Сегодня: *

Краткий курс лекций по физике

Кузнецов Сергей Иванович
доцент к. ОФ ЕНМФ ТПУ

x

Тема 2. ВОДОРОДОПОДОБНЫЕ СИСТЕМЫ В КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ

Дополнение механической планетарной модели Резерфорда квантовыми постулатами Бора-Зоммерфельда -

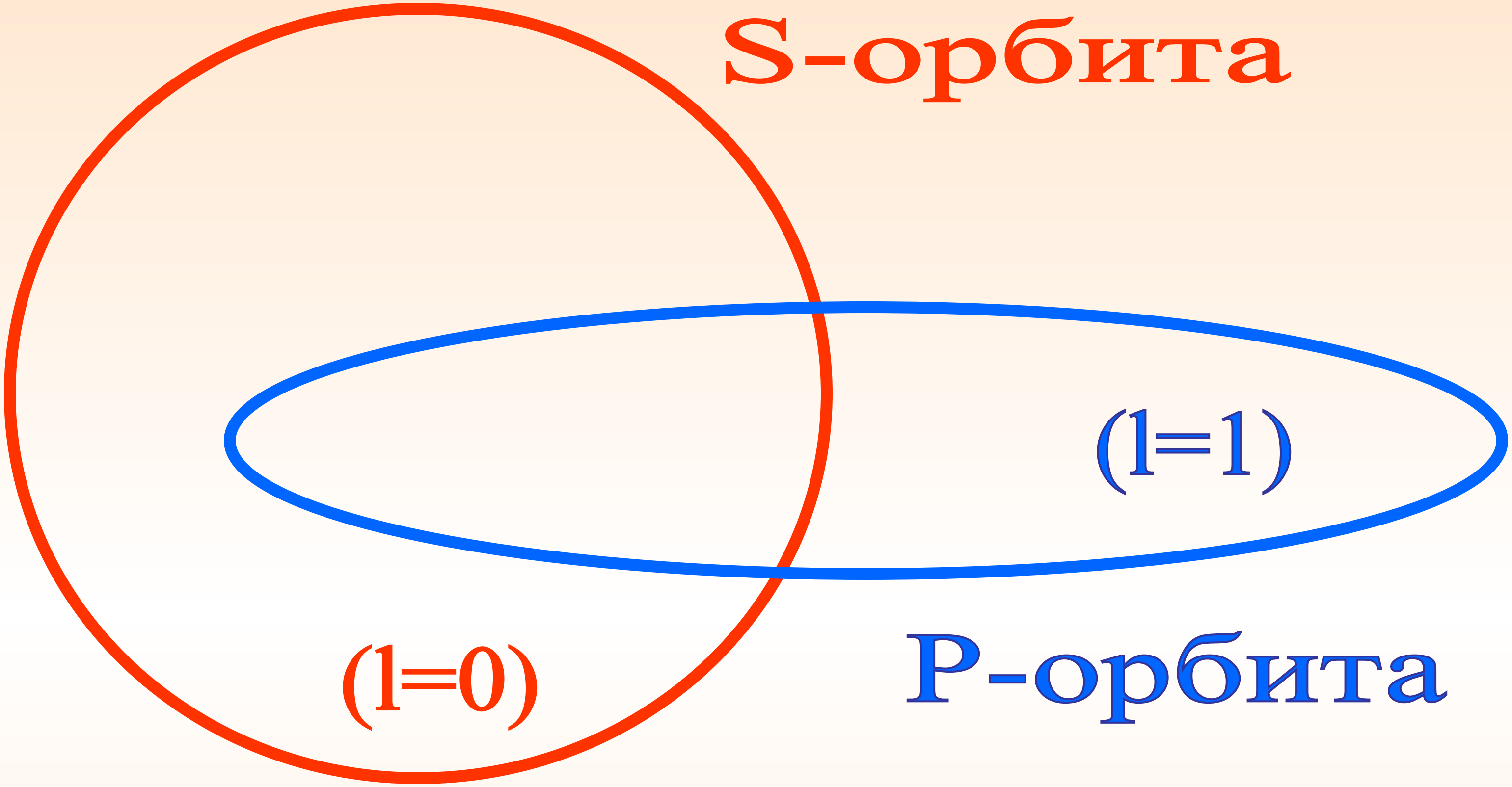
приводит к согласию с экспериментальными данными Ангстрема, Бальмера, Зеемана и других исследователей.

И все же ….

Теория Бора-Зоммерфельда использовала два принципиально различных подхода:

понятие непрерывной траектории механики Ньютона,

- представление о дискретных квантовых состояниях.

