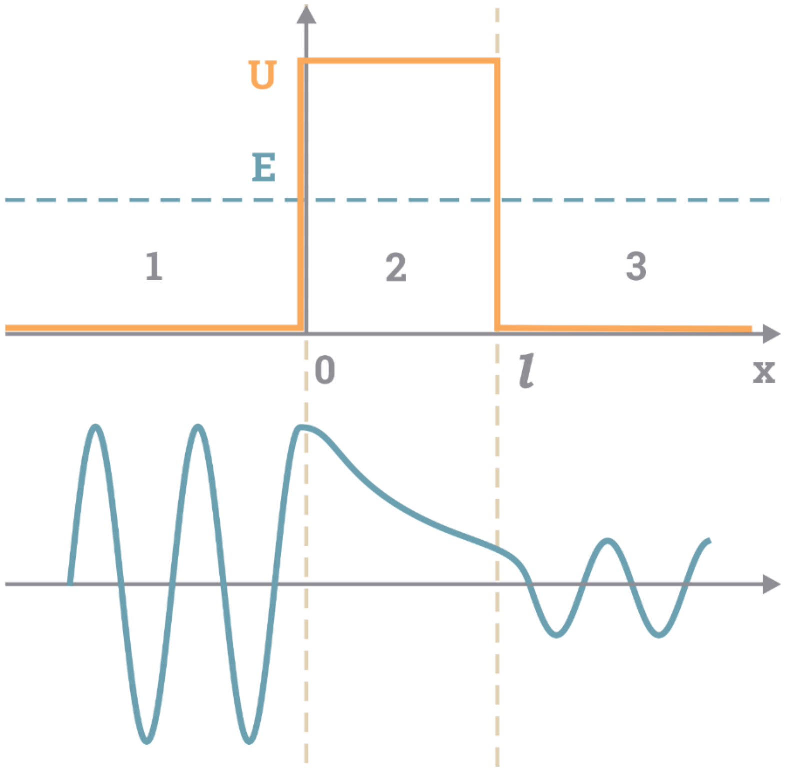
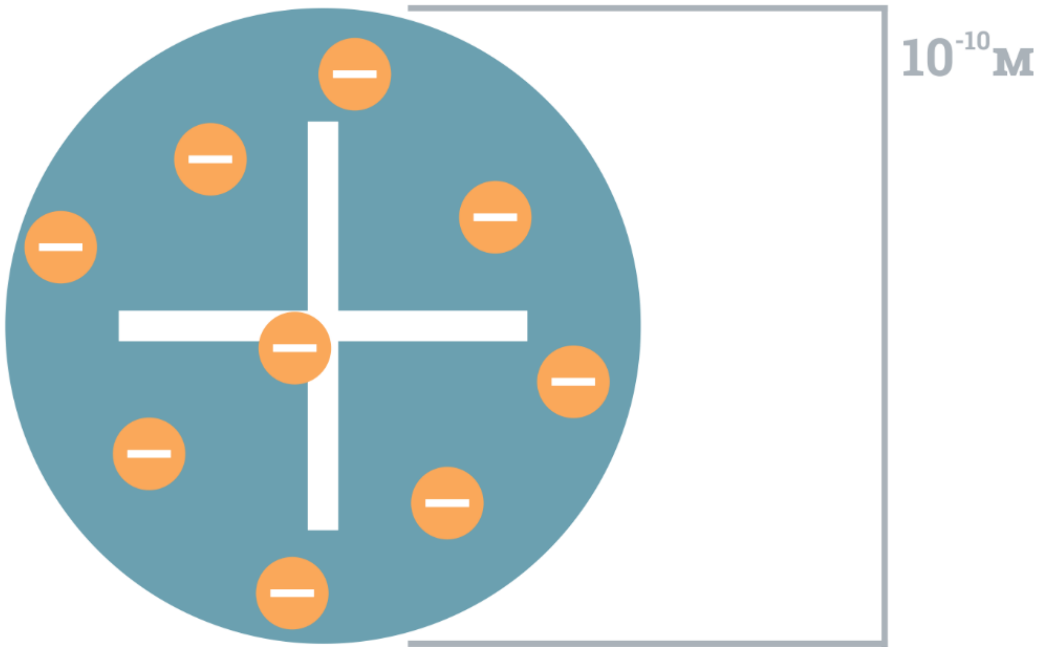


