

---

# 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:

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

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

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

# 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  $\Delta x = 10$  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:

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

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

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



# 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

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} |\Psi|^2 dx dy dz = 1$$

# 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  $\Psi$  надо взять интеграл по всей области изменения аргументов  $\Psi$  из произведения  $\Psi$  на функцию, получающуюся при действии оператора величины  $X$  на функцию  $\Psi^*$ :

$$\bar{X} = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(\hat{X}) \Psi^* dx dy dz$$

# 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:

$$\bar{x} = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi x \Psi^* dx dy dz$$

- Проекция импульса на ось  $x$  будет соответствовать оператор:

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

где  $i$  – мнимая единица,  $\hbar = h/2\pi$

# 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  $U$
- $\Delta$  - это **оператор Лапласа**

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

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



# Уравнение Шредингера

- Первое слагаемое в правой части (7) можно представить как результат последовательного действия на  $\Psi$  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:

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

# 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:

$$L_n \equiv mvr = n\hbar, \quad n=1,2,3,\dots \quad (9)$$

# 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:

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

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**  $n$ ,  $\ell$ , и  $m_\ell$
- **Главное квантовое число**  $n$  определяет энергетические уровни электронов в атоме. Оно может принимать значения:  $1, 2, 3, \dots$

# Строение атома

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

# 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, характеризующимися **спиновым квантовым числом**, которое может принимать значения  $\pm 1/2$
- 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

---