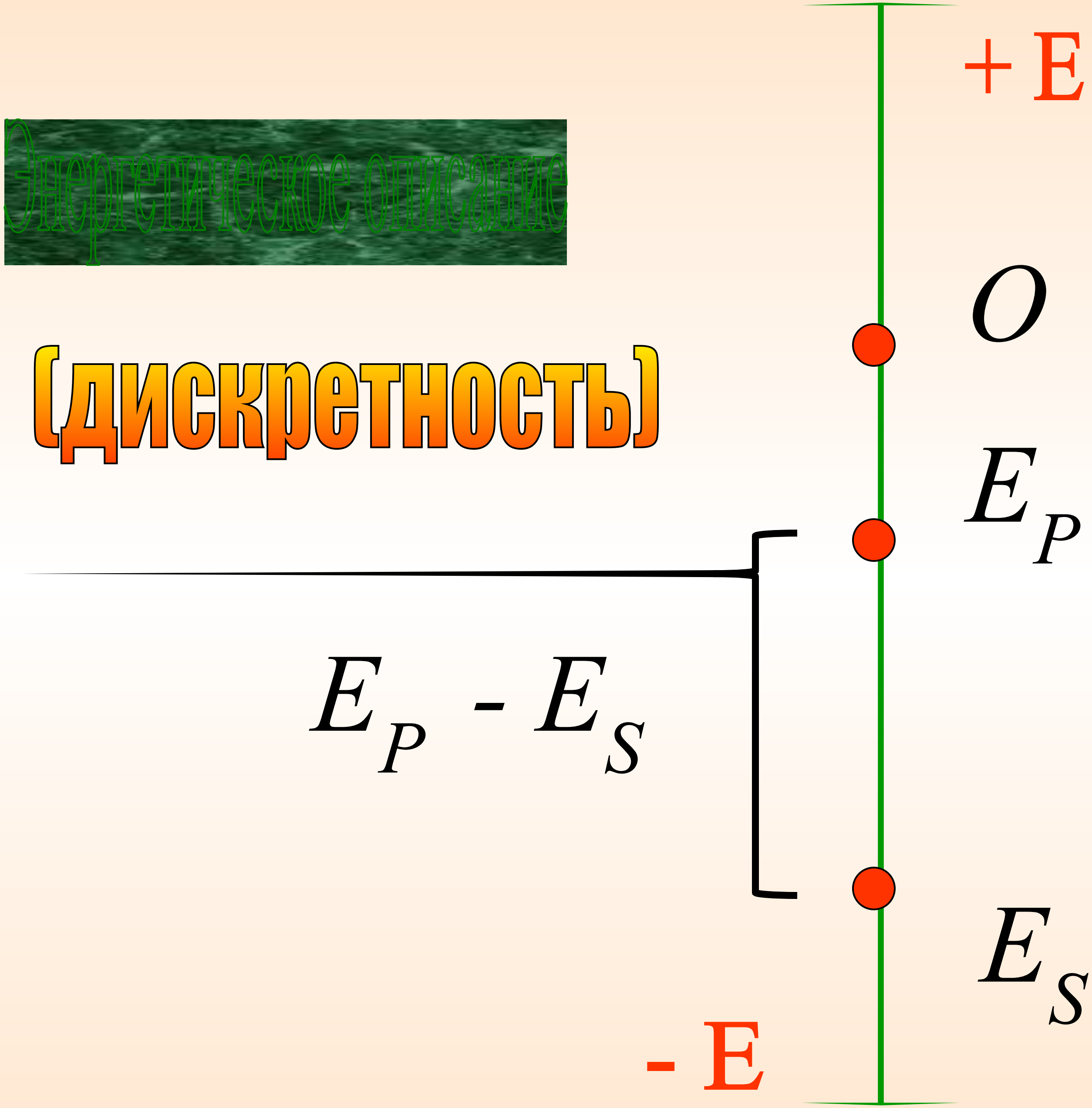


Геометрическое (пространственное) описание

(непрерывность)