Волны де Бройля
Соотношение неопределённостей
Уравнение Шрёдингера

Квантовая физика

Модель атома Томсона

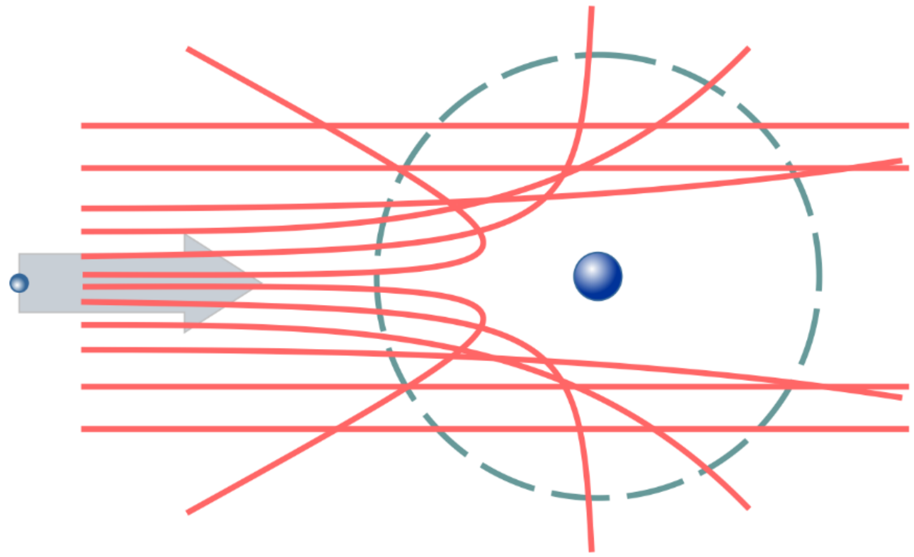
1903 г., Джозеф Джон Томсон

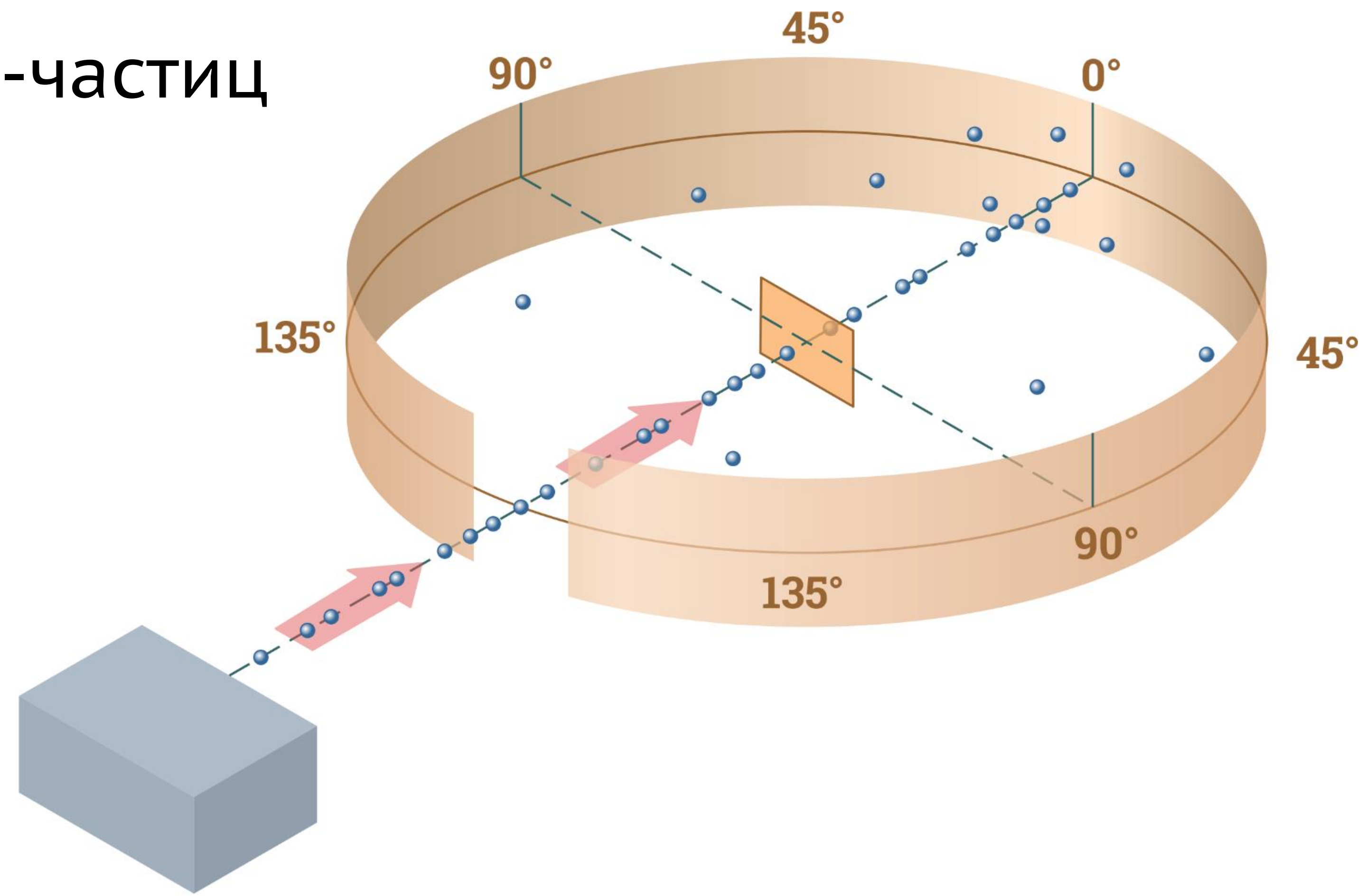


Модель атома Резерфорда

Опыты по рассеянию α-частиц в веществе

α-частица = He_2^4



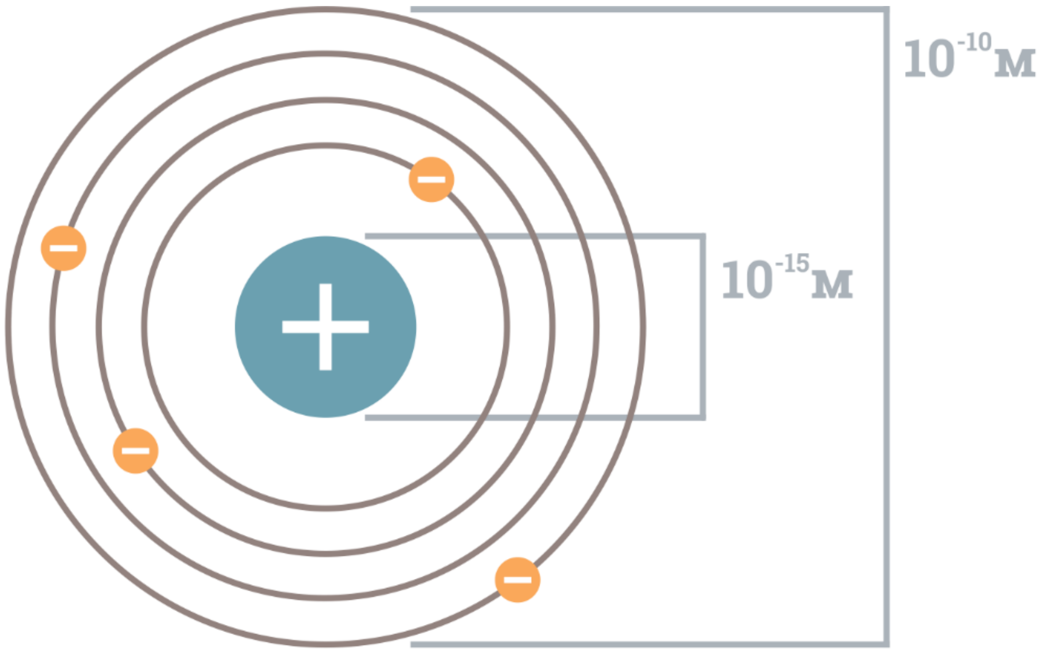


Модель атома Резерфорда

Ядерная (планетарная) модель

Вокруг положительного ядра, по замкнутым орбитам движутся электроны, образуя электронную оболочку атома

$$\frac{Ze \cdot e}{4\pi\varepsilon_0 r^2} = \frac{m_e v^2}{r}$$



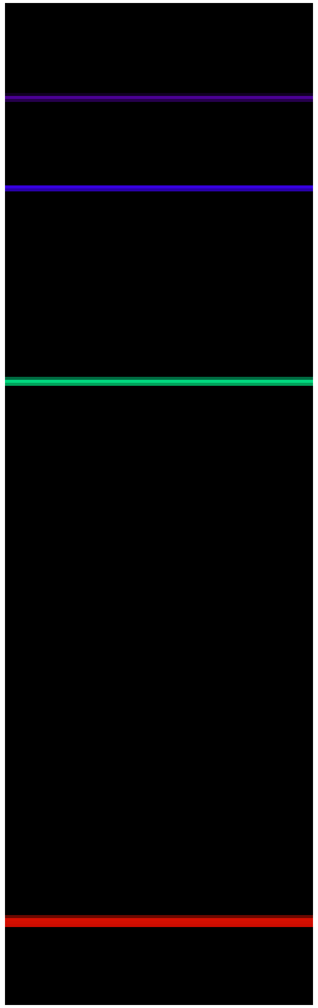
Линейчатый спектр атома водорода

Серия Бальмера. Спектральные линии атома водорода в **видимой области спектра**

$$\frac{1}{\lambda} = R'\left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2}\right), \qquad n = 3, 4, 5, \dots$$

$$\nu = R\left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2}\right), \qquad n = 3, 4, 5, \dots$$

$R = R' \cdot c = 3{,}29 \cdot 10^{15}\ c^{-1}$



Линейчатый спектр атома водорода

Серия Лаймана

Ультрафиолетовая область спектра

$$\frac{1}{\lambda} = R'\left(\frac{1}{1^2} - \frac{1}{n^2}\right), \qquad n = 2, 3, 4, \ldots$$

Линейчатый спектр атома водорода

Инфракрасная область спектра

серия **Пашена** $$\frac{1}{\lambda} = R'\left(\frac{1}{\mathbf{3}^2} - \frac{1}{n^2}\right), \qquad n = 4, 5, 6, \dots$$

серия **Брэкета** $$\frac{1}{\lambda} = R'\left(\frac{1}{\mathbf{4}^2} - \frac{1}{n^2}\right), \qquad n = 5, 6, 7, \dots$$

серия **Пфунда** $$\frac{1}{\lambda} = R'\left(\frac{1}{\mathbf{5}^2} - \frac{1}{n^2}\right), \qquad n = 6, 7, 8, \dots$$

серия **Хэмфри** $$\frac{1}{\lambda} = R'\left(\frac{1}{\mathbf{6}^2} - \frac{1}{n^2}\right), \qquad n = 7, 8, 9, \dots$$

Линейчатый спектр атома водорода

Обобщенная формула Бальмера

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

$m = 1, 2, 3, \dots$

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

Первый постулат Бора

1903 г.

В атоме существуют стационарные (не изменяющиеся со временем) состояния, в которых он не излучает энергии

дискретный (квантованный) момент импульса

$$m_e v r_n = n\hbar = \frac{nh}{2\pi}$$

Второй постулат Бора

Правило частот

При переходе электрона с одной стационарной орбиты на другую излучается (поглощается) один фотон с энергией, равной разности энергий соответствующих стационарных состояний

