Лекции по физике. Оптика

Основы квантовой физики.

Квантовая физика атомов и молекул

Соотношение неопределённостей

- Установление волновых свойств частиц привело к необходимости пересмотра применимости к ним принципов классической механики, т.к. в классической механике волновые и корпускулярные свойства являются несовместимыми
- Один из основных результатов такого пересмотра заключается в том, что нельзя говорить о движении частицы по определённой траектории и о том, что частица имеет определённые координаты и импульс

Соотношение неопределённостей

- Можно говорить лишь о том, что координаты и импульс частицы с некоторой вероятностью попадают в определённый интервал значений. Причём оказывается, что чем точнее мы можем определить значение координат, тем больше неопределённость импульса и наоборот

Соотношение неопределённостей

- Указанные соображения были сформулированы В. Гейзенбергом в виде **соотношений неопределённости** между координатами и проекциями импульса:

$$\Delta x \Delta p_x \geq h, \quad \Delta y \Delta p_y \geq h, \quad \Delta z \Delta p_z \geq h, \qquad (1)$$

- Существует аналогичное **соотношение неопределённости для энергии и времени**:

$$\Delta E \Delta t \geq h, \qquad (2)$$

Взаимосвязь классической и квантовой физики

- Классическая физика является предельным случаем квантовой. Она справедлива в пределе больших масс и энергий. Это становится ясным если записать (1) в виде:

$$\Delta x \Delta v_x \geq h/m$$

- Для пылинки массой 10^{-12} кг, при неопределённости Δx=10 нм, неопределённость её скорости составляет порядка 10^{-14} м/с. Эта неопределённость тем меньше сказывается на движении частицы, чем больше её скорость

Основы квантовой физики

- В квантовой физике возникает задача определения вероятности обнаружения заданных значений координат и импульсов. Таким образом возникает необходимость статистической трактовки характеристик механической системы и её движения
- Это делается на основе представлений о волновой функции

Основы квантовой физики

- Физический смысл имеет квадрат модуля амплитуды волны де Бройля
- Квадрат модуля амплитуды волны де Бройля в данной точке является мерой вероятности того, что частица будет обнаружена в этой точке
- **Волновая функция** $\Psi(x,y,z,t)$ определяет зависимость амплитуды волны де Бройля от координат и времени

Основы квантовой физики

- Вероятность $d\omega$ того, что частица находится в объёме dV определяется выражением:

$$d\omega = |\Psi|^2 \, dV \qquad (3)$$

- Волновая функция является комплексной. Квадрат её модуля определяется произведением самой функции на комплексно сопряжённую величину:

$$|\Psi|^2 = \Psi\Psi^* \qquad (4)$$

Основы квантовой физики

- Квадрат модуля волновой функции имеет смысл плотности вероятности пребывания частицы в данной точке пространства
- **Условие нормировки** волновой функции заключается в том, что полная вероятность обнаружения частицы во всём пространстве должна быть равна единице

$$\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}|\Psi|^2\, dxdydz = 1 \tag{5}$$

Основы квантовой физики

- Волновая функция является основной характеристикой состояния системы в квантовой механике. С её помощью можно вычислять средние значения физических величин
- Сами физические величины в квантовой механике представляются математическими операторами

Основы квантовой физики

- Чтобы посчитать среднее значение величины X в состоянии системы которое описывается волновой функцией Ψ надо взять интеграл по всей области изменения аргументов Ψ из произведения Ψ на функцию, получающуюся при действии оператора величины X на функцию Ψ*:

$$\overline{X} = \int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} \Psi \hat{X} \Psi^* \, dxdydz$$

Основы квантовой физики

- Усреднять можно и по ограниченному объёму. Тогда в (6) надо подставлять соответствующие пределы интегрирования
- Если волновая функция зависит от координат частицы, то говорят, что она записана в **координатном представлении**
- В этом случае операторами координат будут соответствующие им переменные x,y и z

Основы квантовой физики

- Среднее значение координаты x, например, будет находиться по формуле:

$$\overline{x} = \int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} \Psi x \Psi^* \, dxdydz$$

- Проекции импульса на ось x будет соответствовать оператор:

$$p_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$$

где i – мнимая единица, ħ=h/2π

Основы квантовой физики

- Если волновая функция зависит от импульсов частицы, то говорят, что она записана в **импульсном представлении**
- В этом случае операторами проекций импульсов будут соответствующие им переменные p_x,p_y и p_z, а координаты будут представляться дифференциальными операторами

Уравнение Шредингера

- Подобно уравнению движения в классической механике в квантовой механике существует уравнение относительно волновых функций, решая которое можно найти сами волновые функции. Оно называется **уравнением Шредингера** и имеет вид:

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

Уравнение Шредингера

- Уравнение (7) справедливо для нерелятивистской частицы массой m, находящейся в потенциальном поле U
- Δ - это **оператор Лапласа**