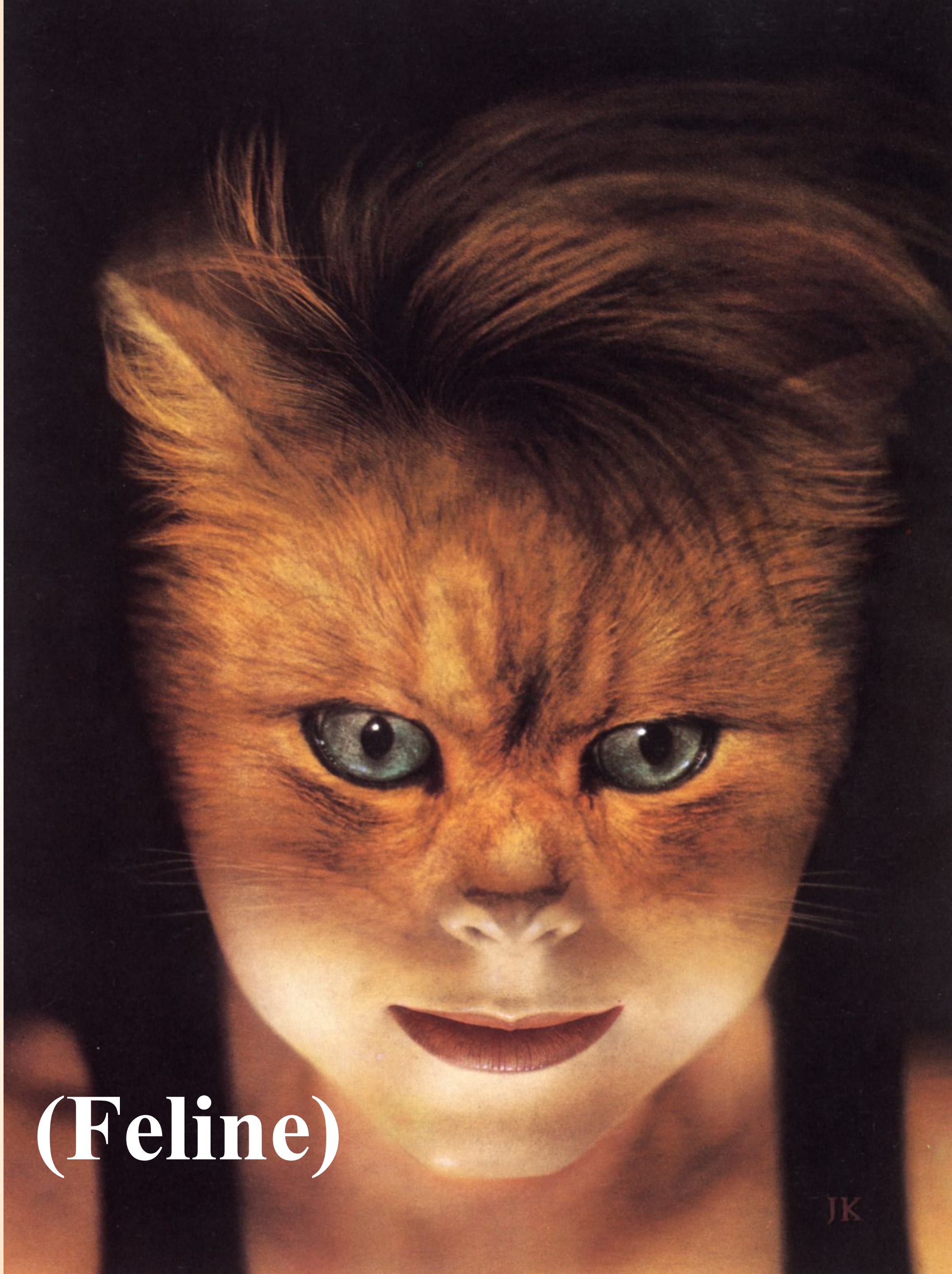
Энергетическое описание

(дискретность)



Аналогия теории Бора - Зоммерфельда

как слияния двух описаний микромира



Дальнейшее развитие квантовой механики привело к отказу от механической картины движения электрона в поле ядра.

Планетарная модель была заменена квантово-волновым описанием строения атома.

x

2.1. Квантовомеханическая картина строения атома

На прошлой лекции мы обсуждали ограниченность боровской теории строения атома. Рассмотрим теперь **квантовомеханическую теорию атомов, гораздо более полную, чем старая теория Бора**. Она сохраняет некоторые аспекты старой теории.

Например, электроны могут находиться в атоме только в дискретных состояниях с определенной энергией; при переходе электрона из одного состояния в другое испускается (или поглощается) фотон. Но квантовая механика – не просто обобщение теории Бора.

Она представляет собой гораздо более глубокую теорию и рисует совершенно иную картину строения атома.

x

Согласно квантовой механике, ***не существует определенных круговых орбит электронов***, *как в теории Бора.*

В силу волновой природы ***электрон «размазан» в пространстве, подобно «облаку» отрицательного заряда***.