$$h\nu = E_n - E_m$$

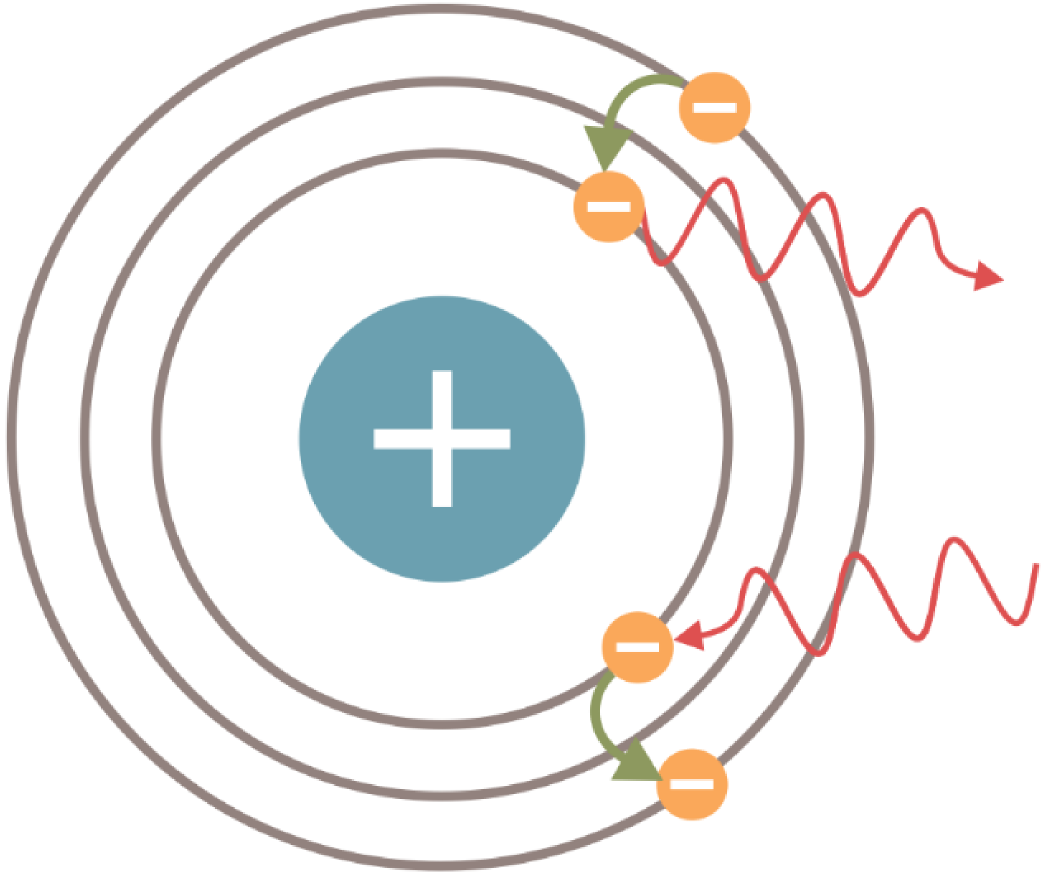
E_n, E_m – энергии стационарных состояний атома до и после излучения (поглощения)

Второй постулат Бора

Правило частот

$$h\nu = E_n - E_m$$

E_n, E_m – энергии стационарных состояний атома до и после излучения (поглощения)



Спектр атома водорода по Бору

Водородоподобные системы – системы, состоящие из ядра и одного электрона

$$\frac{m_e v^2}{r_n} = \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r_n^2}$$

$$m_e v r_n = n\hbar$$

Спектр атома водорода по Бору

Радиусы орбит

$$r_n = n^2 \frac{\hbar^2 4\pi\varepsilon_0}{m_e e^2}$$

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

Первый боровский радиус

$$a = r_1 = \frac{\hbar^2 4\pi\varepsilon_0}{m_e e^2} = 52{,}8 \text{ пм}$$

Спектр атома водорода по Бору

Полная энергия электрона в водородоподобной системе

$$E = \frac{m_e v^2}{2} - \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r_n} = -\frac{1}{2}\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r_n}$$

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

$n = 1, 2, 3, \ldots$ – главное квантовое число

Спектр атома водорода по Бору

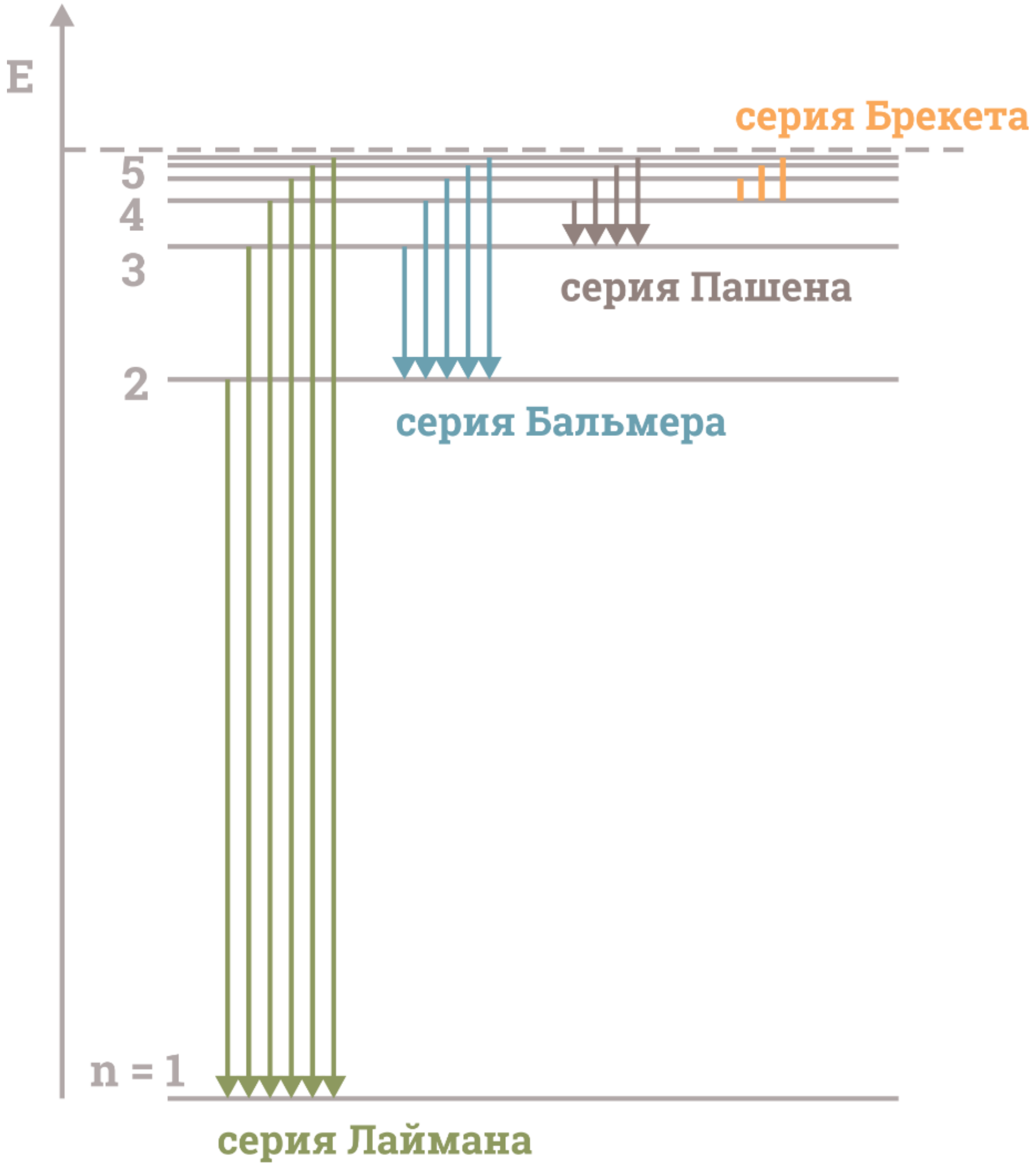
$$\varepsilon = h\nu = E_n - E_m = \frac{m_e e^2}{8h^2\varepsilon_0^2}\left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2}\right)$$

$$\nu = \frac{m_e e^2}{8h^2\varepsilon_0^2}\left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2}\right) = R\left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2}\right)$$

$$R = \frac{m_e e^2}{8h^2\varepsilon_0^2}$$

Линейчатый спектр атома водорода

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



Гипотеза де Бройля

1923 г., Луи де Бройль

Не только фотоны, но и электроны и любые другие частицы материи наряду с корпускулярными обладают также волновыми свойствами

$$\Psi = \Psi_0 e^{-i(\omega t - kx)}$$

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

Свойства волн де Бройля

Фазовая скорость

$$v_{\text{фаз}} = \frac{\omega}{k} = \frac{\hbar\omega}{\hbar k} = \frac{E}{p} = \frac{mc^2}{mv} = \frac{c^2}{v}$$

Свойства волн де Бройля

Групповая скорость волн де Бройля равна скорости частицы

$$u_{\text{груп}} = \frac{d\omega}{dk} = \frac{dE}{dp} = \frac{pc^2}{\sqrt{m_0^2c^4 + p^2c^2}} = \frac{pc^2}{E} = v$$

$$E = \sqrt{m_0^2c^4 + p^2c^2}$$

Соотношение неопределенностей

Соотношение неопределенностей Гейзенберга

Микрочастица (микрообъект) не может иметь одновременно и определенную координату x, y, z, и определенную соответствующую проекцию импульса p_x, p_y, p_z, причем неопределенности этих величин удовлетворяют условиям

$$x \cdot p_x \geq h$$

Соотношение неопределенностей

Соотношение неопределенностей Гейзенберга

$$x \cdot p_x \geq h$$

$$\Delta E \cdot \Delta t \geq h$$

ΔE – неопределенность энергии состояния системы,

Δt – промежуток времени, в течение которого оно существует

Размытие энергетических уровней

Соотношение неопределенностей

Невозможность одновременно точно определить координату и импульс не связана с несовершенством методов измерения,

