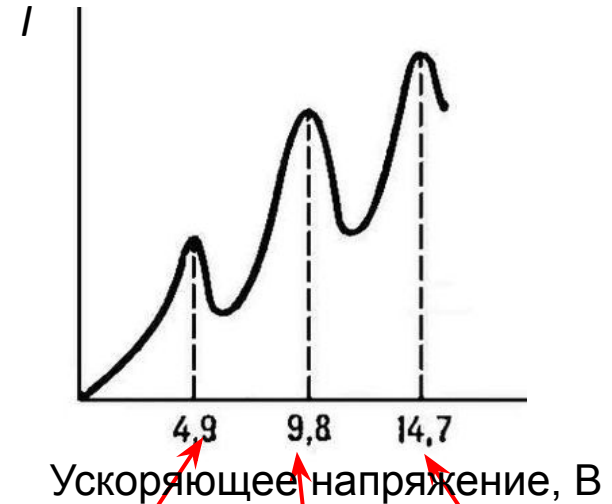
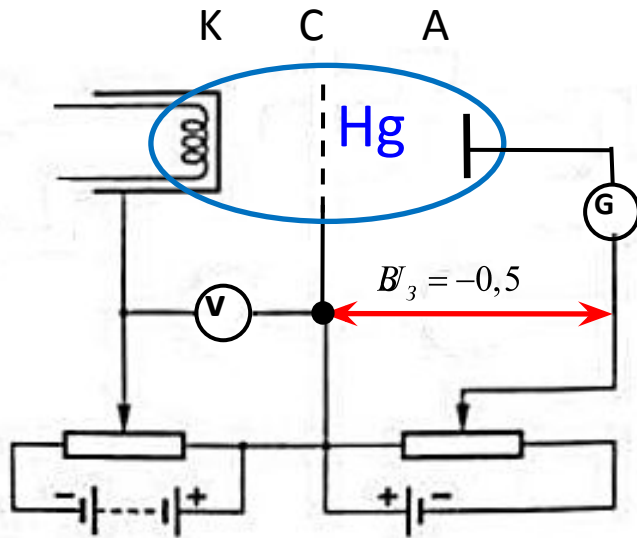


Опыт Франка и Герца (1914).

Результат эксперимента:



1. Пары Hg в откаченном объёме;
2. Катод-сетка: ускор. разность потенциалов
3. Сетка-анод: задерживающая разность потенциалов

Атом поглощает энергию (механическую) дискретно!

Доказательство 1-го постулата Бора.

Начало неупругих взаимодействий

Начало 2-х ВОЗМОЖНЫХ неупругих ...

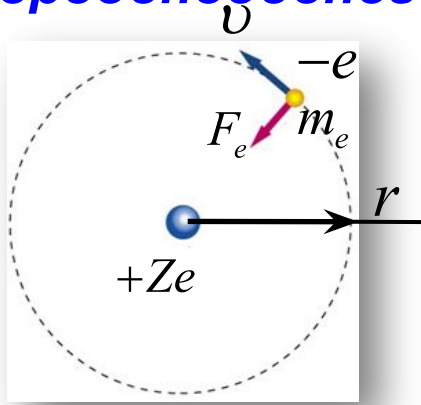
...3-х...

Комптон 1925. При $U > 4.9$ В атомами ртути излучается свет с $\lambda = 0.2537$ мкм (УФ)

$\lambda = 0.2537$ мкм \longleftrightarrow Фотон $h\nu = 4.9$ эВ

Доказательство второго постулата Бора

Боровская модель атома водорода, водородоподобного иона



1-ый п-т. Бора \Rightarrow

$$m_e v r = n \hbar$$

$$(n = 1, 2, 3, \dots)$$

2-ой з-н Н. \Rightarrow

$$\frac{m_e v^2}{r} = \frac{Z e^2}{4 \pi \epsilon_0 r^2}$$

1 ЭЛЕКТРОН
В ПОЛЕ
ЯДРА С
ЗАРЯДОМ
 $+Ze$

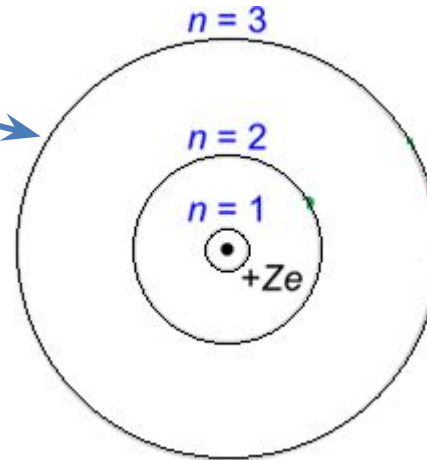
v, r

Радиусы боровских орбит

$$\Rightarrow r_n = \frac{h^2 \epsilon_0}{\pi m_e Z e^2} \cdot n^2$$

Скорость электрона на боровских орбитах

$$\Rightarrow v_n = \frac{Z e^2}{2 h \epsilon_0} \cdot \frac{1}{n}$$



Атом H, Z=1

$$r_1 = 0.53 \cdot 10^{-10} \text{ м} = 0.53 \text{ \AA}$$

$$v_1 = 2 \cdot 10^6 \text{ м/сек}$$

Энерг

$$E = E_{\text{кин}} + E_{\text{пот}} = \frac{m_e v^2}{2} - \frac{Z e^2}{4 \pi \epsilon_0 r} = -\frac{m_e Z^2 e^4}{8 h^2 \epsilon_0^2} \cdot \frac{1}{n^2}$$

