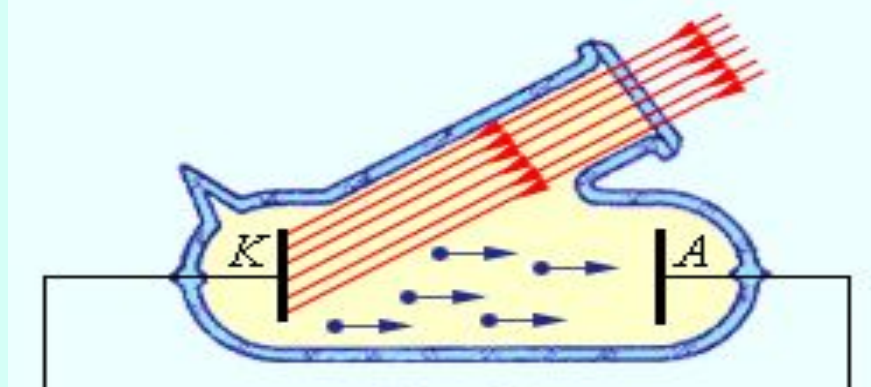
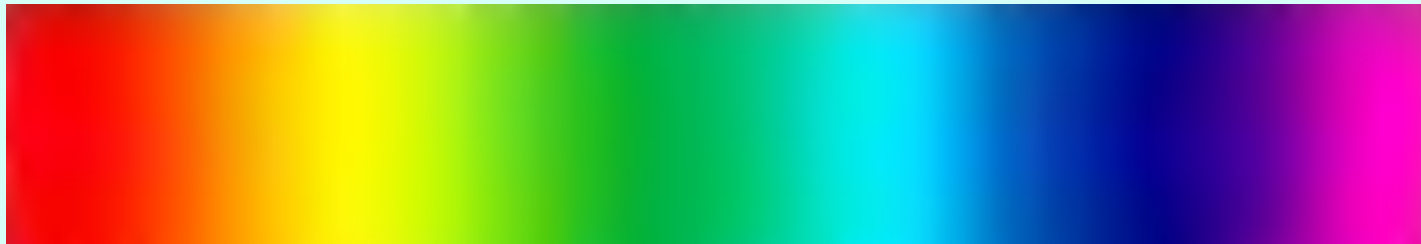
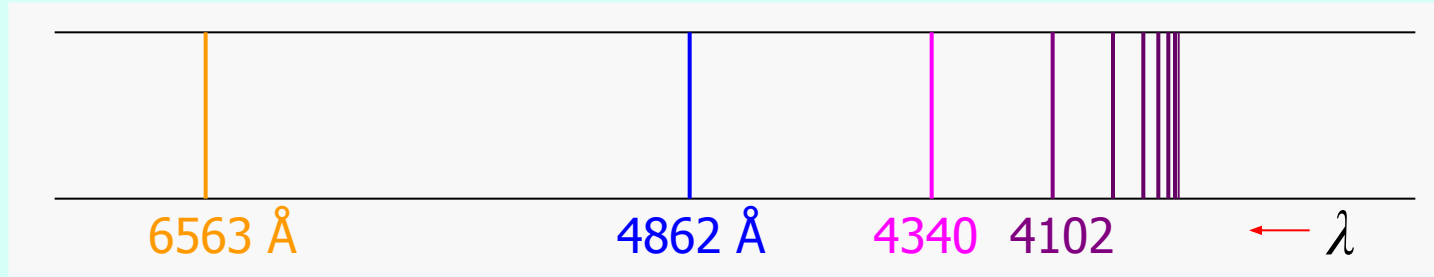




Тема. КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА

Спектр излучения атома водорода



Для описания явлений микромира
(масштаб $\leq 10^{-10}$ м)
необходим квантовый подход!