а **является следствием специфики микрообъектов**, отражающей их двойственную корпускулярно-волновую природы

Соотношение неопределенностей является квантовым ограничением применимости классической механики к микрообъектам

Волновая функция

Дифракционная картина для микрочастиц является проявлением статистической (вероятностной) закономерности

Волновая функция

1926 г., М. Борн

По волновому закону меняется не сама вероятность, а величина Ψ – **волновая функция,** Ψ-функция, амплитуда вероятности

$$\Psi = \Psi(x, y, z, t)$$

Вероятность

$$W \sim |\Psi(x, y, z, t)|^2$$

Волновая функция

Вероятность

$$W \sim |\Psi(x, y, z, t)|^2$$

Квадрат модуля волновой функции определяет вероятность нахождения частицы в момент времени t в области с координатами x, y, z

Волновая функция

Вероятность нахождения в объеме dV

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

Плотность вероятности

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

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

Свойства волновой функции

Условие нормировки

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

Свойства Ψ-функции:

1. **Конечная** (вероятность не может быть больше единицы)
2. **Однозначная** (вероятность не может быть неоднозначной)
3. **Непрерывная** (вероятность не может изменяться скачком)

Свойства волновой функции

Принцип суперпозиции

Если система может находиться в различных состояниях, описываемых волновыми функциями $\Psi_1, \Psi_2, \Psi_3, \ldots$, то она также может находиться в состоянии Ψ, описываемом линейной комбинацией этих функций

$$\Psi = \sum_n C_n \Psi_n$$

Свойства волновой функции

Ψ-функция являясь основной характеристикой состояния микрообъектов, позволяет вычислять **средние значения физических величин**

$$r_{\text{сред}} = \int_{-\infty}^{+\infty} r|\Psi|^2 dV$$

Общее уравнение Шредингера

1926 г., Э. Шредингер

Основное уравнение квантовой механики

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

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

$U(x,y,z,t)$ – потенциальная функция

Общее уравнение Шредингера

$$S = Ae^{i(\omega t - kt)} \qquad \Psi = Ae^{-\frac{i}{\hbar}(Et - px)}$$

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} E\Psi \qquad \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = \left(\frac{i}{\hbar}\right)^2 p^2 \Psi$$

$$E = \frac{p^2}{2m} \qquad -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}$$

Стационарное уравнение Шредингера

$$\Psi = \psi e^{-\frac{i}{\hbar}(Et)}$$

$$\psi = \psi(x, y, z)$$

Уравнение Шредингера для стационарных состояний

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

U – потенциальная энергия

Движение свободной частицы

Частица движется вдоль оси координат ($U = 0$)

$$\Delta\psi + \frac{2m}{\hbar^2}E\psi = 0$$

$$\psi(x) = Ae^{i\cdot kt} \qquad E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

$$\Psi(x,t) = Ae^{-\left(\frac{i}{\hbar}\right)(Et-px)} \qquad W\sim|\Psi|^2 = \Psi\cdot\Psi^* = A^2$$

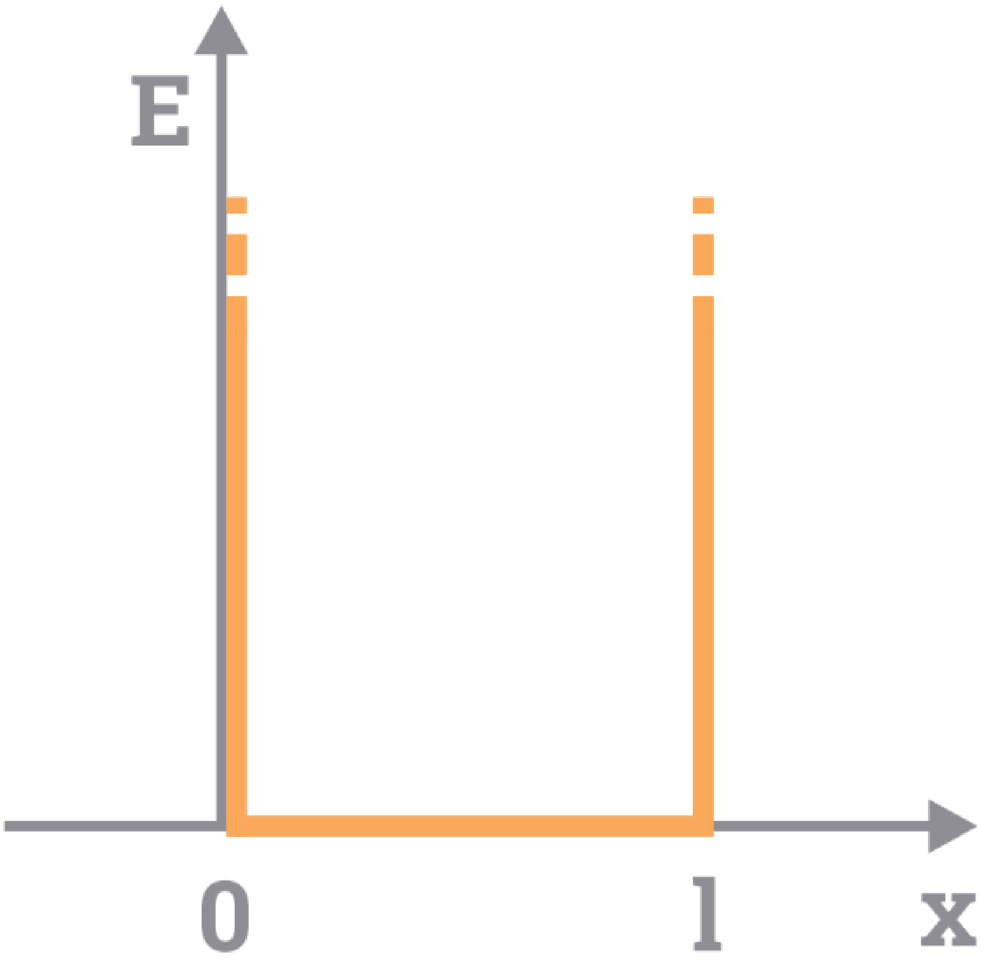
Частица в потенциальной яме

$$U(x) = \begin{cases} \infty, x < 0, \\ 0, 0 \le x \le l, \\ \infty, x > l \end{cases}$$

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

Граничные условия

$$\psi(0) = \psi(l) = 0$$



Частица в потенциальной яме

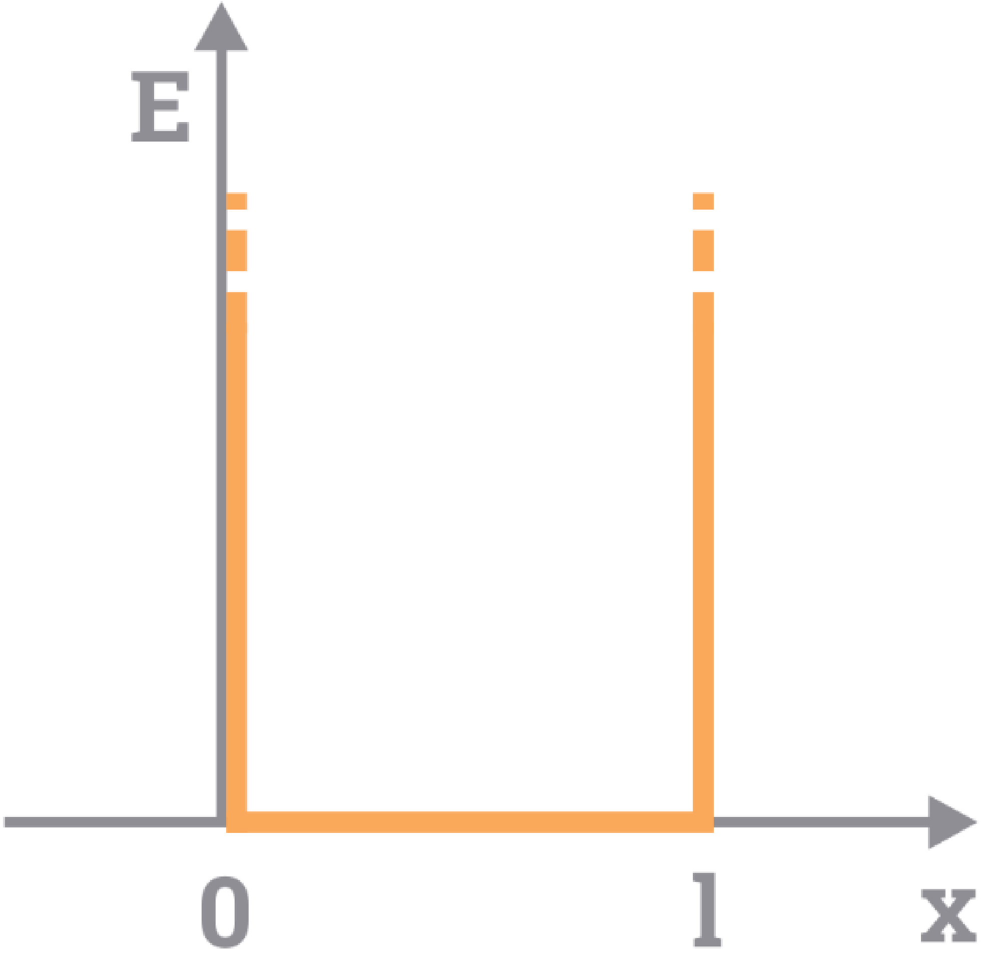
$$\Delta\psi + \frac{2m}{\hbar^2}E\psi = 0$$