$$E_n = -\frac{m_e Z^2 e^4}{8 h^2 \epsilon_0^2} \cdot \frac{1}{n^2}$$

Энергетические уровни атома водорода в модели Бора

$$E_n = -\frac{m_e Z^2 e^4}{8h^2 \varepsilon_0^2} \cdot \frac{1}{n^2}$$

2-ой постулат
Бора

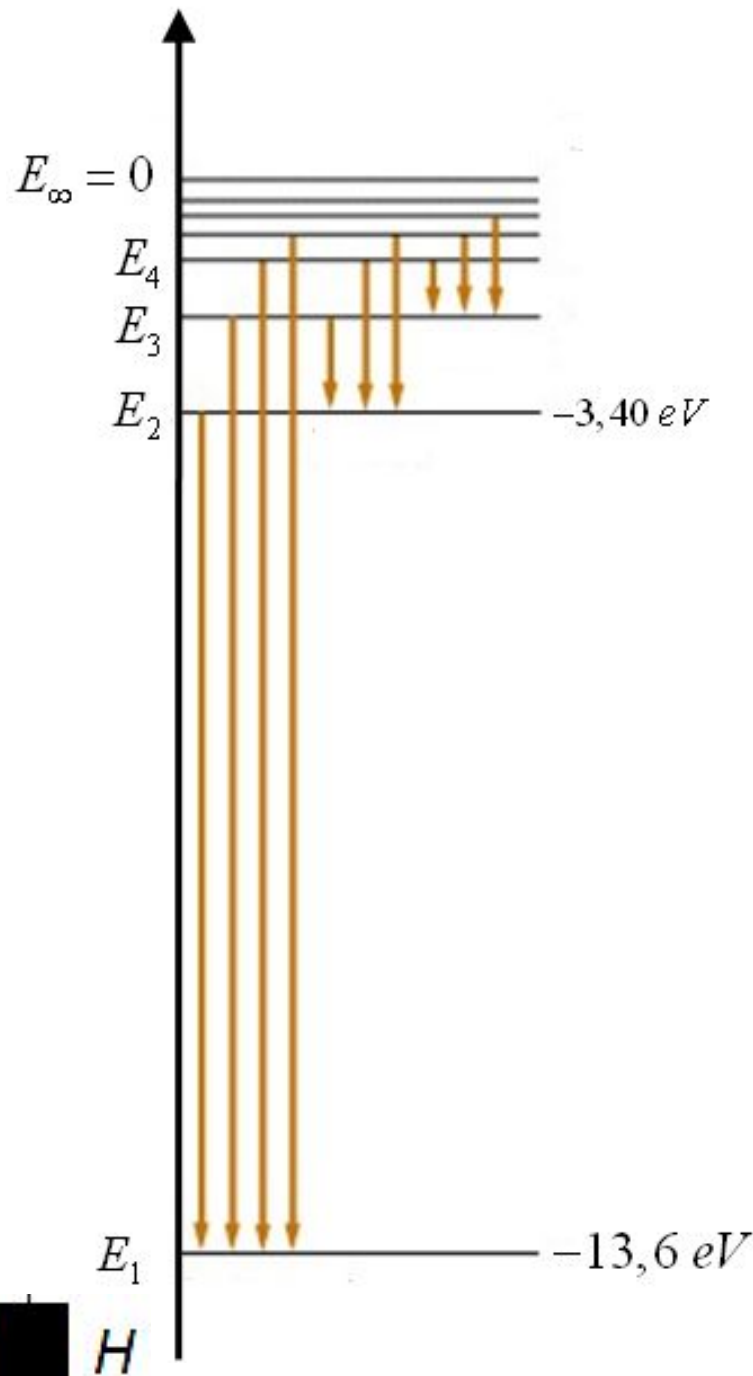
$$\rightarrow E_n - E_m = h\nu$$

Обобщенная
формула Бальмера

$$\omega = R \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right)$$

$$n > m$$

$$R = 2,07 \cdot 10^{16} \text{ рад} / c$$



2-ой постулат

Бора

$$\rightarrow E_n - E_m = h\nu \quad E_n = -\frac{m_e Z^2 e^4}{8h^2 \varepsilon_0^2} \cdot \frac{1}{n^2} > E_m = -\frac{m_e Z^2 e^4}{8h^2 \varepsilon_0^2} \cdot \frac{1}{m^2}$$

$n > m$

$$\nu = \frac{1}{h}(E_n - E_m) = \frac{m_e Z^2 e^4}{8h^3 \varepsilon_0^2} \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right)$$

Постоянная
Ридберга

$$\omega = 2\pi\nu = \frac{\pi m_e Z^2 e^4}{4h^3 \varepsilon_0^2} \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right) = R \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right)$$

Формула
Бальмера!

$$R = \frac{\pi m_e Z^2 e^4}{4h^3 \varepsilon_0^2}$$

$$Z=1 \Rightarrow R = \frac{\pi m_e e^4}{4h^3 \varepsilon_0^2} = \frac{3,14 \cdot 9,1 \cdot 10^{-31} \cdot (1,6 \cdot 10^{-19})^4}{4 \cdot (6,6 \cdot 10^{-34})^3 \cdot (8,85 \cdot 10^{-12})^2} = 2,07 \cdot 10^{16} \text{ рад/с}$$