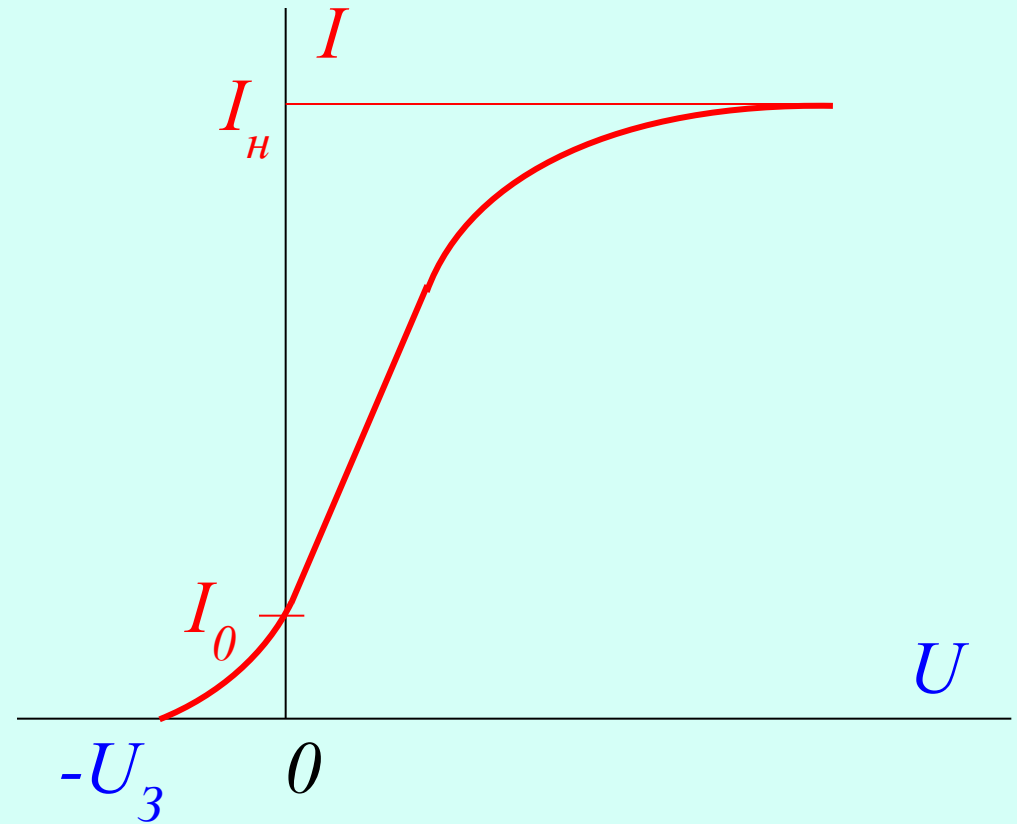
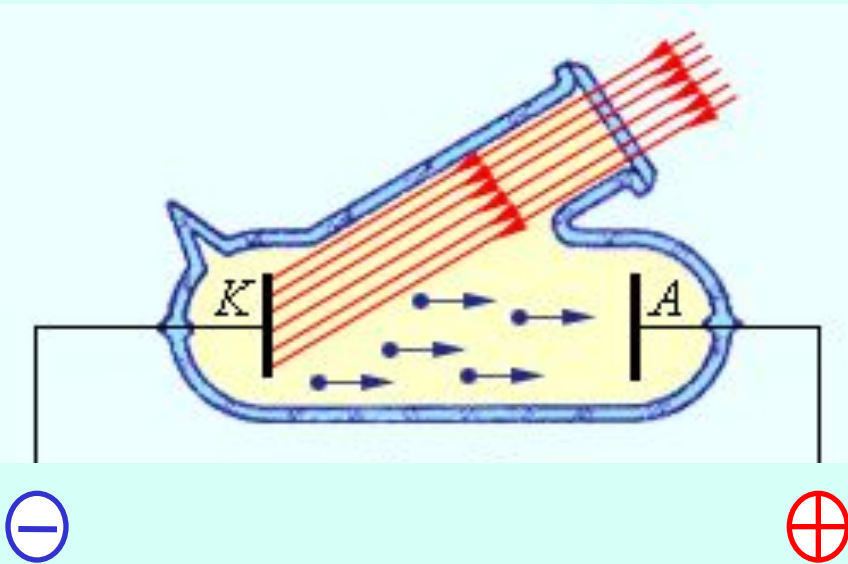
- Свяжем теорию с практикой ...



§1. Корпускулярные свойства излучения

Фотоэффект -

испускание электронов веществом под действием электромагнитного излучения (фотонов) (открыт в 1887 Г. Герцем, исследован А. Г. Столетовым в 1888 г.).



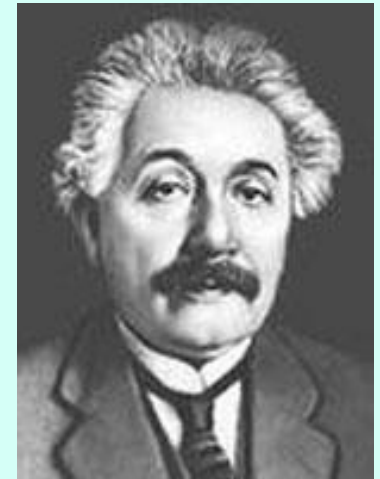
Зависимость силы фототока от приложенного напряжения.

Формула Эйнштейна для фотоэффекта

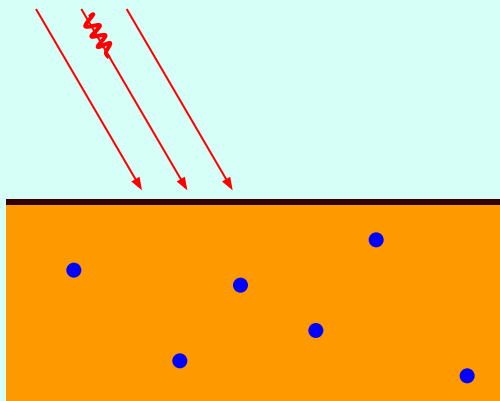
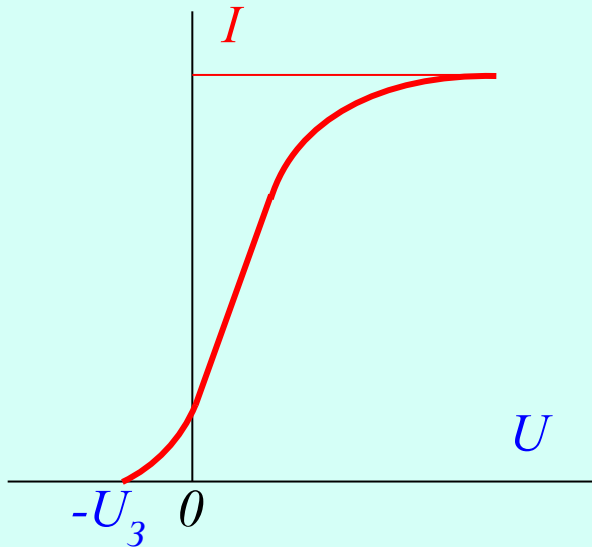
$$h\nu = A_{\text{вых}} + \frac{m\nu_{\text{max}}^2}{2}$$

$$h\nu_{\text{кр}} = A_{\text{вых}}$$

$$eU_3 = \frac{m\nu_{\text{max}}^2}{2}$$

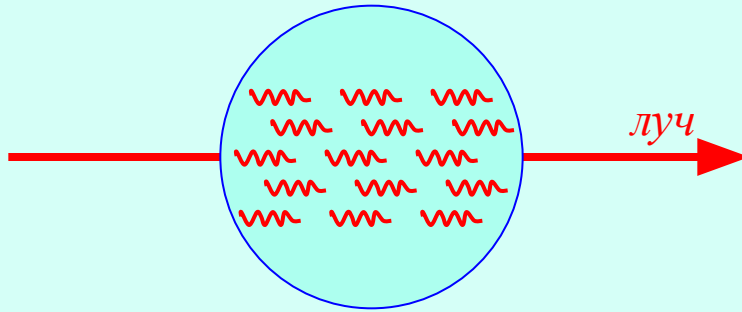


Эйнштейн
Альберт
(1879 – 1955)



Красная граница фотоэффекта - минимальная частота (максимальная длина волны) света, при которой ещё возможен внешний фотоэффект, то есть конечная кинетическая энергия фотоэлектронов меньше нуля.

