая механика

- **Теория Шредингера**, основанный на концепции волн де Бройля.
- Шредингер сопоставил движению микрочастицы **комплексную функцию координат и времени**, которую он назвал **волновой функцией** и обозначил греческой буквой  $\Psi$ .
- Явный вид  $\Psi$ -функции получается из решения **уравнения Шредингера** (1926 г.), которое является основным уравнением нерелятивистской квантовой механики и играет для описания явлений микромира такую же роль, как и законы динамики Ньютона при описании движения в макромире.

# Квантовая механика

- Для стационарных состояний

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{8\pi^2 m}{\hbar^2} \cdot (E - U) \cdot \Psi = 0$$

- Физическую интерпретацию  $\Psi$ -функции дал М.Борн в 1926 г. **квадрат модуля  $\Psi$ -функции определяет вероятность того, что частица будет обнаружена в пределах некоторого объема**

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

- Интеграл от этого выражения по всему объему должен быть равен единице, т.к. выражает вероятность того, что частица находится в одной из точек пространства (условие нормировки).
- Таким образом, **квантовая механика имеет статистический характер.**

# Квантовая механика

- Одним из основных положений квантовой механики является **принцип суперпозиции состояний**.
- Пусть некоторая квантовомеханическая система может находиться в состоянии  $\Psi_i$ ,  $i=1,2,3\dots$ . Тогда существует состояние системы

$$\Psi = c_1 \Psi_1 + c_2 \Psi_2 + \dots$$

- где  $c_n$  – некоторые постоянные. Квадраты модулей коэффициентов  $c_n$  дают вероятность того, что при измерениях, производимых над системой, будут получены результаты, соответствующие нахождению системы в состоянии  $\Psi_n$ .

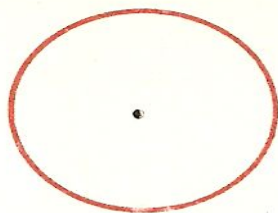


# Квантовая механика

## Атом водорода

- Решение уравнение Шредингера, где  $U = Ze^2/r$  - силовое поле, в котором движется электрон.
- Собственные волновые функции  $\Psi = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \phi)$
- Энергия электрона зависит только от главного квантового числа  $n$ , следовательно, каждому собственному значению энергии ( кроме  $E_1$ ) соответствует несколько собственных волновых функций, отличающихся значениями квантовых чисел  $l$  и  $m$ .
- при переходе электрона с одного энергетического уровня на другой для азимутального квантового числа должно выполняться **правило отбора**  $\Delta l = \pm 1$