Формула
Бальмера

$$\omega = R \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right)$$

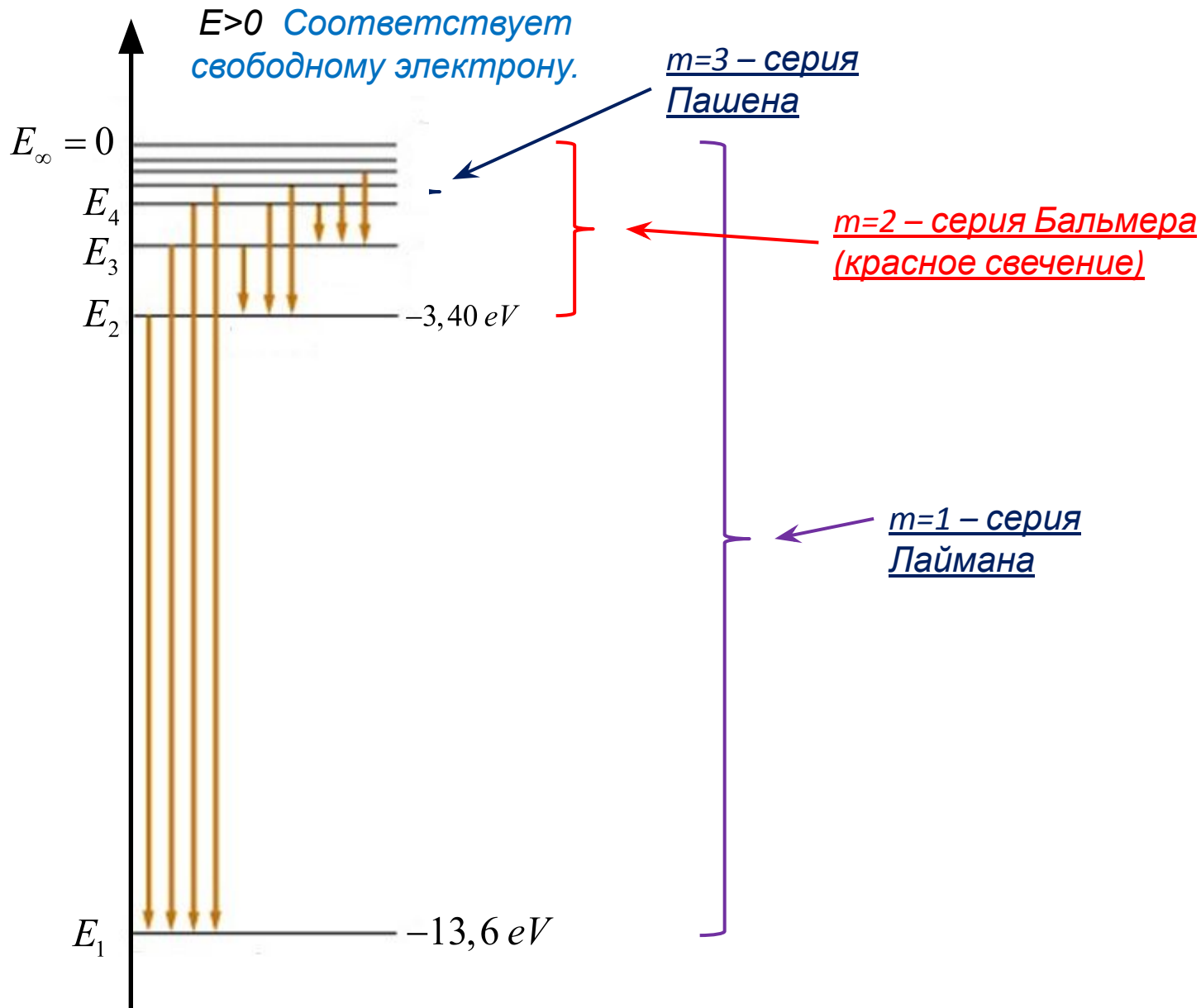
$$n = 3, 4, 5, \dots$$

$$R = 2,07 \cdot 10^{16} \text{ рад/с}$$

Теория
Бора

(!!)

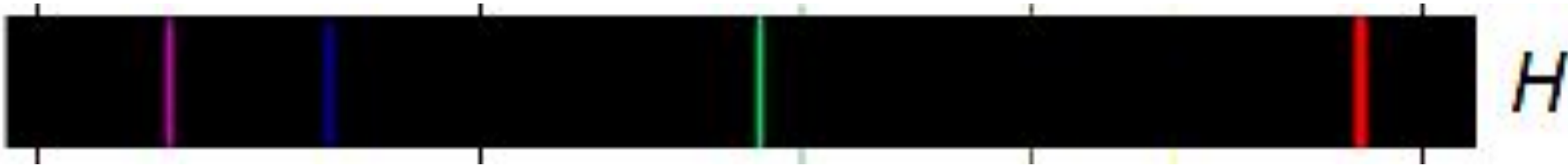
Эксперимент



Недостатки теории Бора

Не удаётся рассчитать атомы с двумя (атом He) и более электронами.

Ничего не говорит об интенсивности линий излучения (а она разная для разных линий (например, водород светится красным, а почему не зелёным?).



Основной недостаток — непоследовательность:

вычисление орбит на основе законов классической механики, считая при этом неприменимой классическую электродинамику.

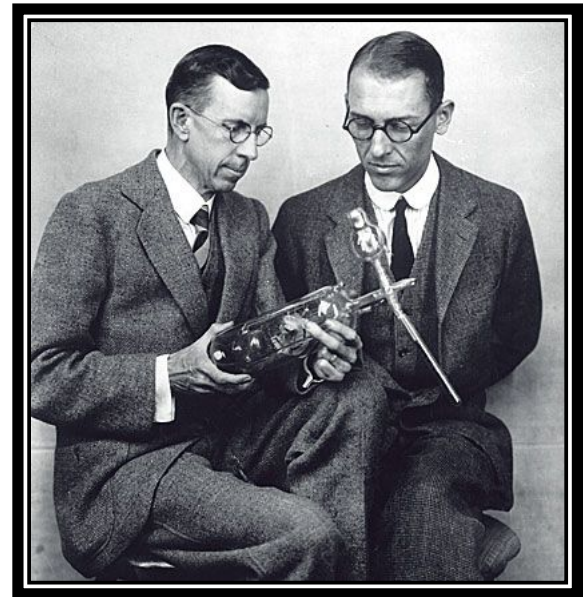
МОДЕЛЬ АТОМА БОРА -

промежуточный этап в поисках адекватной теории, получившей название квантовой физики.

Гипотеза де-Бройля.
Опыты по дифракции
электронов.