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

- Решением уравнения (7) является волновая функция в координатном представлении

Уравнение Шредингера

- Первое слагаемое в правой части (7) можно представить как результат последовательного действия на Ψ двух операторов импульса и деления на удвоенную массу частицы
- Это слагаемое можно интерпретировать как действие **оператора кинетической энергии частицы**

$$\frac{\hat{p}^2}{2m}$$

Уравнение Шредингера

- Состояние системы многих частиц будет описываться волновой функцией, зависящей от координат всех частиц
- Уравнение Шредингера для системы многих частиц будет содержать сумму операторов кинетической энергии каждой частицы, и оператор потенциальной энергии описывающий взаимодействие частиц

Уравнение Шредингера

- Мы видим, что в правой части (7) стоит сумма операторов кинетической и потенциальной энергий. Поэтому уравнение Шредингера можно рассматривать как операторную запись закона сохранения энергии
- В тех случаях, когда энергия системы сохраняется с течением времени, говорят, что её состояние стационарно. Тогда волновую функцию можно упростить выделив множитель, явно зависящий от времени:

$$\Psi(x,y,z,t) = \psi(x,y,z)\exp(-iEt/\hbar) \qquad (8)$$

Уравнение Шредингера

- Уравнение Шредингера в стационарном случае так же будет иметь более простой вид:

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

где E – полная энергия системы

- Уравнение Шредингера нельзя вывести из других соотношений, оно постулируется. Его правильность подтверждается согласием предсказаний теории с данными экспериментов
- В настоящее время не известно отступлений от законов квантовой механики

Теория атома водорода

- Предложенная в начале 20 века теория строения атома находилась в противоречии с классической физикой, согласно которой электроны, движущиеся ускоренно вокруг атомных ядер, должны терять энергию на излучение
- Разрешил это противоречие Н. Бор, который ввёл постулаты, ограничивающие движение электронов в атомах

Постулаты Бора

- Согласно **первому постулату Бора** у атома должны существовать стационарные состояния, находясь в которых он не излучает энергию
- **Второй постулат Бора** утверждает, что в стационарном состоянии атома электрон, двигаясь по круговой орбите (радиуса r) должен иметь квантованные значения момента импульса L_n,удовлетворяющие условию:

$$L_n \equiv mvr = n\hbar,\ n=1,2,3,\ldots \qquad (9)$$

Постулаты Бора

- **Третий постулат Бора** устанавливает, что при переходе атома из одного стационарного состояния в другое испускается или поглощается квант энергии. Энергия этого кванта равна разности энергий начального и конечного состояний атома:

$$\Delta W = h\nu$$

Теория атома водорода

- На основе постулатов Бора оказалось возможным объяснить наблюдавшиеся закономерности спектров атома водорода, согласно которым атом водорода поглощает и излучает фотоны с частотой:

$$\nu = R\left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2}\right) \quad (10)$$

где n и m – целые числа, R – **постоянная Ридберга**

Строение атома

- Результаты, полученные Бором, можно так же получить решая уравнение Шредингера для атома водорода. Это одна из немногих задач квантовой физики, позволяющая найти точное решение
- Для более сложных систем невозможно найти точное аналитическое решение поэтому используют различные приближённые методы

Строение атома

- Одним из способов расчёта атомных волновых функций является нахождение одноэлектронных волновых функций в потенциальном поле, создаваемом ядром и остальными электронами
- Значение теории Бора состоит в том, что она позволяет установить основные закономерности электронного строения атома

Строение атома

- Уравнению Шредингера с центральносимметричным потенциалом U (как в атоме) удовлетворяют волновые функции $\psi_{n\ell m}$ характеризуемые тремя **квантовыми числами** n, ℓ, и m_ℓ
- **Главное квантовое число** n определяет энергетические уровни электронов в атоме. Оно может принимать значения: 1,2,3,…

Строение атома

- **Орбитальное квантовое число** ℓ определяет возможные значения момента импульса частицы. Оно может принимать значения: 0,1,2,…,(n-1)
- **Магнитное квантовое число** m_ℓ определяет значение проекции момента импульса на заданное направление. Оно может принимать значения: $0, \pm 1, \pm 2, \ldots, \pm \ell$

Строение атома

- В атоме водорода из-за особенностей потенциала энергии состояний с различными значениями ℓ и m_ℓ при одинаковых n оказываются равными. Это свойство называют **орбитальным вырождением** электронных состояний. Т.о. энергия атома водорода определяется только главным квантовым числом
- В многоэлектронных атомах энергия состояния зависит так же и от ℓ
- В отсутствие внешних полей энергия электронных состояний атома не зависит от m_ℓ

Строение атома

- При наложении внешнего электрического поля происходит расщепление электронных уровней с разными значениями магнитного квантового числа. Это явление называется **эффектом Штарка**
- Аналогичное явление наблюдается в магнитном поле. Оно называется **эффектом Зеемана**

Строение атома

- В 1922 г. О. Штерном и В. Герлахом было обнаружено, что электрон обладает собственными состояниями, характеризуемыми **спиновым квантовым числом**, которое может принимать значения ±½
- Таким образом одноэлектронные атомные состояния характеризуются четырьмя квантовыми числами

Строение атома

- Согласно **принципу Паули** несколько электронов не могут занимать одно состояние. Вследствие этого в атомах с увеличением числа электронов происходит заполнение электронных состояний начиная с состояния, имеющего наименьшую энергию

Конец лекции