$$\Delta\psi + k^2\psi = 0$$

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

$$\psi(x) = A\sin kx + B\cos kx$$

$$\psi(0) \rightarrow B = 0$$



Частица в потенциальной яме

$$\psi(x) = A\sin kx$$

$$\psi(0) = A\sin kx = 0$$

$$k = \frac{n\pi}{l}$$

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

$$n = 1, 2, 3, \ldots$$

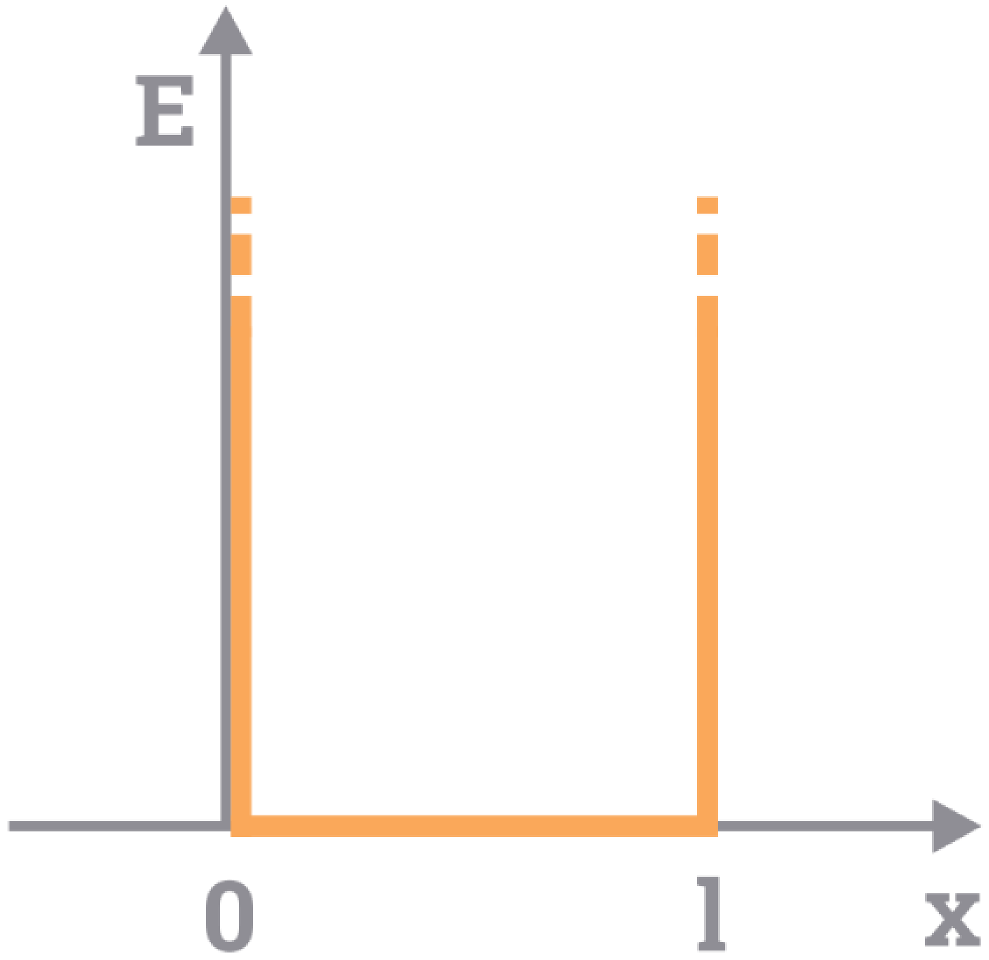
энергия частицы в «потенциальной яме» с бесконечно высокими «стенками» принимает лишь **определенные дискретные значения,** т.е. **квантуется**