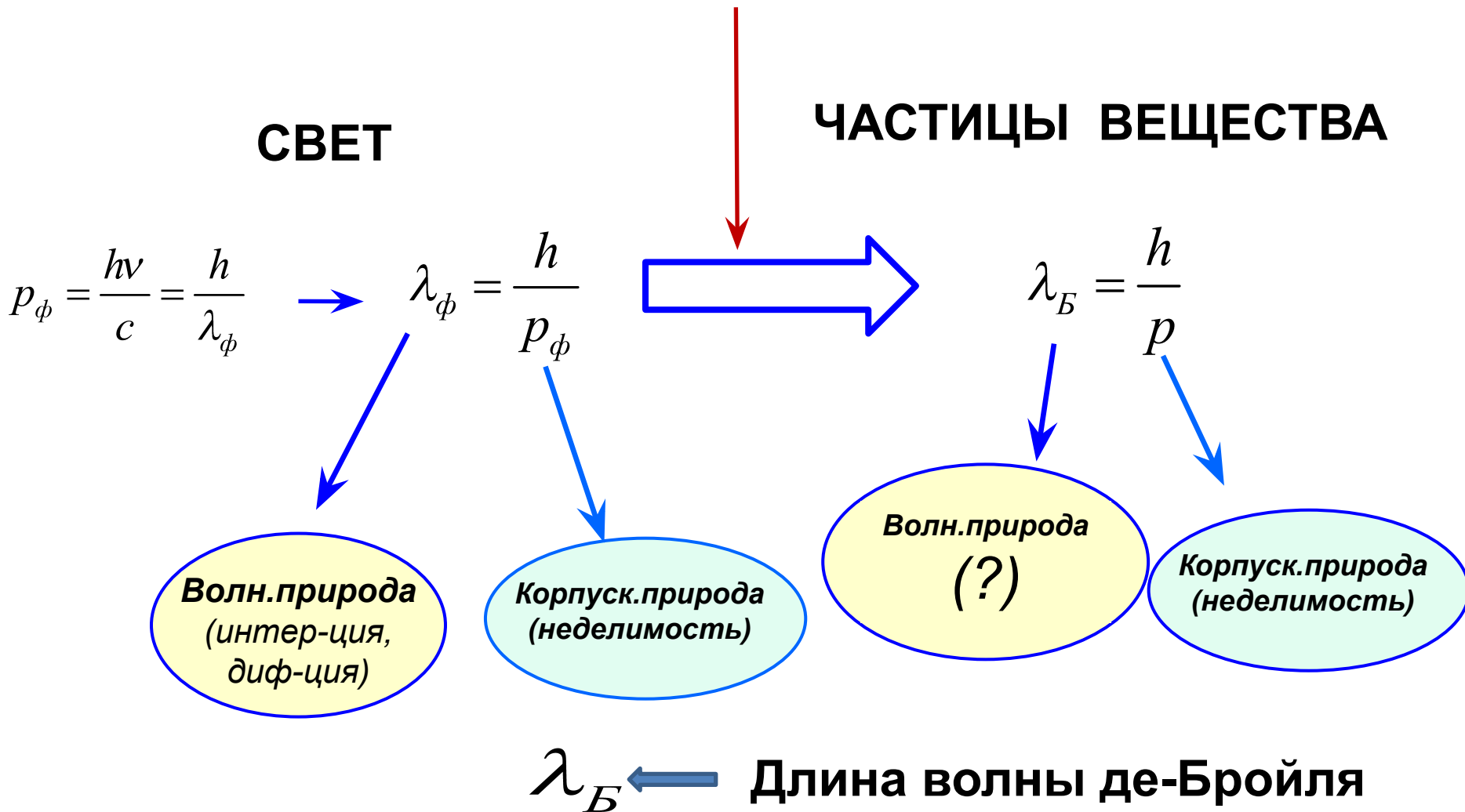
1924 г.
Де-Бройль



1927 г.
Дэвиссон и
Джермер

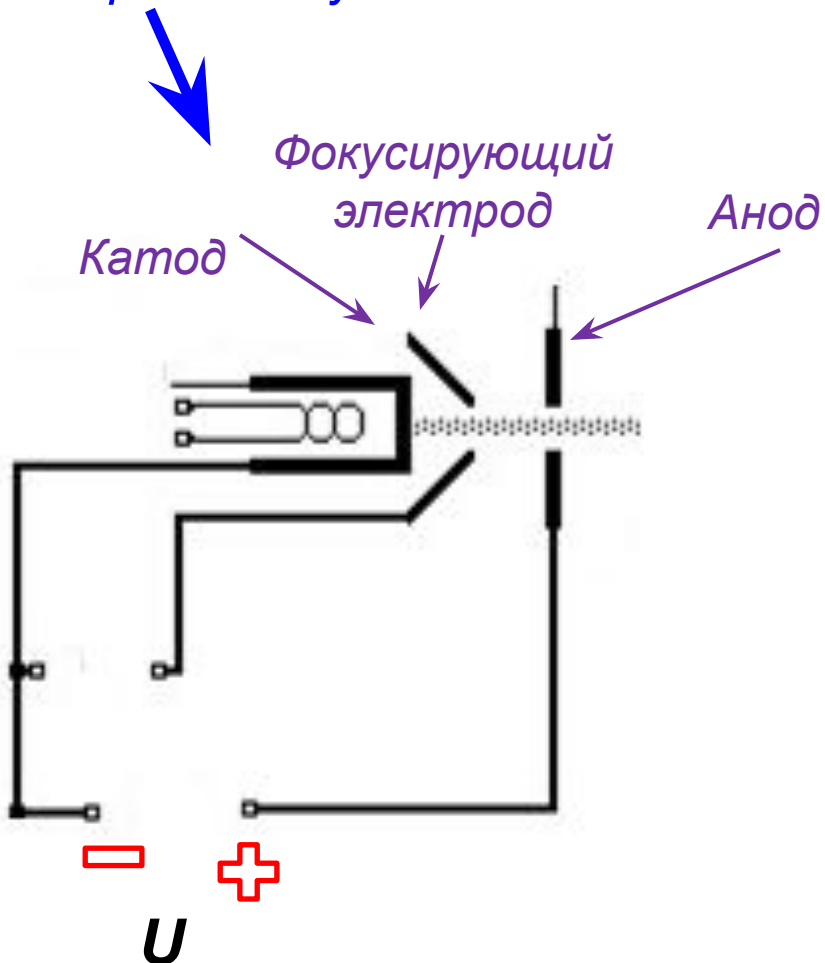
Гипотеза де-Бройля (1924):

«Корпускулярно-волновой дуализм - универсален»



Оценка длины волны де-Бройля для электронов.