Для основного состояния атома можно вычислить:

$$\Psi(r) = \sqrt{\frac{1}{\pi r_1^3}} e^{-\frac{r}{r_1}}, \qquad (1)$$

где $\Psi(r)$ – ***волновая функция*** *положения*, зависящая от расстояния r до центра;

$\boldsymbol{r_1}$ - радиус первой боровской орбиты.

x

Электронное облако в основном состоянии водорода сферически-симметрично как показано на рисунке

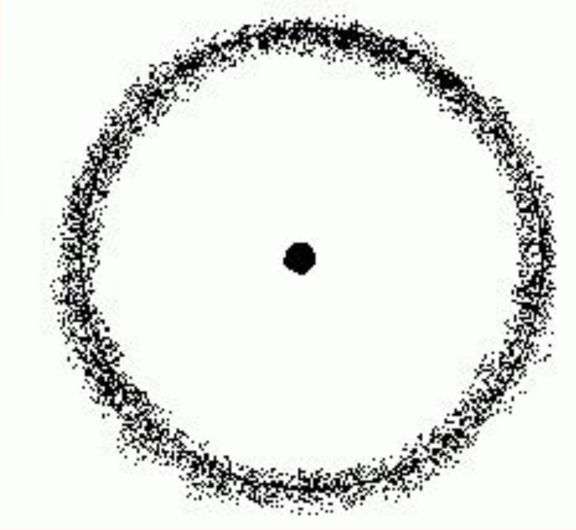


Рисунок 1

Электронное облако грубо характеризует «размеры» атома, но, поскольку облако может не иметь четко выраженные границы, ***атомы также не имеют ни точной границы, ни одного определенного размера.***

x

Как мы увидим в дальнейшем, не все электронные облака сферически-симметричны. Обратите внимание на то, что хотя функция $\Psi(r)$ при больших радиусах r, как следует из приведенного выше выражения сильно убывает, она не обращается в нуль на конечных расстояниях.

Квантовая механика утверждает, что основная часть атома не представляет собой пустое пространство.

Т.к. $\Psi \to 0$ только при $r \to \infty$, мы заключаем, что и во вселенной не существует в подлинном смысле пустого пространства.

x

Электронное облако можно интерпретировать как с корпускулярной, так и с волновой точки зрения.

Напомним, что под частицей мы понимаем нечто локализованное в пространстве: в любой момент времени частица занимает вполне определенное положение в пространстве. Следовательно, ***размытое в пространстве облако является результатом волновой природы электронов.***

Электронное облако можно также интерпретировать как ***распределение вероятностей для данной частицы.***

x

Если измерить положение электрона 1000 раз, то большинство результатов измерений соответствовало бы точкам, в которых вероятность велика, хотя электрон случайно может оказаться и там, где вероятность мала.

Мы не можем предсказать траектории, по которой будет двигаться электрон.

После измерения положения электрона точно предсказать, ***где будет находиться электрон в последующие моменты времени, невозможно.***

x

Мы можем лишь вычислить вероятность обнаружить электрон в различных точках. Ясно, что подобная ситуация в корне отличается от классической Ньютоновской физики. Как отмечал впоследствии Н.Бор, ***при испускании атомом светового фотона, бессмысленно даже спрашивать, как электрон переходит из одного состояния в другое.***

Решение задачи об энергетических уровнях электрона для водорода (а также водородных систем: атома гелия He^{+}, лития Li^{2+} и др.) ***сводится к задаче о движении электрона в кулоновском поле ядра.***

x

Потенциальная энергия взаимодействия электрона с ядром, обладающим зарядом Ze (для атома водорода $Z = 1$)

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

где r – расстояние между электроном и ядром.

x

График ***функции U(r).***

С уменьшением *r* (при приближении электрона к ядру)функция $U(r)$ неограниченно убывает.