Идея Ленарда-Планка-Эйнштейна о квантовой природе излучения



М.Планк:

$$\varepsilon = h \nu$$

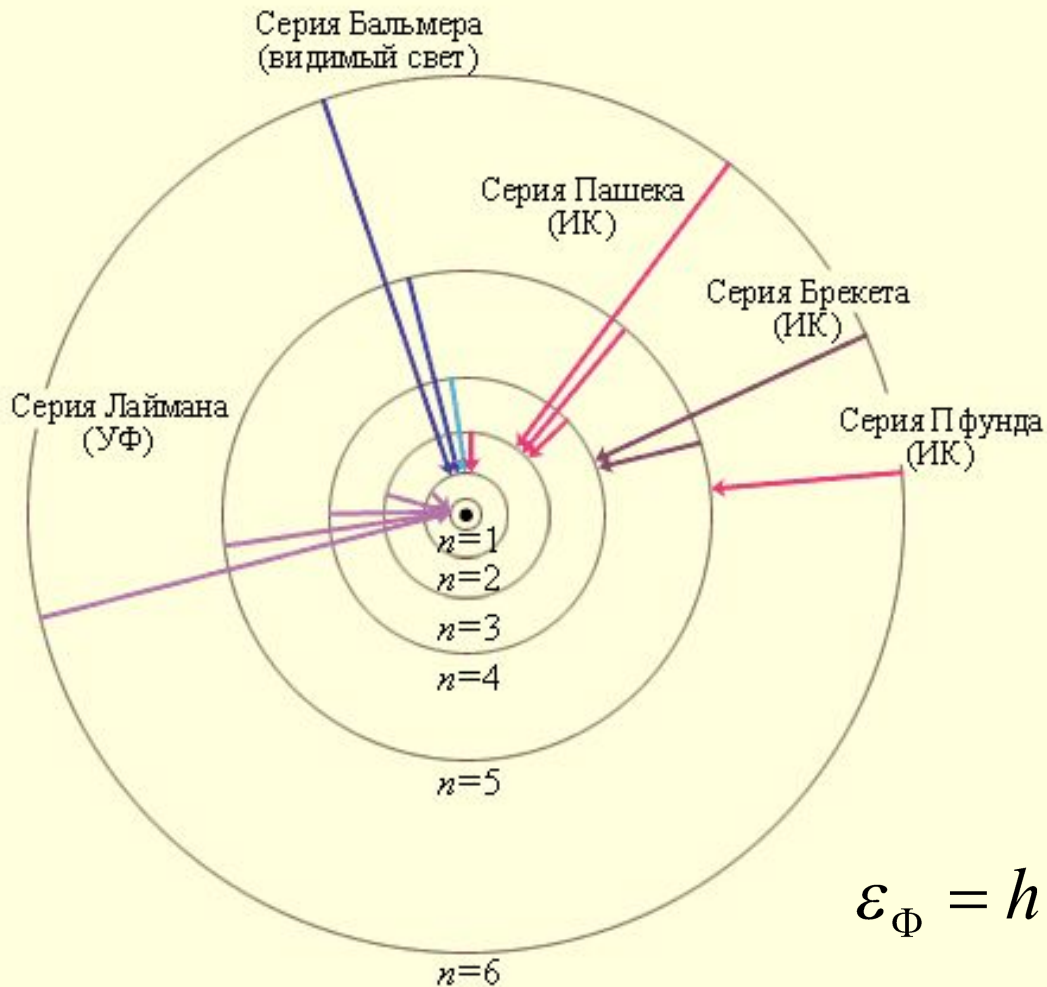
частота света

$$\varepsilon_{\Phi} = h\nu = \hbar \omega = E_n - E_m \equiv \Delta E_{nm}$$



Планк (Planck)
Макс
(1858 – 1947)

Образование спектральных серий излучения (атом водорода)



$$\varepsilon_{\Phi} = h\nu = \hbar\omega = E_n - E_m \equiv \Delta E_{nm}$$

Характеристики фотона

Энергия: $\varepsilon = h\nu = \hbar\omega$ $\hbar = \frac{h}{2\pi}$; постоянная Планка

частота *циклическая частота*

$h = 6,63 \cdot 10^{-34} \text{ Дж} \cdot \text{с}$

Масса: $h\nu = mc^2$; $m = \frac{h\nu}{c^2}$

Масса покоя: $m_0 = m\sqrt{1 - v^2/c^2} = 0 \quad (v = c)$

Импульс: $p = mc = \frac{h\nu}{c}$; $p = \frac{h}{\lambda}$ $p = \frac{\hbar \cdot 2\pi}{\lambda} = \hbar k$