Частица в потенциальной яме

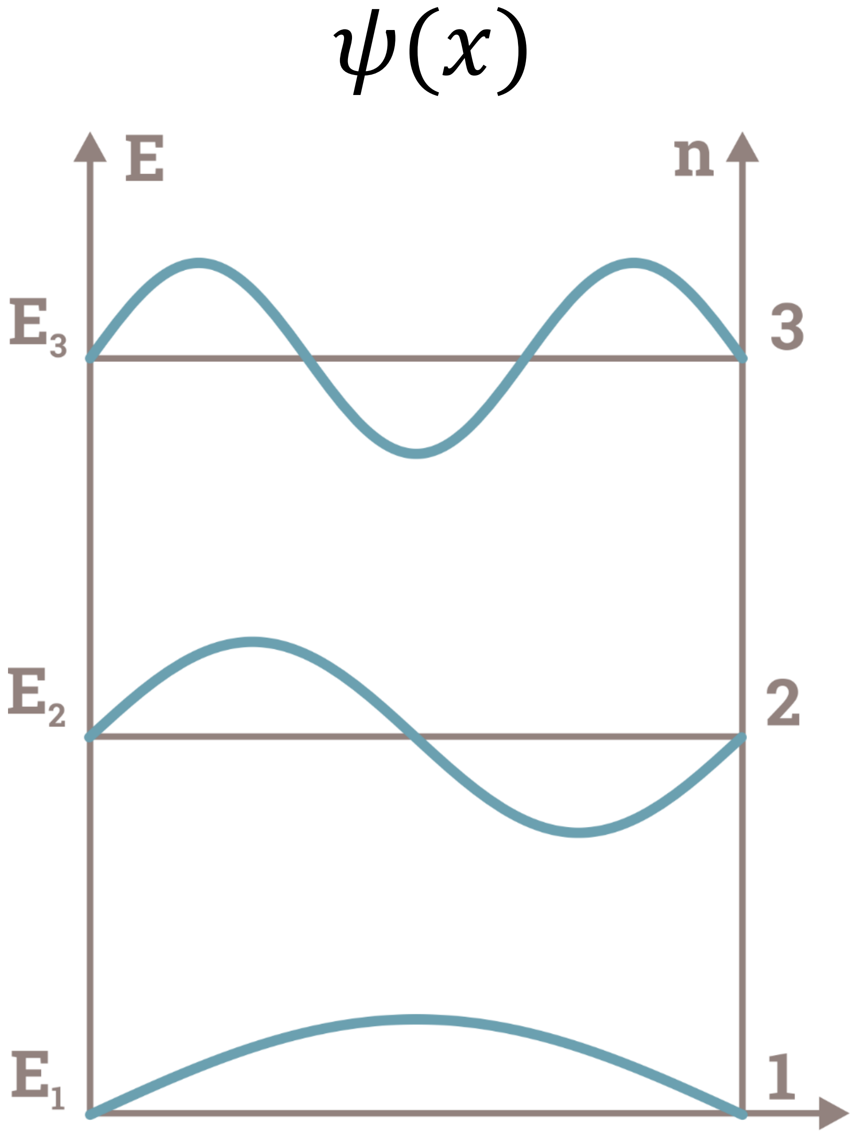
$$\psi_n(x) = A \sin \frac{n\pi}{l} x$$

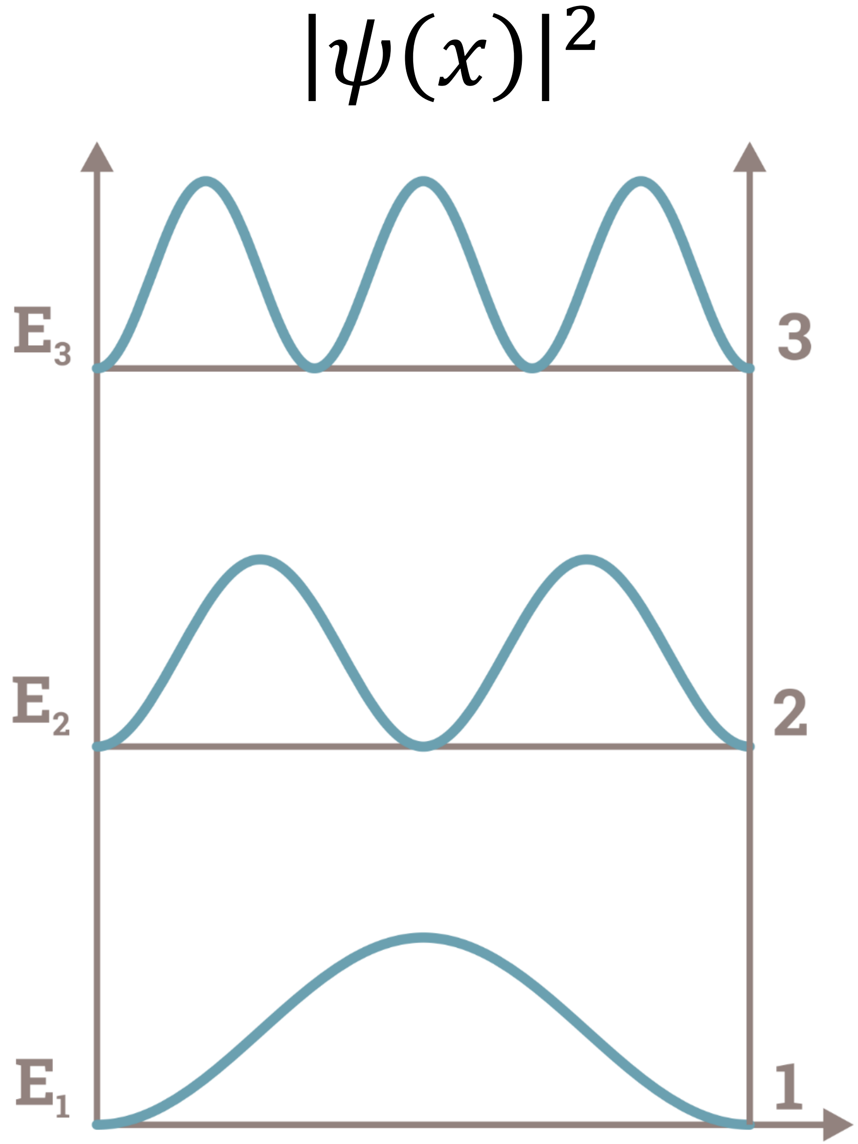
$$A^2 \int_0^l \sin^2 \frac{n\pi}{l} x \, dx = 1$$

$$\boldsymbol{\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{l}} sin \frac{n\pi}{l} x}$$



Частица в потенциальной яме





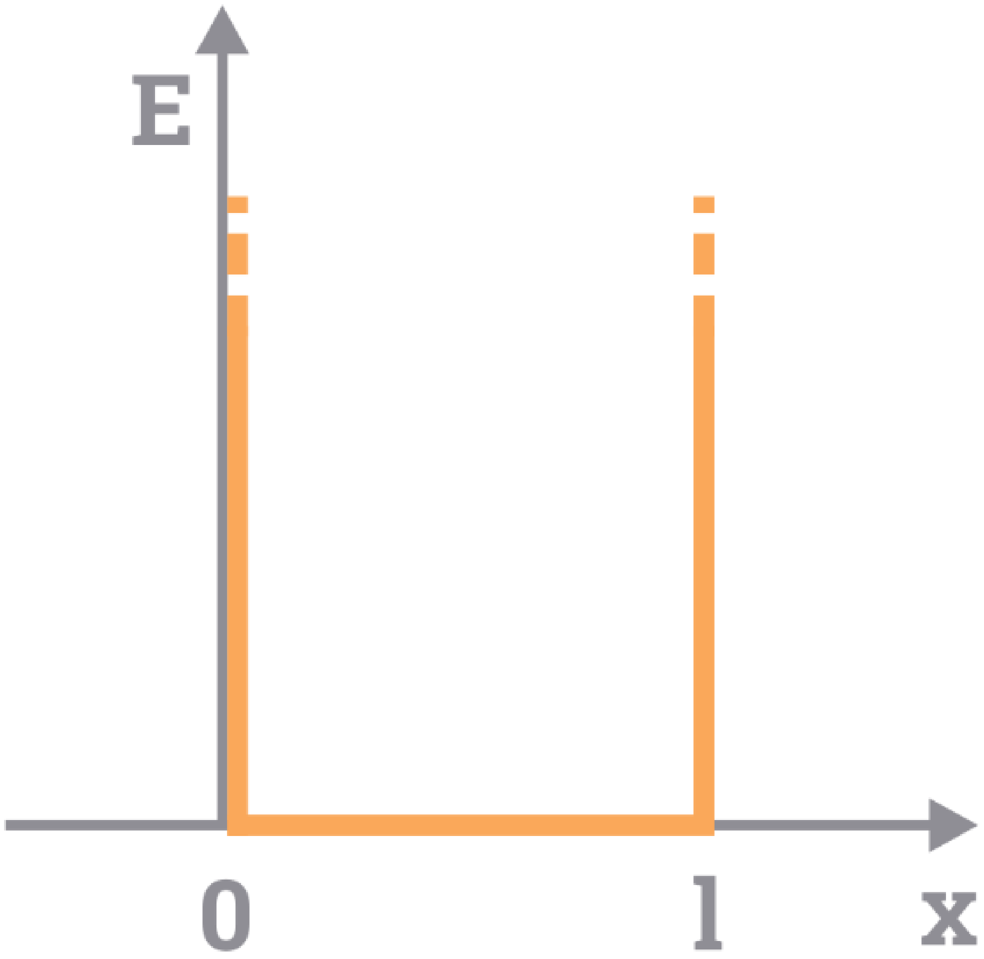
Частица в потенциальной яме

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

$$\Delta E = E_{n+1} - E_n$$

$$\Delta E = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ml^2}(2n+1)$$

$$\boldsymbol{\frac{\Delta E}{E} \sim \frac{1}{n}}$$



Принцип соответствия Бора

Законы квантовой механики должны при больших значениях квантовых чисел переходить в законы классической физики

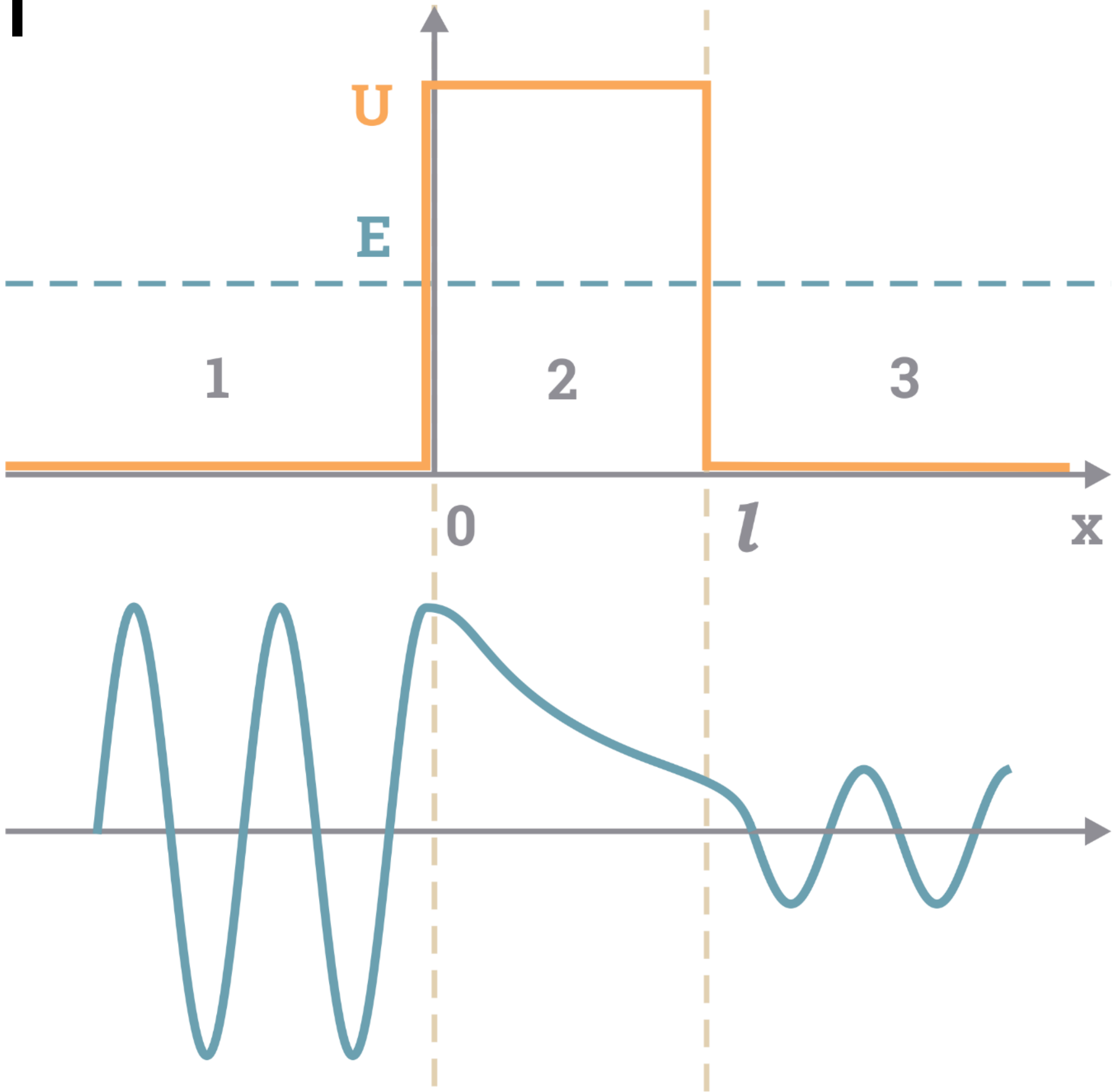
Всякая новая, более общая теория, являющаяся развитием классической, не отвергает ее полностью, а включает в себя классическую теорию, указывая границы ее применения, причем в определенных предельных случаях новая теория переходит в старую