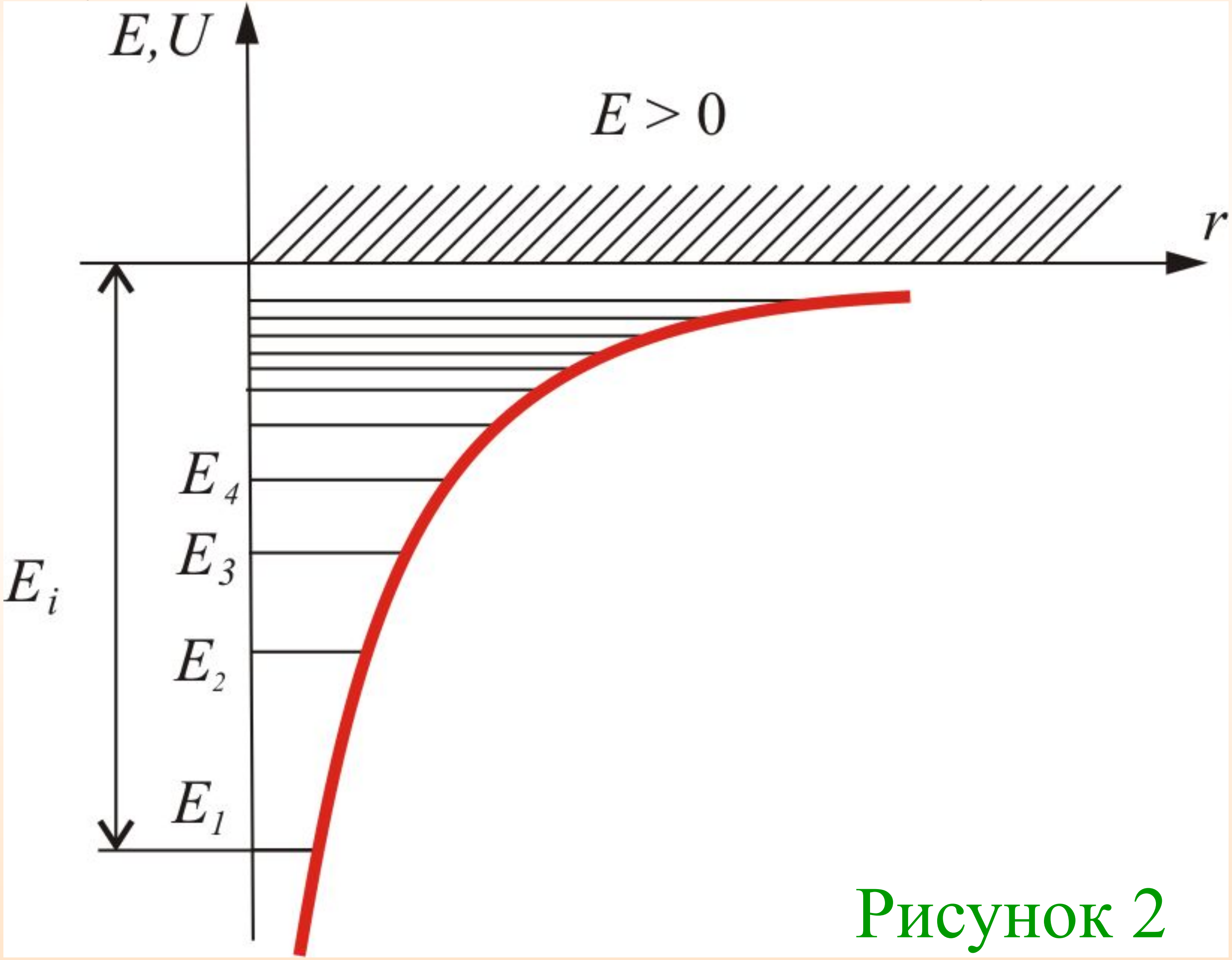


Рисунок 2

x

Шредингер Эрвин (1887 – 1961) – австрийский физик-теоретик, один из создателей квантовой механики. Основные работы в области статистической физики, квантовой теории, квантовой механики, общей теории относительности, биофизики. Разработал теорию движения микрочастиц – волновую механику, построил квантовую теорию возмущений – приближенный метод в квантовой механике. За создание волновой механики удостоен Нобелевской премии.

x

Состояние электрона в атоме водорода описывается волновой функцией Ψ, удовлетворяющей стационарному ***уравнению Шредингера***:

$$\boxed{\nabla\Psi + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E + \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\right)\Psi = 0} \qquad (3)$$

E – полная энергия электрона в атоме.