Электронная пушка



$$eU = \frac{m_e v^2}{2} \Rightarrow v = \sqrt{\frac{2eU}{m_e}}$$



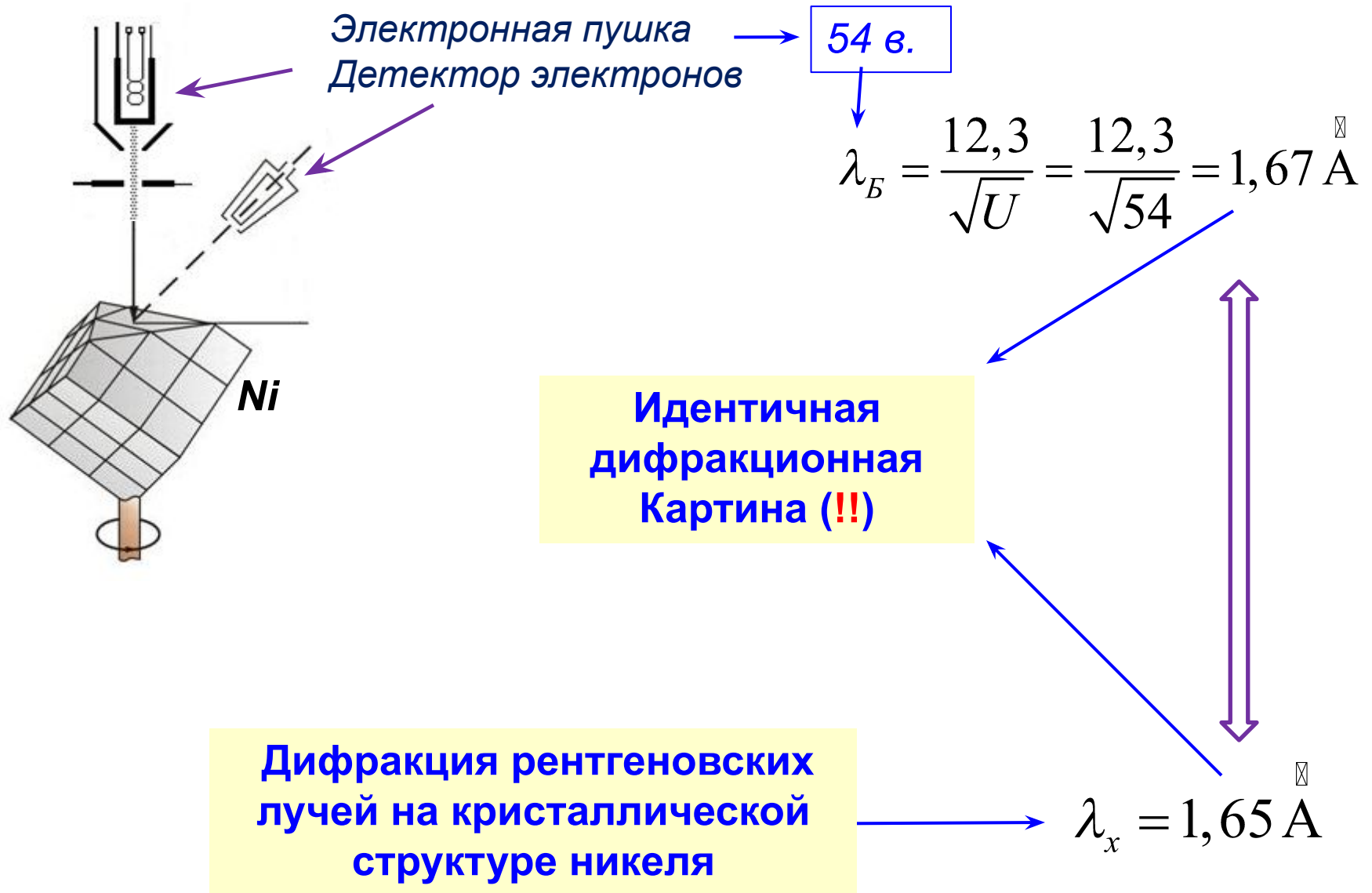
$$\lambda_B = \frac{h}{p} = \frac{h}{m_e v} = \frac{h}{\sqrt{2em_e U}}$$

$$\lambda_B = \frac{12,3 \text{ \AA}}{\sqrt{U}} \quad [U] - B$$

$$1 \text{ \AA} = 10^{-10} \text{ м}$$

$$U = 54 \text{ В} \Rightarrow \lambda_B = \frac{12,3}{\sqrt{54}} = \frac{12,3}{\sqrt{54}} = 1,67 \text{ \AA}$$

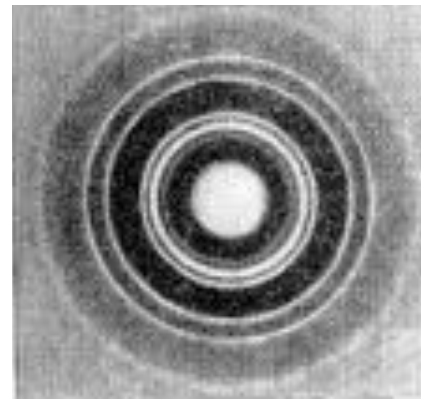
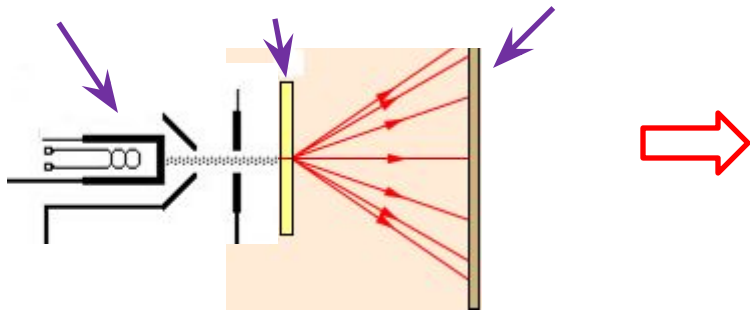
Опыты Дэвиссона и Джермера: первое подтверждение идеи де-Бройля



Дальнейшие опыты по дифракции микрочастиц.

Томсон и одновременно Тартаковский: дифракция при прохождении электронного пучка через металлическую фольгу (1927).

Эл.пучка фольга фотопластинка



Электронограмма

Полная аналогия с рентгенограммой при $\lambda_{\text{x-ray}} = \lambda_e$

Штерн & К.: дифракционные явления в опытах с атомными и молекулярными пучками.

Доказаны волновые свойства частиц!

Каждой ? Или совокупности ?

$$\longleftrightarrow \lambda_B = \frac{h}{m\nu} \propto \sqrt{\frac{1}{mE_k}}$$

Длина волны де Бройля для атомов имеет тот же масштаб, что и для электронов, благодаря малой (тепловой) скорости.

Биберман, Сушкин и Фабрикант (1949): Опыты по дифракции электронов с пучками слабой интенсивности

Электрон

регистрировался как



«КОРПУСКУЛЯРНОСТЬ»

одно целое

Место прихода электрона на фотопластинку имело **случайный характер**. При достаточной экспозиции **получалась дифракционная картина**.



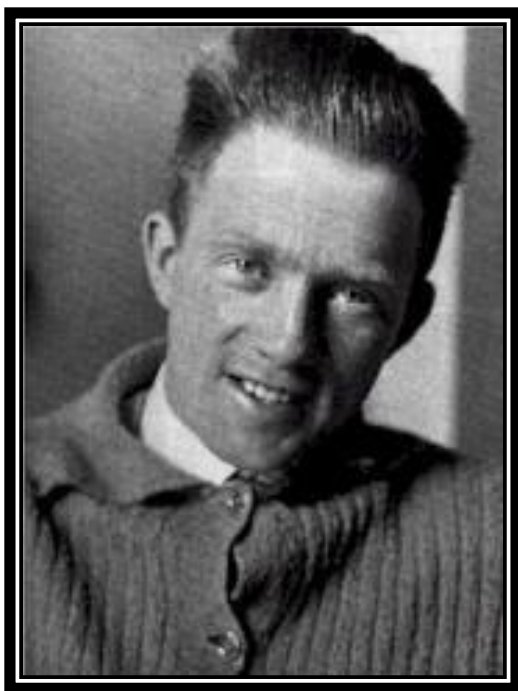
«ВОЛНОВЫЕ СВОЙСТВА»

Вывод. Единичная частица обладает волновыми свойствами. А именно, её положение в пространстве определяется вероятностным законом и этот вероятностный закон таков, что при усреднении (по времени или по большому числу частиц) реализуется волновая картина.