Туннельный эффект

С классической точки зрения прохождение частицы сквозь потенциальный барьер при $E < U$ невозможно

$$E < U \rightarrow E_k < 0$$

Туннельный эффект является специфическим квантовым эффектом



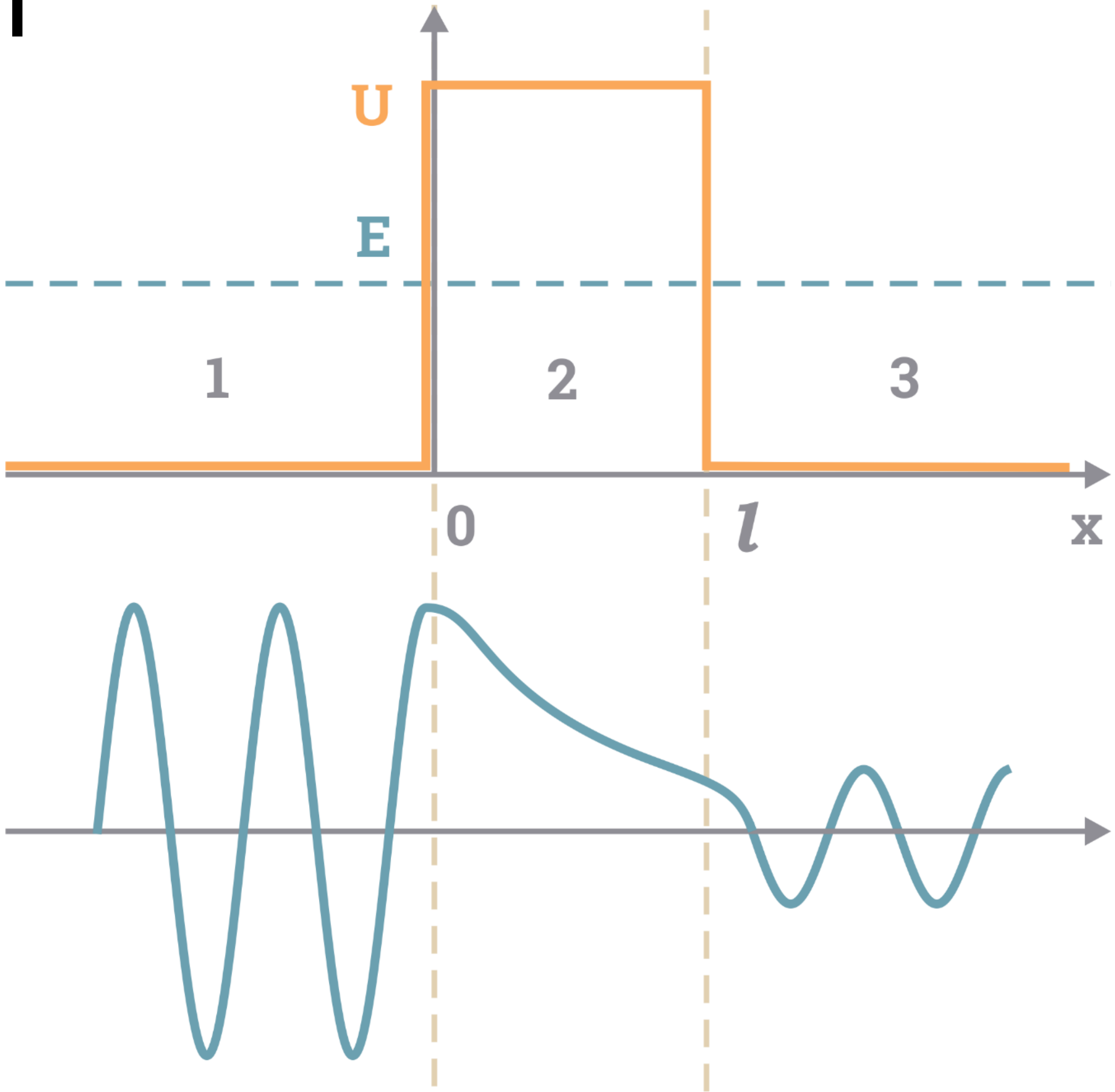
Туннельный эффект

$$U(x) = \begin{cases} 0, x < 0, \\ U, 0 \le x \le l, \\ 0, x > l \end{cases}$$

$$\psi_1(x) = A_1 e^{ikx} + B_1 e^{-ikx}$$

$$\psi_2(x) = A_2 e^{-\beta x} + B_2 e^{\beta x}$$

$$\psi_3(x) = A_3 e^{ikx}$$

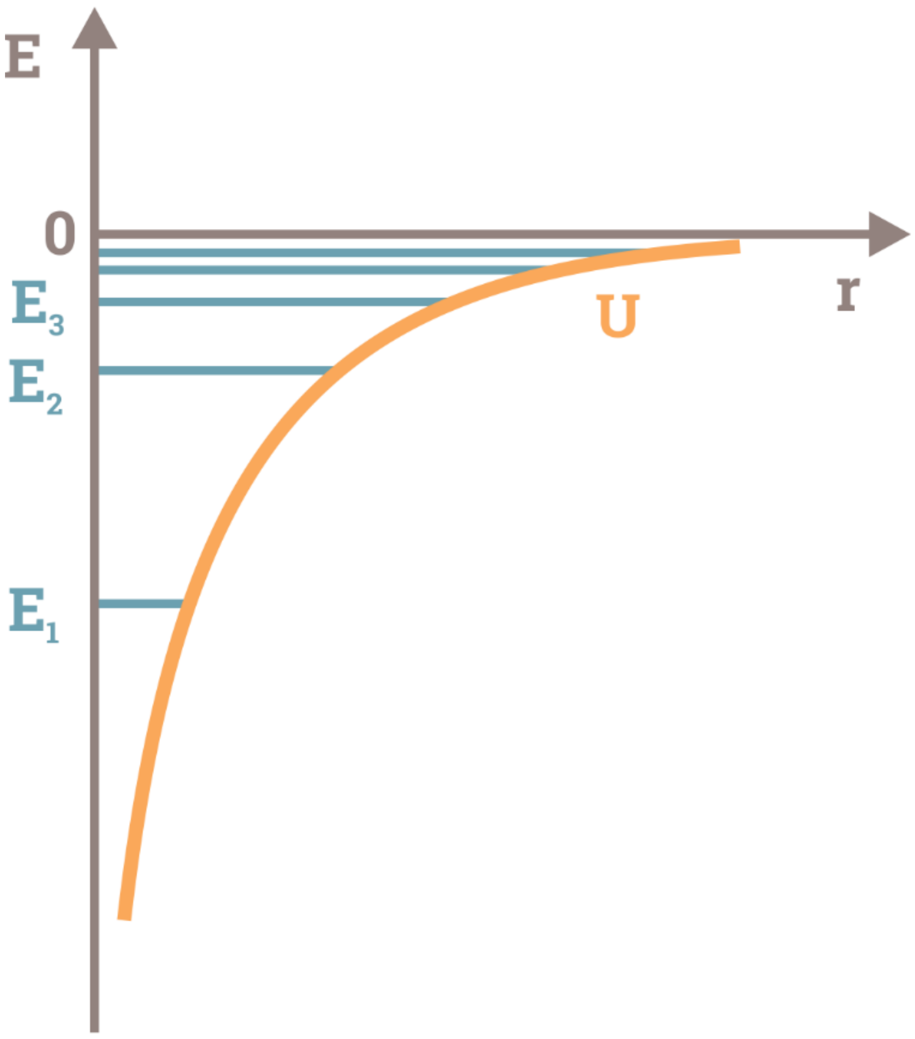


Атом водорода

$$U(r) = -\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r}$$

$$\Delta\psi + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E + \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\right)\psi = 0$$

$$\boldsymbol{E = -\frac{1}{n^2}\frac{Zme^2}{8h^2\varepsilon_0^2}}, \qquad n = 1, 2, 3, \dots$$