длина волны *волновое число*



§2. Гипотеза де Бройля. Волна де Бройля. Проявления волновых свойств частиц

Корпускулярные свойства ЭМВ

Энергия

$$\varepsilon = h\nu = \hbar\omega$$

Импульс

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

Волновые свойства частиц

Частота

$$\nu = \frac{E}{h}$$

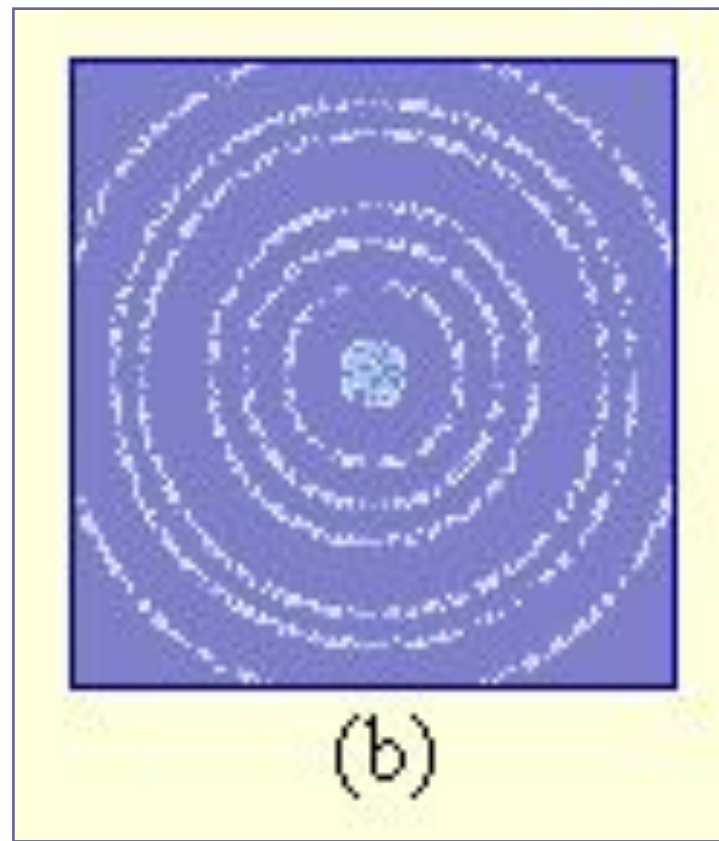
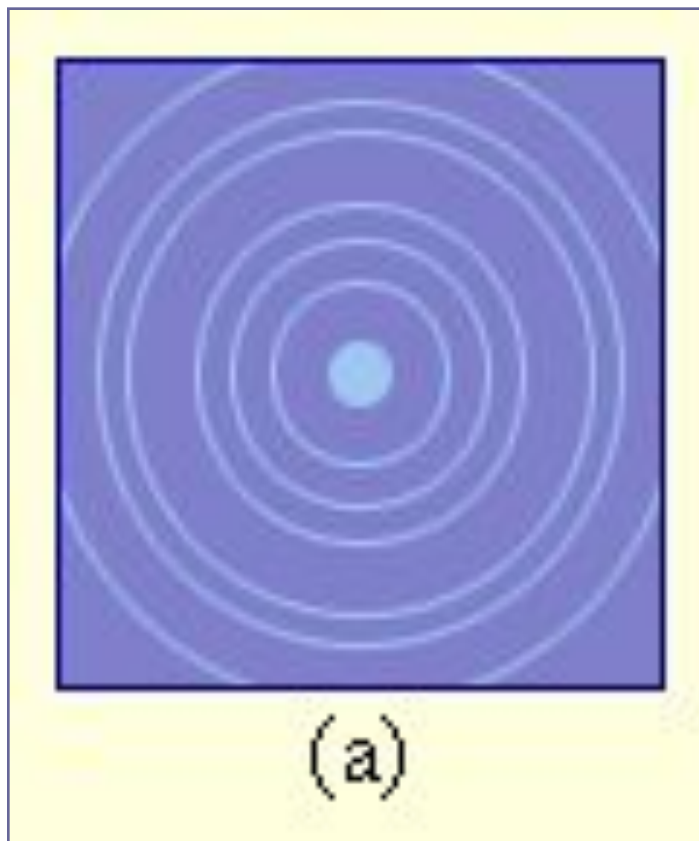
Длина волны

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

длина волны де Бройля

Корпускулярно-волновой дуализм - лежащее в основе квантовой механики положение о том, что в поведении микрообъектов проявляются как корпускулярные, так и волновые черты.

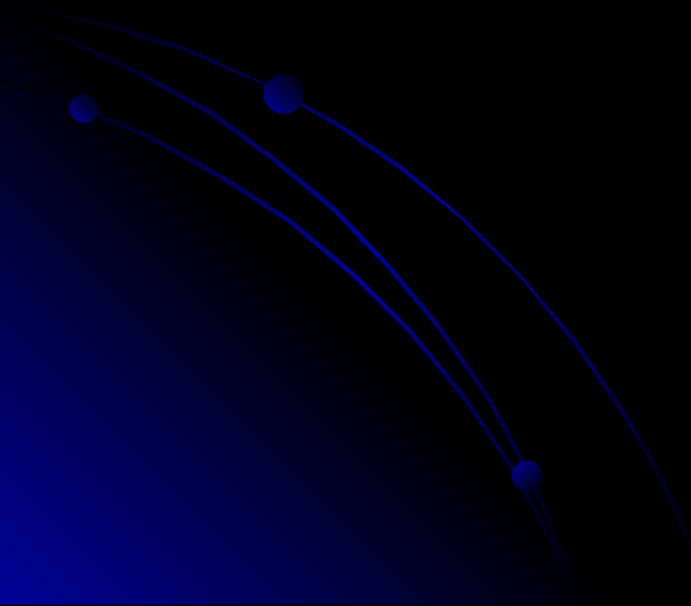
Картина дифракции электронов на поликристаллическом образце при длительной экспозиции (а) и при короткой экспозиции (б)