Усреднение по времени (пускаем электроны по одному и ждём пока их не придёт достаточно много) или по большому числу частиц в потоке (много электронов одновременно, видим мгновенную картину) эквивалентно.

В то же время **микрочастицы обладают свойствами корпускулярности**: масса, размеры, заряд - неделимы.

*Принцип
неопределённости
Гейзенберга (1927г).*



*Гейзенберг, Вернер Карл
(1901-1976)*

Оптика:

При каких то условиях свет в однородной среде распространяется в виде прямолинейных лучей



Можно говорить о фотонах (частицах), движущихся по прямолинейным траекториям.

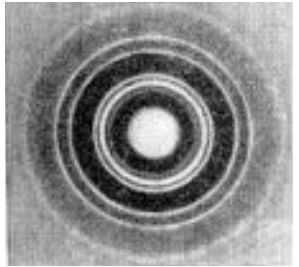
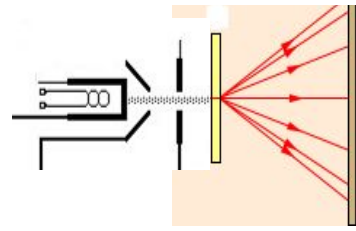
При других условиях наблюдается дифракция, т.е. существенно непрямолинейное распространение света, которое описывается, исходя из волновых представлений.



Понятие о траектории фотона здесь неадекватно.

Микрочастицы вещества

Обладают волновыми свойствами: дают такие же дифракционные картины, как и рентгеновские лучи.



Следует ожидать, что при определённых условиях понятия о положении в пространстве и траектории неприменимы к описанию движения микрочастиц.

Принцип неопределённости Гейзенберга

Степень точности, с которой к частице может быть применено представление об её определённом положении в пространстве



Соотношение неопределённости Гейзенберга

Частица не может иметь одновременно точного значения координаты x и проекции импульса на направление x .



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



степень неточности

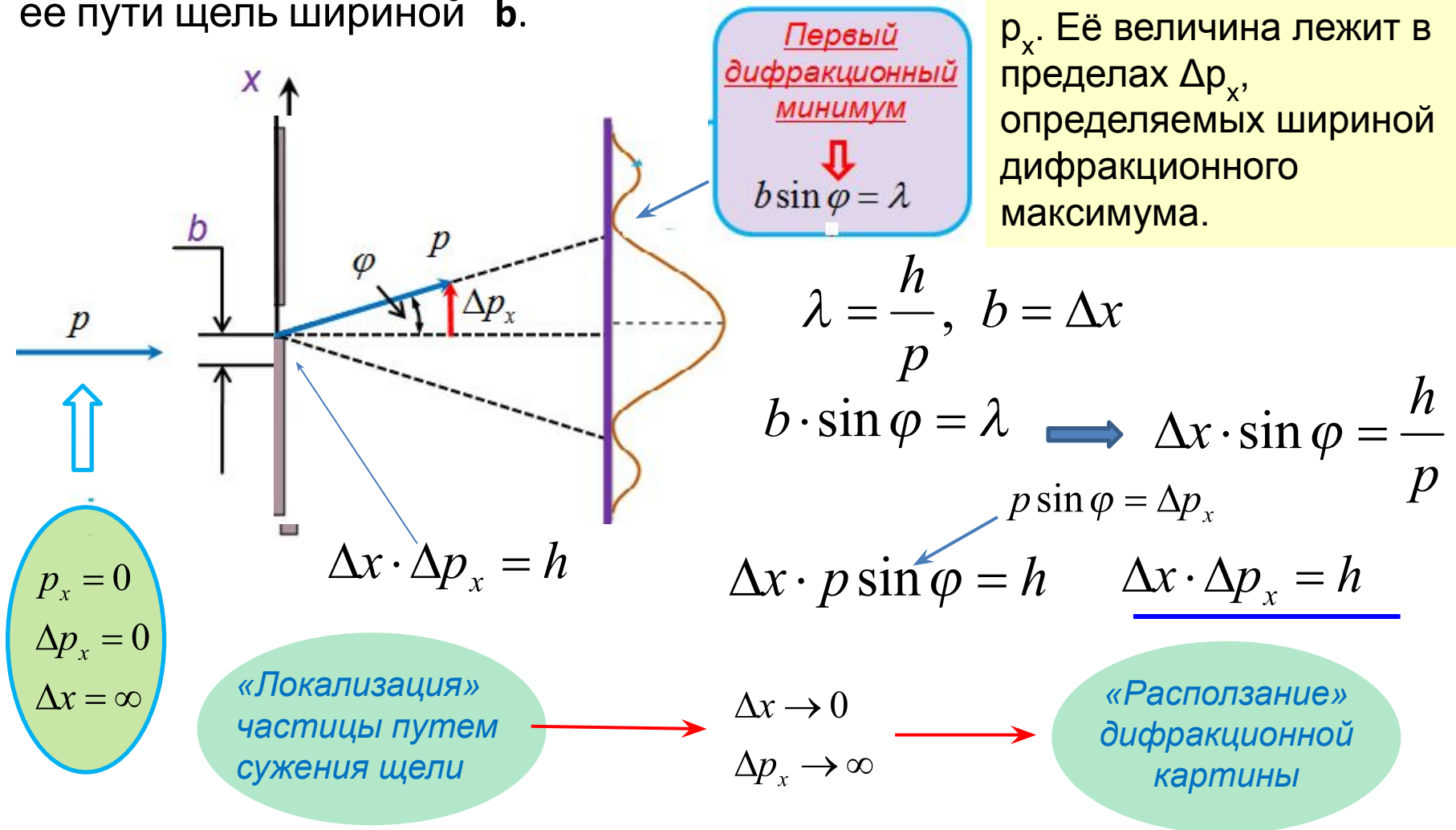
ДО СИХ

Соотношения неопределённости Гейзенберга

$$\Delta p_x \Delta x \geq \frac{\hbar}{2}, \quad \Delta p_y \Delta y \geq \frac{\hbar}{2}, \quad \Delta p_z \Delta z \geq \frac{\hbar}{2}$$

Пример. Определим значение координаты x свободно летящей микрочастицы, поставив на ее пути щель шириной b .