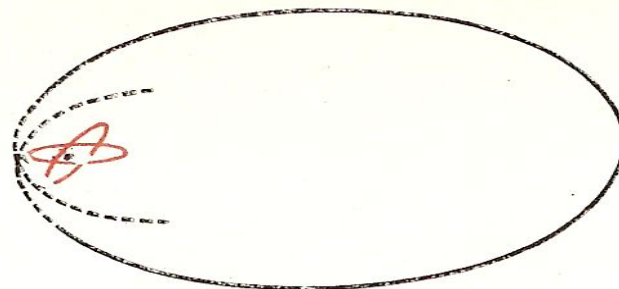
# Теория атома Бора



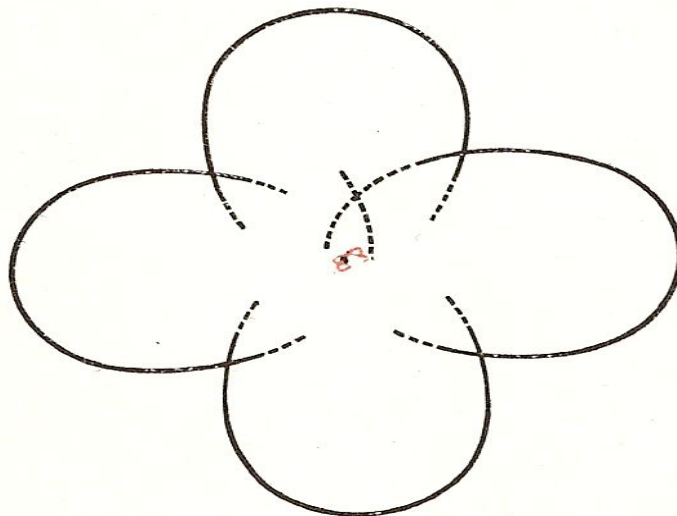
$10^{-8}$  см  
Водород



Гелий

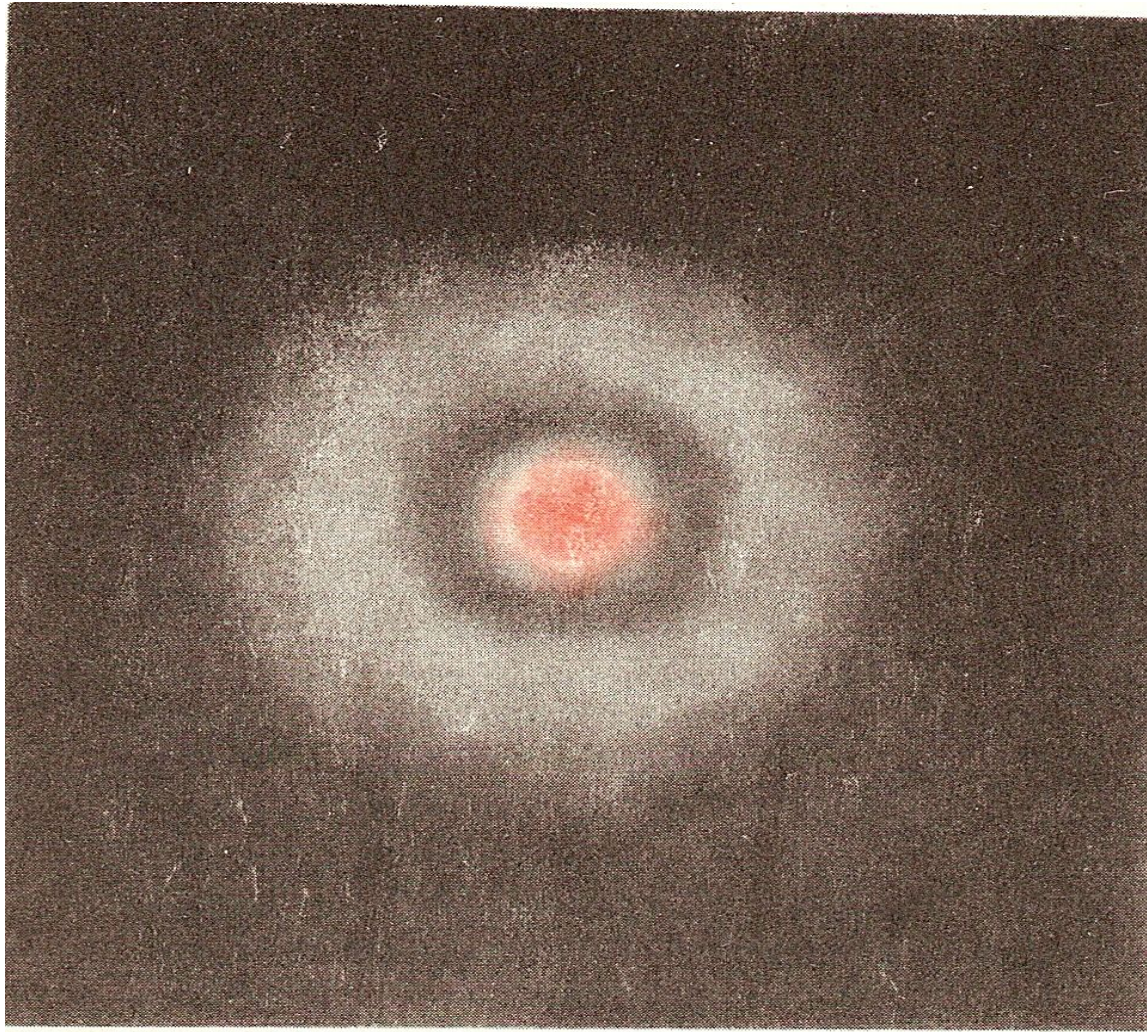


Литий



Углерод

# Квантовая механика, Li



420

← 1 Å →

# Квантовая механика

## Туннельный эффект

Частица, движущаяся слева направо, встречает на своем пути потенциальный барьер высоты  $U$ .

- По классическим представлениям, если энергия частицы больше высоты барьера, частица беспрепятственно проходит над барьером, Если же энергия частицы меньше высоты барьера, то частица отражается от барьера и летит в обратную сторону.
- Согласно квантовой механике, имеется отличная от нуля вероятность, что частица отразится от барьера с  $U < E$ , а с другой стороны, есть отличная от нуля вероятность того, что частица проникнет за барьер с  $U > E$ . Эта вероятность сильно зависит от ширины барьера. Также коэффициент прохождения резко уменьшается при увеличении массы.

# Туннельный эффект