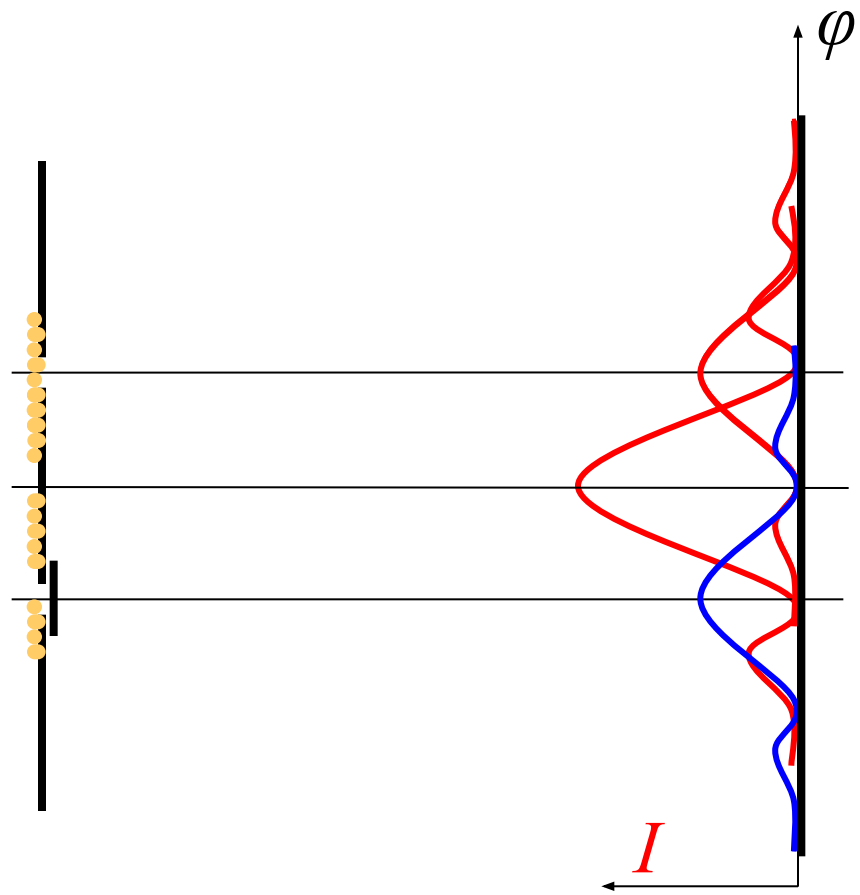


Опыты по дифракции более тяжелых частиц – нейтронов и молекул – на кристаллах полностью подтвердили гипотезу де Бройля.

§ 3. Особенности описания движения микрочастиц.

Соотношения неопределенностей





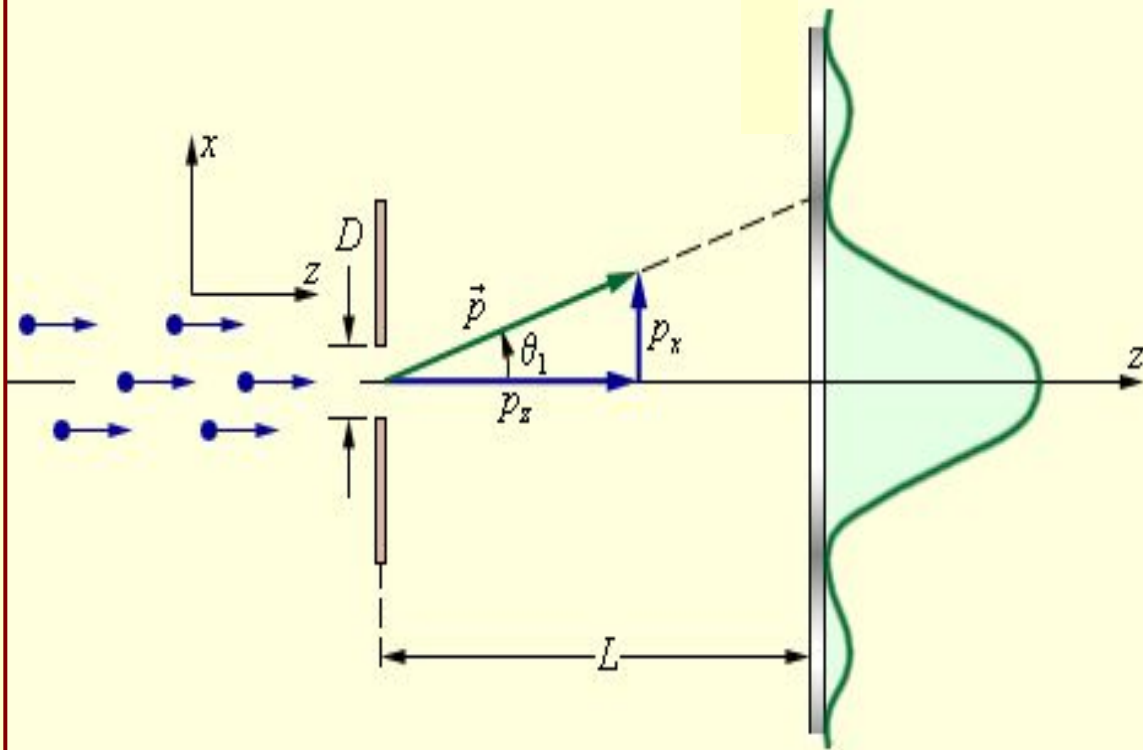
Дифракция электронов на щели

График справа – распределение следов электронов на фотопластинке

Задать одновременно положение электрона и его импульс
НЕВОЗМОЖНО!

В отличие от классической механики, при описании поведения микрочастиц существует принципиальный предел точности, с которой физич. величины могут быть указаны и измерены.