При прохождении щели появляется составляющая p_x . Её величина лежит в пределах Δp_x , определяемых шириной дифракционного максимума.

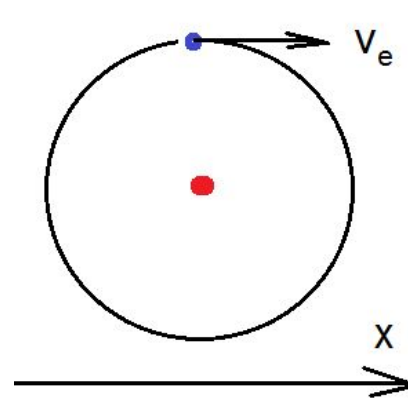


Определенность импульса может быть сохранена путем полной неопределенности координаты (отсутствии преграды со щелью)



Соотношение неопределенности указывает, насколько корректно применять классическую механику к объектам микромира

Пример. Электрон в модели атома водорода Бора.



Атом H , Z=1

$$r_1 = 0.53 \cdot 10^{-10} \text{ м} = 0.53 \text{ \AA}$$

$$v_1 = 2 \cdot 10^6 \text{ м/сек}$$

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



$$\Delta x \geq \frac{\hbar}{2\Delta p_x} = \frac{\hbar}{2m\Delta v_x}$$

$$\Delta v_x \approx 0.5v_x$$

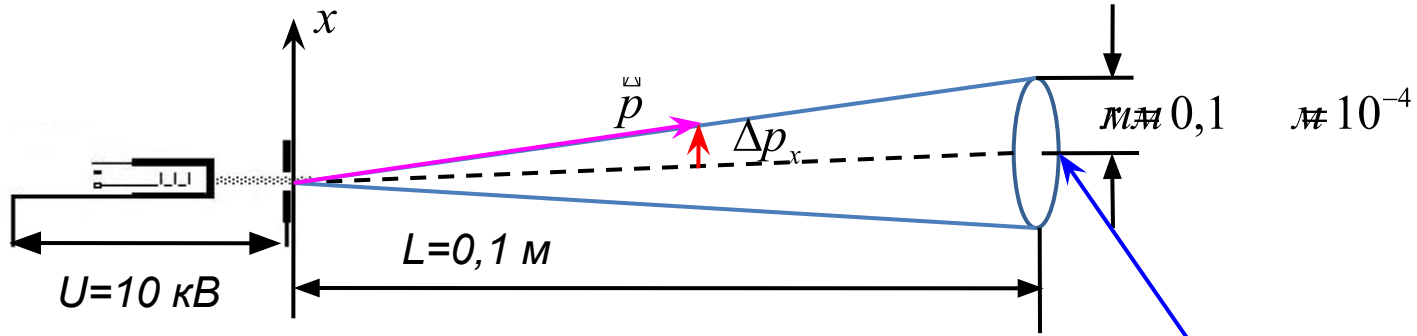
$$v_x = 2 \cdot 10^6 \frac{\text{м}}{\text{сек}}$$

$$\Delta x = \frac{\hbar}{m\Delta v_x} = \frac{6.6 \cdot 10^{-34}}{9.1 \cdot 10^{-31} \cdot 2\pi \cdot 2 \cdot 10^6} \approx 0.5 \cdot 10^{-10} \frac{\text{м}}{\text{сек}} = 0.5 \text{ \AA}$$

$$\underline{\Delta x \geq 0.5 \text{ \AA}}$$

Неопределенность координаты масштаба линейных размеров самого атома. **Понятие круговой орбиты в атоме Бора теряет смысл!**
 Применение классической механики (Бор) – некорректно.

Пример. Движение электрона в электронно-лучевой трубке



Увеличенное изображение «пятна» от луча на экране электронно-лучевой трубки

$$1. \Delta x \geq \frac{\hbar}{2\Delta p_x}$$

$$2. \frac{\Delta p_x}{p} = \frac{r}{L}$$

$$3. eU = \frac{mv^2}{2} = \frac{p^2}{2m}$$

$$\Delta x \geq \frac{\hbar}{2\Delta p_x} = \frac{\hbar L}{2pr} = \frac{\hbar L}{2r\sqrt{2meU}}$$

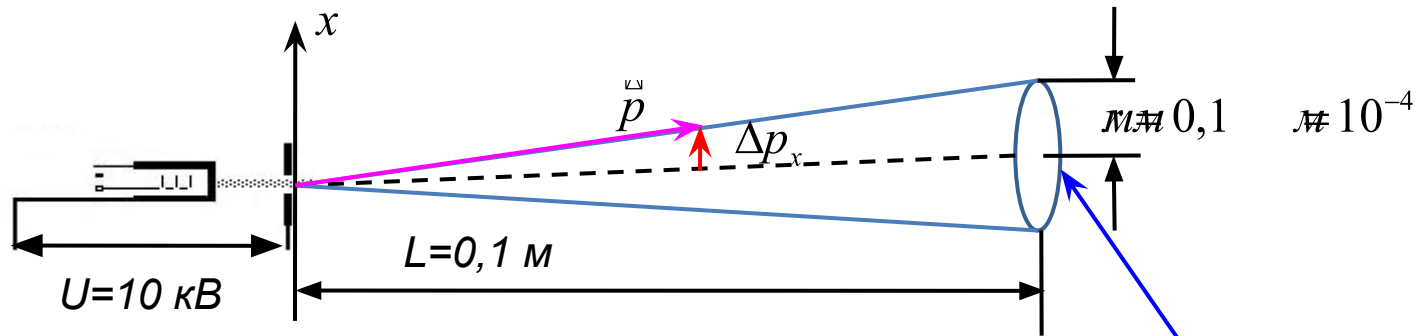
$$\Delta x \geq \frac{6,6 \cdot 10^{-34} \cdot 0,1}{2 \cdot 2 \cdot 3,14 \cdot 10^{-4} \sqrt{2 \cdot 9,1 \cdot 10^{-31} \cdot 1,6 \cdot 10^{-19} \cdot 10^4}} \sim 10^{-9}$$

$$\Delta x \geq 10^{-9} \ll m = 10^{-4}$$

Волновые свойства электронов можно не учитывать. **Понятие траектории – корректно для движения электрона в электронно-лучевой трубке.** Движение электрона можно рассчитывать по законам классической механики несмотря на то, что это микрочастица! Электронная оптика и т.п.