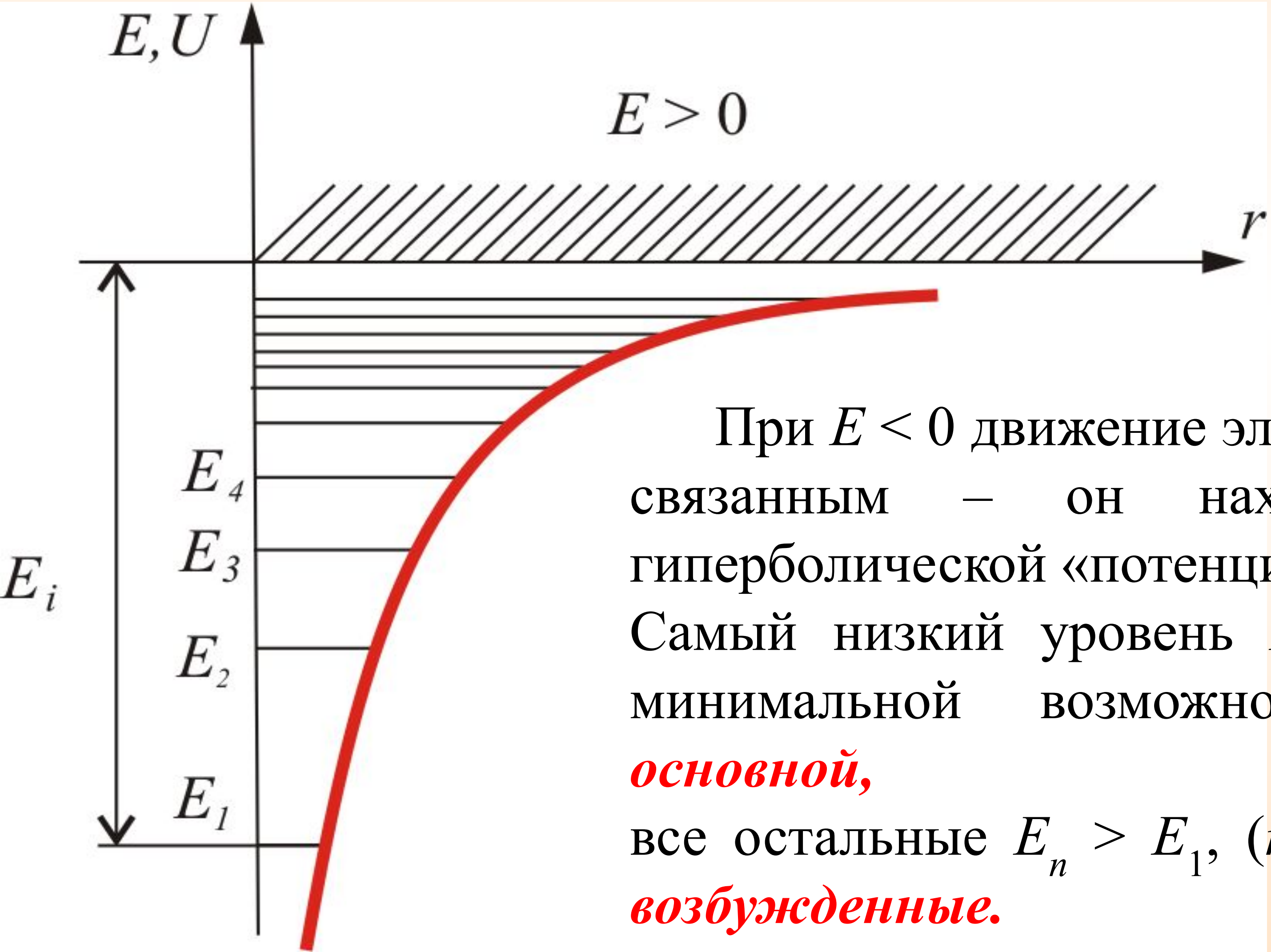
$U(r) = -\dfrac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r}$ - потенциальная энергия

Уравнения типа (3) ***имеют решение, удовлетворяющее однозначности, конечности и непрерывности волновой функции Ψ, только при собственных значениях энергии:***

$$\boxed{E_n = -\frac{1}{n^2}\frac{Z^2 me^4}{8\pi^2\varepsilon_0^2}}$$

где n = 1, 2, 3,…, т.е. дискретного набора отрицательных значений энергии.

Как и в случае «потенциальной ямы» с бесконечно высокими стенками, ***решение уравнения Шредингера для атома водорода приводит к появлению дискретных энергетических уровней:***