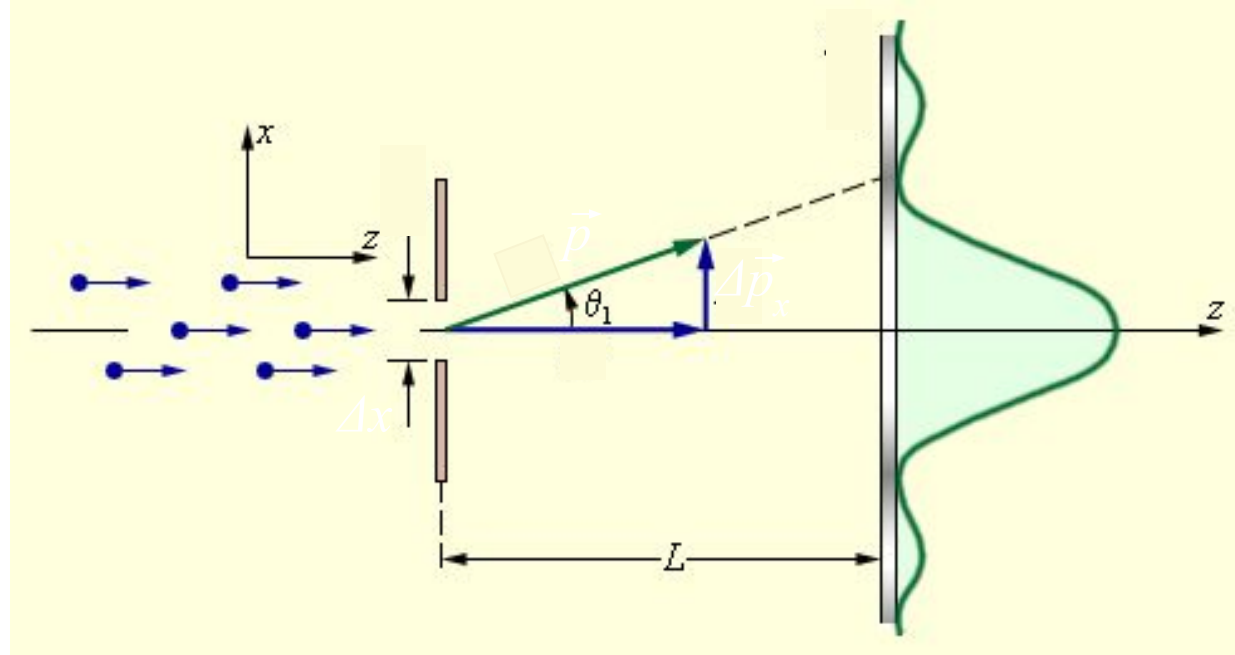
Количественные соотношения, выражающие этот принцип, называют **соотношениями неопределенностей.**



Соотношение неопределенностей Гейзенберга

$$\Delta p_x \Delta x \geq \frac{\hbar}{2}$$

$$\Delta p_x = p \sin \theta_1$$



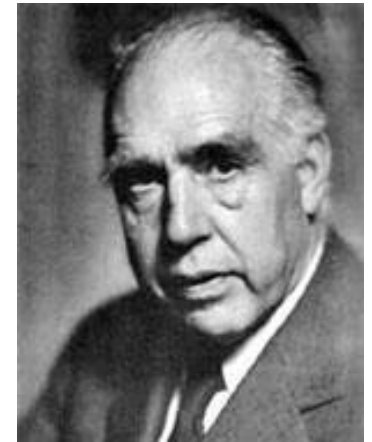
Гейзенберг
(Heisenberg) Вернер
(1901 – 1976)

$$\Delta p_y \Delta y \geq \frac{\hbar}{2}$$

$$\Delta p_z \Delta z \geq \frac{\hbar}{2}$$

Соотношение неопределенностей Бора

$$\Delta E \cdot \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}$$



Бор (Bohr)
Нильс Хендрик Давид
(1885 – 1962)

- В природе объективно не существует состояний частицы с точно определенными значениями x и p_x .

$$\Delta p_x \Delta x \geq \frac{\hbar}{2}$$

- Для измерения энергии с погрешностью ΔE необходимо время, не меньшее

$$\Delta t \approx \frac{\hbar}{\Delta E}$$

- Естественное уширение спектральных линий ΔE связано с временем жизни атома в возбужденном состоянии:

$$\Delta E \approx \frac{\hbar}{\tau}$$

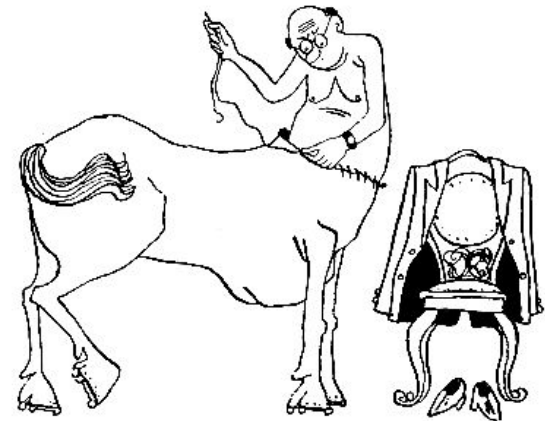
ПРИНЦИП ДОПОЛНИТЕЛЬНОСТИ

- методологический принцип, сформулированный Нильсом Бором применительно к квантовой физике, согласно которому, для того чтобы наиболее адекватно описать физический объект, относящийся к микромиру, его нужно описывать во взаимоисключающих, дополнительных системах описания, например одновременно и как волну, и как частицу.