Пример. Движение электрона в электронно-лучевой трубке

Пятно, которое даёт электронный луч на экране, должно восприниматься глазом. Соответственно, его радиус не должен быть меньше ≈ 0.1 мм. Пусть этот размер пятна полностью определяется неопределённостью импульса.



$$\begin{aligned}
 1. \Delta x &\geq \frac{\hbar}{2\Delta p_x} \\
 2. \frac{\Delta p_x}{p} &= \frac{r}{L} \\
 3. eU &= \frac{mv^2}{2} = \frac{p^2}{2m}
 \end{aligned}$$

$$\Delta x \geq \frac{\hbar}{2\Delta p_x} = \frac{\hbar L}{2pr} = \frac{\hbar L}{2r\sqrt{2meU}}$$

$$\Delta x \geq \frac{6,6 \cdot 10^{-34} \cdot 0,1}{2 \cdot 2 \cdot 3,14 \cdot 10^{-4} \sqrt{2 \cdot 9,1 \cdot 10^{-31} \cdot 1,6 \cdot 10^{-19} \cdot 10^4}} \sim 10^{-9}$$

$$\Delta x \geq 10^{-9} \ll m = 10^{-4}$$

Увеличенное изображение «пятна» от луча на экране электронно-лучевой трубки

Волновые свойства электронов можно не учитывать. **Понятие траектории – корректно для движения электрона в электронно-лучевой трубке.** Движение электрона можно рассчитывать по законам классической механики несмотря на то, что это микрочастица! Электронная оптика и т.п.

Пример. Пылинка



$$m = 10^{-12} \text{ г}$$



Линейный размер: $r \approx 10^{-4} \text{ см} = 1 \text{ мкм}$

Будем определять координату пылинки x с точностью $\Delta x = 10^{-6} \text{ см}$.

$\Delta x \ll r$ и $\Delta x \ll \lambda$ (длины волны
видимого света, $\approx 5 \cdot 10^{-5} \text{ см}$)



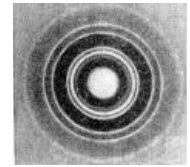
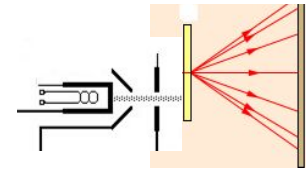
Очень высокая точность!

Какова неопределённость определения скорости?

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2} \quad \Delta v_x \geq \frac{\hbar}{2m\Delta x} = \frac{6,6 \cdot 10^{-34}}{2 \cdot 3,14 \cdot 2 \cdot 10^{-15} \cdot 10^{-8}} \approx \underline{0,5 \cdot 10^{-11} \text{ м/с}}$$

Пылинка – большая; у нее большая масса; она объект макромира и к ней применимы законы классической физики !!

ВОЛНОВАЯ ФУНКЦИЯ



Микрочастицы обладают волновыми свойствами. А именно, их положение в пространстве задаётся определённым вероятностным законом и этот вероятностный закон таков, что при усреднении (по времени или по большому числу частиц) реализуется волновая картина.

Необходимо создать математический формализм, описывающий наблюдаемые в микромире явления и правильно предсказывающий поведение микрочастиц.

Такой формализм был создан



Описание поведения (состояния) микрочастиц с помощью **волновой функции Ψ** .

Вводится комплексная **волновая функция Ψ** , квадрат модуля которой даёт вероятность обнаружения частицы в пределах объёма dV

Вероятность обнаружения частицы в объёме dV

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

Плотность вероятности обнаружения частицы в данной точке пространства.

$$w = \frac{dW}{dV} = |\Psi|^2$$



Нобелевская премия за истолкование статистического смысла Ψ

Макс Борн
(1882-1970)

Для волновой функции Ψ должно быть найдено такое уравнение, чтобы найденная из него Ψ описывала поведение микрочастиц с учётом их волновых свойств.

Уравнение Шредингера.



Эрвин Шредингер
(1887-1961)

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

Уравнение Шредингера

Потенциальная энергия

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} \right) + U\Psi = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}$$



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

Оператор Лапласа

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

Дифференциальное уравнение 2-го порядка в частных производных – основное уравнение нерелятивистской квантовой механики.

Не выводится – физический закон

Стационарное уравнение Шредингера.

Если силовое поле, в котором движется частица, стационарно, т.е. не зависит от времени (U не зависит от t), то уравнение Шредингера имеет вид

Полная энергия системы

$$\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(x, y, z) + (E - U)\psi(x, y, z) = 0$$

Стационарное уравнение Шредингера.

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

Не зависит от времени

3.

Стационарное уравнение Шредингера.

Если силовое поле, в котором движется частица, стационарно, т.е. не зависит от времени, то решение ур-ия Шредингера ищут в виде:

$$\Psi(x, y, z, t) = \psi(x, y, z) \cdot e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$$

$\psi(x, y, z)$ - Координатная часть волновой функции

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

E - Полная энергия частицы

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(x, y, z) \cdot e^{-i\frac{E}{\hbar}t} + U \psi(x, y, z) \cdot e^{-i\frac{E}{\hbar}t} = i\hbar \cdot \psi(x, y, z) \cdot \left(-i\frac{E}{\hbar}\right) e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(x, y, z) + U \psi(x, y, z) = \psi(x, y, z) \cdot E$$

$$\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(x, y, z) + (E - U) \psi(x, y, z) = 0$$



Стационарное уравнение Шредингера.

$$|\Psi|^2 = \Psi \Psi^* = \psi \psi^* = |\psi|^2 \quad \text{Не зависит от времени}$$

$$\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(x, y, z) + (E - U) \psi(x, y, z) = 0$$

Уравнение Шредингера имеет решения при определенных значениях E – **«собственные значения»**.

$$E_n$$

«Собственным значениям» соответствуют **«собственные функции»**, характерные для определенного состояния частицы (квантово-механической системы).

$$\psi_n$$

Квадрат модуля «собственной функции» определяет **вероятность** этого состояния.