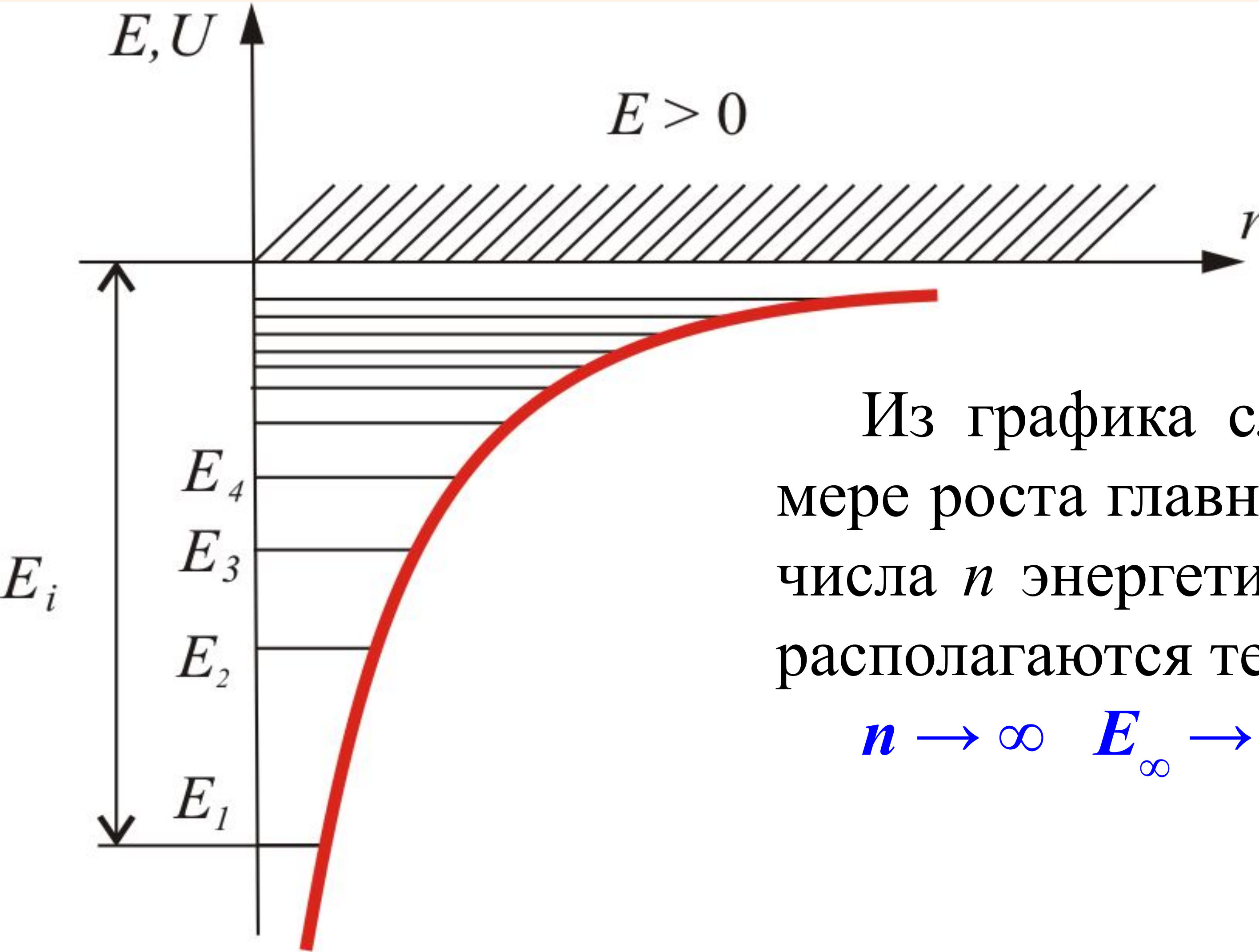


При $E < 0$ движение электрона является связанным – он находится внутри гиперболической «потенциальной ямы».

Самый низкий уровень E_1, отвечающий минимальной возможной энергии – ***основной,***

все остальные $E_n > E_1$, $(n = 2, 3, 4,\ldots)$ – ***возбужденные.***

При ***E > 0 движение электрона становится свободным;*** область ***E > 0*** соответствует ***ионизированному атому***.