«...Признается допустимым взаимоисключающее употребление двух языков, каждый из которых базируется на обычной логике. Они описывают исключают друг друга физические явления. Принцип дополнительности - это признание того, что четко построенные логические системы задают модели, которые ведут себя и как внешний мир, и не так. Одной логической конструкции оказывается недостаточно для описания всей сложности микромира. Требование нарушить общепринятую логику при описании картины мира со всей очевидностью впервые появилось в квантовой механике - и в этом ее особое философское значение..».

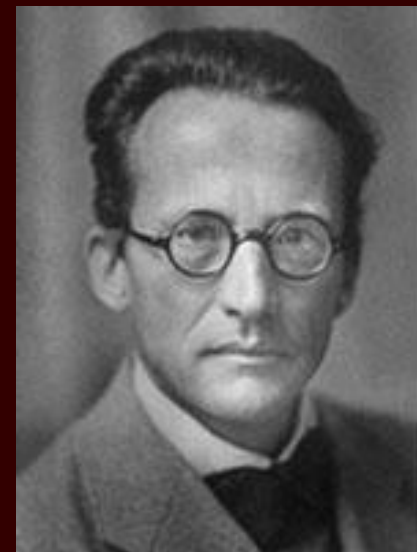
ГЁДЕЛЬ

(Godel) Курт (1906-1978) — австр. логик и математик.: «..если ... формальная система непротиворечива, то она неполна. «



Бор.

§3. Уравнение Шрёдингера



Шрёдингер (Schrödinger)
Эрвин
(1887 – 1961)

Движению частицы Шрёдингер сопоставил плоскую волну:

$$\psi(x, t) = Ae^{-i(\omega t - kx)} \quad \left\{ \text{По формуле Эйлера: } e^{\pm i\varphi} = \cos \varphi \pm i \sin \varphi \right\}$$

$$(\psi(x, t) = A \cos(\omega t - kx))$$

$$\omega = 2\pi\nu = \frac{2\pi E}{h} = \frac{E}{\hbar}; \quad k = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{p}{\hbar};$$

$$\psi(x, t) = Ae^{\frac{i}{\hbar}(px - Et)}$$

волновая функция – решение ур.
Шрёдингера

При наличии внешнего силового поля: $\frac{p^2}{2m} = E - U$.

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + U\psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}$$

- уравнение Шрёдингера

$$\frac{d^2 \psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U)\psi = 0$$

- уравнение Шрёдингера
для стационарных состояний
в одномерном случае

Свойства волновой функции

$$\psi(x, t) = Ae^{\frac{i}{\hbar}(px - Et)}$$

1. Однозначна и непрерывна.
2. Физический смысл ВФ - вероятность обнаружения частицы в объеме dV :

$$dP = |\psi|^2 dV = \psi^* \psi dV$$

$$\frac{dP}{dV} = p = \psi^* \psi = |\psi|^2$$

- плотность вероятности нахождения частицы в данной точке пространства

3. Условие нормировки:

$$\int_V |\psi|^2 dV = 1$$

Условие нормировки отражает факт реальности существования рассматриваемой частицы: вероятность обнаружить ее «хоть где-нибудь» во всем пространстве равна 1.

Аппарат квантовой механики

$$\nabla^2 \psi + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U) \psi = 0$$

(подставляем $U(r)$ + граничные условия, и решаем)

Получаем:

$$\{E_1, E_2, \dots, E_n\}$$

(спектр энергий)

$$h\nu = E_n - E_m$$

(спектр излучения)

$$\psi(x, t) = \psi_0 e^{\frac{i}{\hbar}(px - Et)}$$

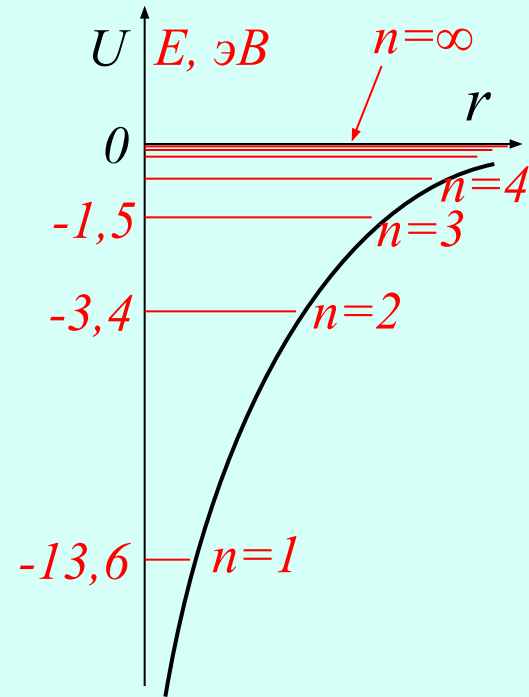
$$dP = |\psi|^2 dV = \psi^* \psi dV$$

$$\int_0^{\infty} |\psi|^2 \cdot dV = 1$$

§ 4. Уравнение Шредингера для атома водорода. Квантовые числа

$$\nabla^2 \psi + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U) \psi = 0$$

$$U = -k \frac{e^2}{r}$$



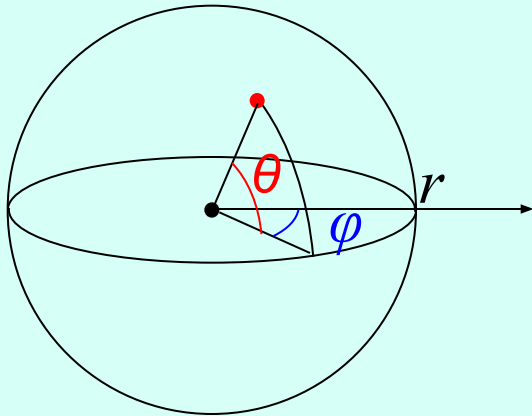
1. $E > 0$ - значение энергии изменяется непрерывно.
2. $E < 0$ - энергия изменяется дискретно:

$$E_n = -\frac{k^2 m e^4}{2 \hbar^2 n^2}$$

$n = 1, 2, 3, \dots$ - главное квантовое число определяет энергию электрона

Решение уравнения Шредингера для электрона
в атоме водорода:

$$\psi(r, \varphi, \theta) = A e^{-r/r_0} e^{im\varphi} \sum_{j=0}^{n-l-1} a_j \left(\frac{2r}{r_0} \right)^{l-j} \sin^{|m|} \theta \sum_{j=0}^{l-|m|} b_j \cos^j \theta$$