Квантовые числа

Главное квантовое число n, определяет энергетические уровни электрона

$$n = 1, 2, 3, \ldots$$

Момент импульса (механический орбитальный момент) электрона квантуется

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

l – **орбитальное квантовое число**

$$l = 0, 1, 2, \ldots, (n-1)$$

Квантовые числа

Проекция L_{lz} на направление z внешнего магнитного поля принимает квантованные значения

$$L_{lz} = \hbar m_l$$

m_l – **магнитное квантовое число**

$$m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$$

вектор момента импульса электрона в атоме может иметь в пространстве $(2l + 1)$ ориентации

Квантовые числа

Число различных состояний, соответствующих данному n, равно

$$\sum_{0}^{n-1}(2l+1)=n^2$$

Квантовые числа

Квантовые числа n и l характеризуют **размер** и **форму** электронного облака,

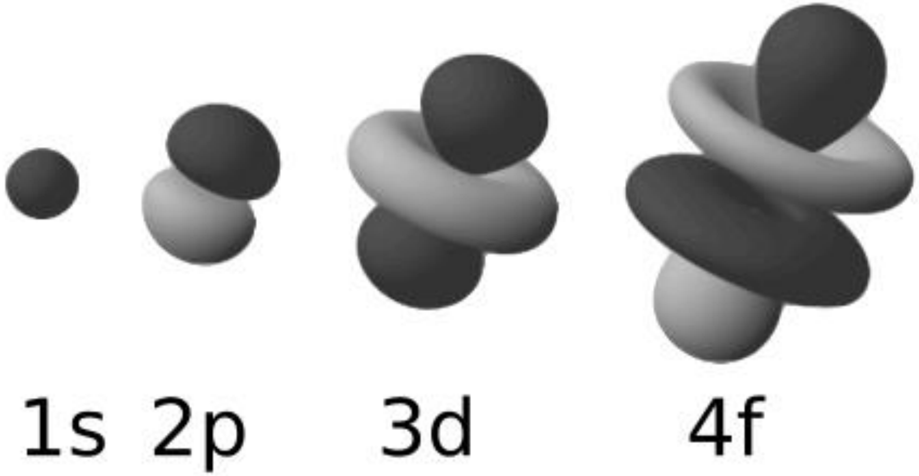
а **квантовое число m_l** характеризует **ориентацию** электронного облака в пространстве

$l = 0$ s-состояние

$l = 1$ p-состояние

$l = 2$ d-состояние

$l = 3$ f-состояние



Правила отбора

1. Изменение орбитального квантового числа

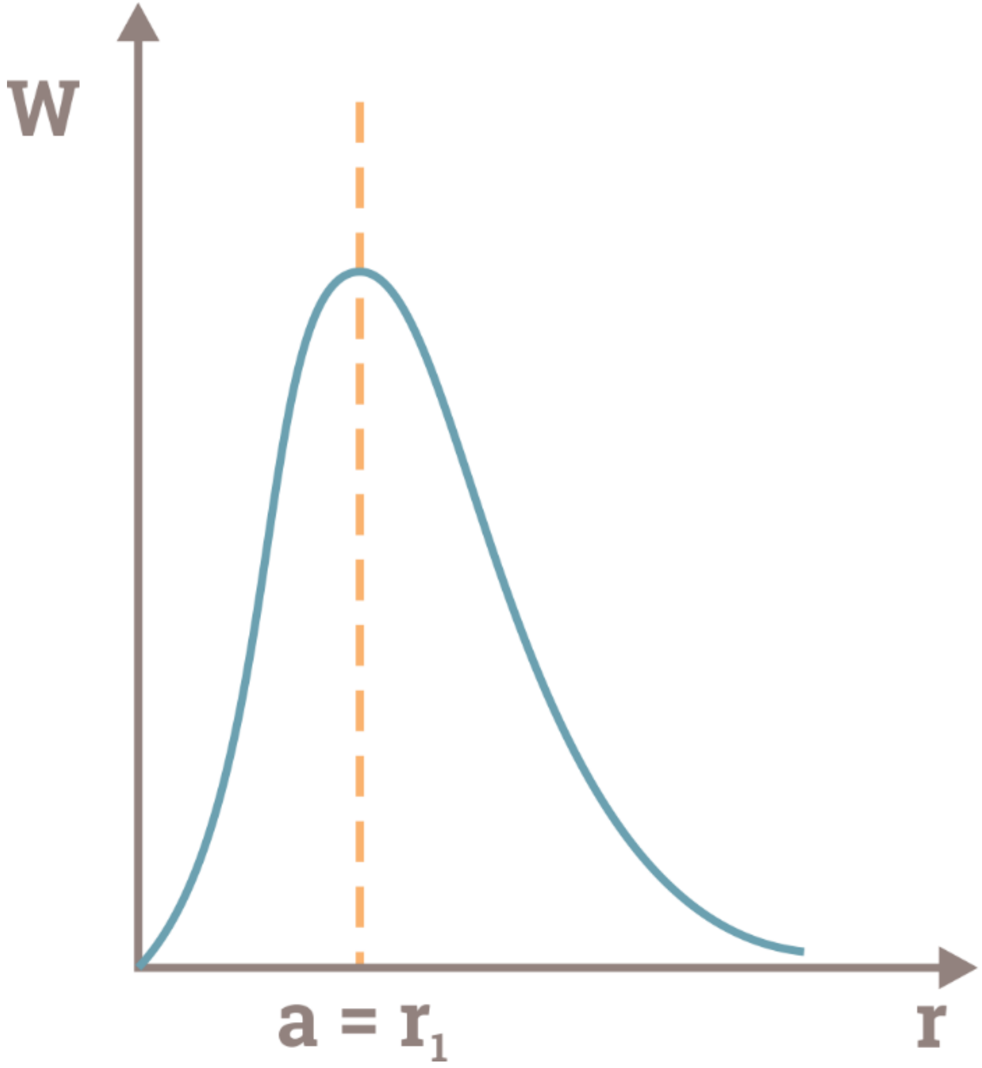
$$\Delta l = \pm 1$$

2. Изменение магнитного квантового числа

$$\Delta m_l = \pm 1$$

1s-состояние электрона

$$\psi_{100}(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-\frac{r}{a}}$$



Спин

Спин – собственный механический момент

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

s – спиновое квантовое число, для электрона $s = \frac{1}{2}$

$$L_{sz} = \hbar m_s$$

m_s - собственное (спиновое) магнитное квантовое число

Тонкая структура

– расщепление энергетических уровней и спектральных уровней по значениям спина

Принцип неразличимости тождественных частиц

Тождественные частицы – частицы, имеющие одинаковые физические свойства — массу, электрический заряд, спин и другие внутренние характеристики (например, квантовые числа

Принцип неразличимости тождественных частиц

Невозможно экспериментально различить тождественные частицы

$$|\psi(x_1, x_2)|^2 = |\psi(x_2, x_1)|^2$$

Принцип неразличимости тождественных частиц

$$|\psi(x_1, x_2)|^2 = |\psi(x_2, x_1)|^2$$

$$\psi(x_1, x_2) = \pm\psi(x_2, x_1)$$

Если при перемене частиц местами волновая функция не меняет знака, то она называется **симметричной**,

если меняет – **антисимметричной**

Фермионы и бозоны

Фермионы – частицы с полуцелым спином (например, электроны, протоны, нейтроны) описываются **антисимметричными** волновыми функциями

Бозоны – частицы с нулевым или целочисленным спином (например, π-мезоны, фотоны) описываются **симметричными** волновыми функциями