$n = 1, 2, 3, \dots$ - главное квантовое число

$l = 0, 1, 2, 3, \dots, (n-1)$ - азимутальное
(орбитальное)
квантовое число

$m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots, \pm l$ - магнитное
квантовое число

Физический смысл (n, l, m) в атоме водорода

■ Главное квантовое число n
определяет энергию уровня:

$$E_n = -\frac{k^2 m e^4}{2 \hbar^2 n^2} \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

■ Орбитальное кв. ч. l
определяет модуль момента
импульса:

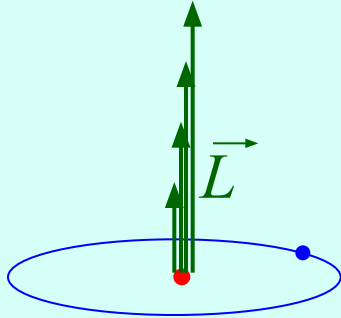
$$L = \hbar \sqrt{l(l+1)} \quad l = 0, 1, 2, 3, \dots, (n-1)$$

■ Магнитное кв. ч. m
определяет направление L -
проекцию момента
импульса на ось OZ :

$$L_z = m \hbar$$

$$m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots, \pm l$$

Азимутальное квантовое число $l = 0, 1, 2, 3, \dots, (n-1)$



Орбитальный
момент импульса

$$L = \hbar \sqrt{l(l+1)}$$

Кв. число l	0	1	2	3	4
Состояние (a)	s	p	d	f	g

на - обозначение состояний : $2s, 3p$ ($m=0, 1, -1$)

Магнитное квантовое число

$$m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots, \pm l$$

Проекция момента импульса

$$L_z = m\hbar$$

§ 5. Спин элементарных частиц.
Фермионы и бозоны.
Принцип Паули

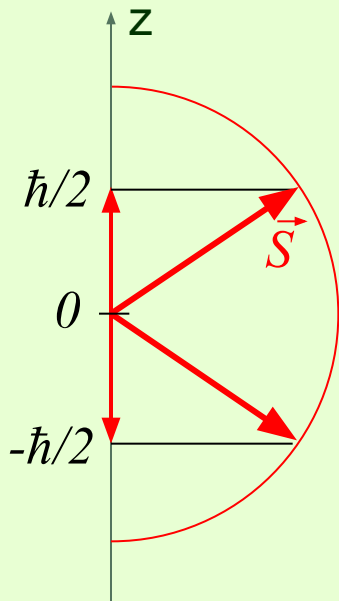


Паули
Вольфганг Эрнст
(1890 – 1958)

Из опыта: электрон обладает собственным
моментом импульса - **СПИНОМ**

$$S = \hbar \sqrt{s(s+1)}; \quad s - \text{спиновое число}$$

$$s = 1/2$$



Проекция спина:

$$S_z = m_s \hbar$$

$$m_s = \pm s = \pm \frac{1}{2}$$

спиновое
квантовое
число

Ферми-частицы (фермионы) – частицы с полуцелым спином: лептоны (в том числе, электроны), нуклоны ($s = 1/2$), ядра с нечетным числом нуклонов ($s = 1/2; 3/2; 5/2, \dots$)

Подчиняются принципу Паули.

Принцип Паули

В одном и том же атоме (или какой-либо другой квантовой системе) не может быть двух электронов (либо других частиц с полуцелым спином), обладающих одинаковой совокупностью квантовых чисел $\{s, l, m, n\}$.

Бозе-частицы (бозоны) – частицы с целочисленным спином или спином, равным нулю: мезоны ($s = 0$), фотоны ($s = 1$), ядра с четным числом нуклонов ($s = 0$ или 1).

Бозоны не подчиняются принципу Паули: в любом квантовом состоянии может находиться неограниченное число бозонов.

$$S = \hbar \sqrt{s(s+1)};$$

1. Для электрона и других легких частиц (позитрон, мюоны, нейтрино)
2. Для средних частиц (мезонов)
3. Для нуклонов (протон, нейтрон)
4. Для фотонов

$$s = 1/2$$

$$s = 0$$

$$s = 1/2$$

$$s = 1$$

Для ядер:

- с четным числом протонов и четным числом нейтронов

$$s = 0$$

- с четным числом нуклонов (протоны плюс нейтроны)

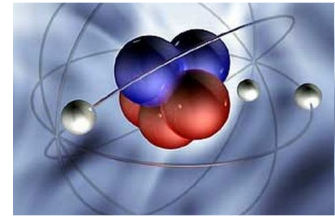
$$s = 0 \text{ или } 1$$

- с нечетным числом нуклонов

$$s = 1/2; 3/2; 5/2, \dots$$

полуцелый спин

Квантовая механика (итог)



- Описывает процессы микромира (физика атома и ядра)
- У квантовых объектов (например, электрон в атоме) свойства волны и частицы находятся в единстве

- Все законы квантовой механики имеют **вероятностный** характер, точные значения всех ФВ принципиально неизвестны:

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

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

- Значения всех ФВ (энергия, импульс, момент импульса и др.) квантуются.

- Существует ряд ограничений: принцип Паули, правила отбора при квантовых переходах, невозможность одновременного измерения 2 ФВ