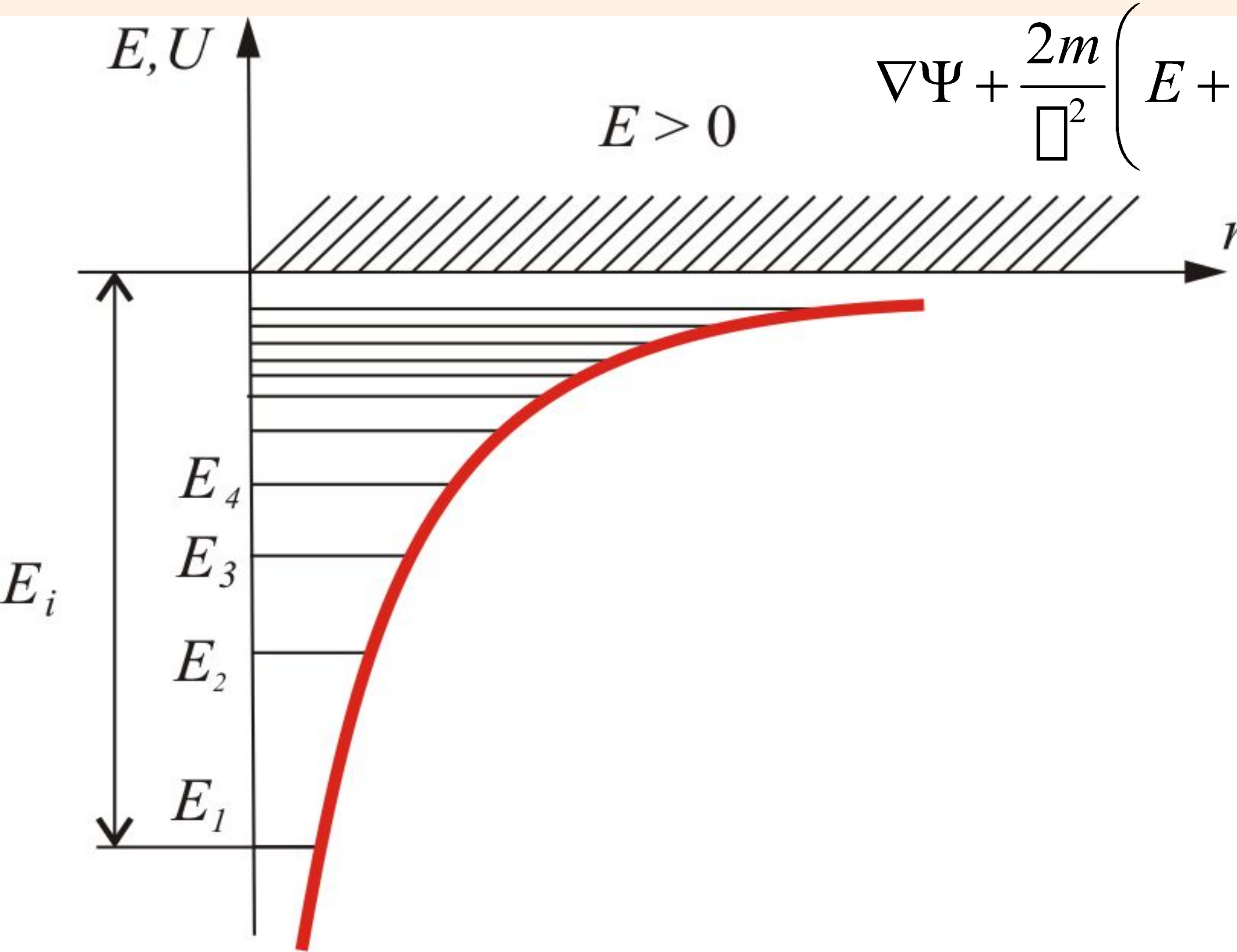


Из графика следует, что по мере роста главного квантового числа n энергетические уровни располагаются теснее и при

$$\boldsymbol{n \to \infty \quad E_\infty \to 0}.$$

Итак, если Бору пришлось вводить дополнительные гипотезы (постулаты), то в ***квантовой механике дискретные значения энергии, являясь следствием самой теории, вытекают непосредственно из решения уравнения Шредингера:***

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



x

2.2. Квантовые числа

В квантовой механике доказывается, что уравнению Шредингера удовлетворяют ***собственные функции*** $\boxed{\Psi_{nlm}}$, определяемые ***тремя квантовыми числами***:

- ***главным n***,
- ***орбитальным l***
- ***магнитным m***.

Как уже сказано в предыдущих параграфах – ***главное квантовое число n***, ***определяет энергетические уровни электрона*** в атоме и может принимать любые целочисленные значения начиная с единицы **(n = 1, 2, 3,…).**

x

Главное квантовое число n характеризует расстояние электрона от ядра – радиус орбиты.

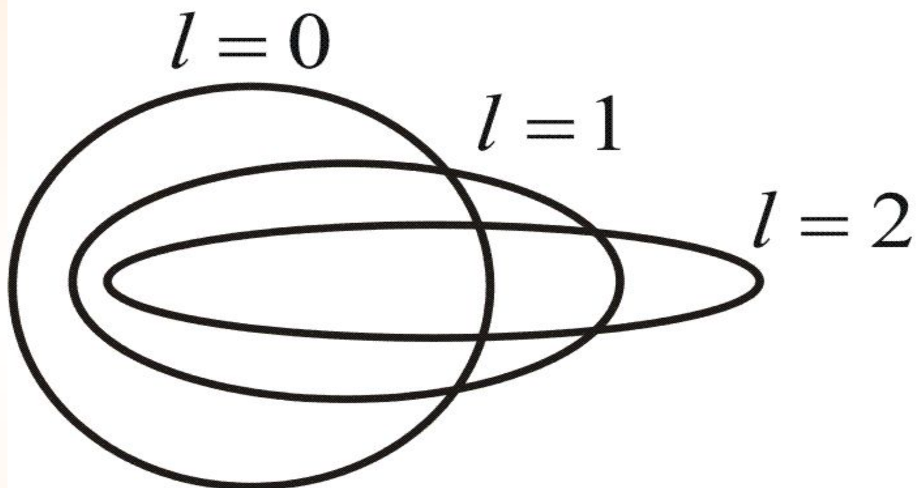
В атомной физике состояния электрона, соответствующие главному квантовому числу n, (n = 1, 2, 3, 4,…) принято обозначать буквами K, L, M, N,….

n	**1**	**2**	**3**	**4**
	K	***L***	***M***	***N***

Орбитальное квантовое число

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

характеризует эллиптичность орбиты электрона и определяет момент импульса электрона L



Состояния, соответствующие орбитальному числу $l = 0, 1, 2, 3, \ldots,$ также обозначаются буквами

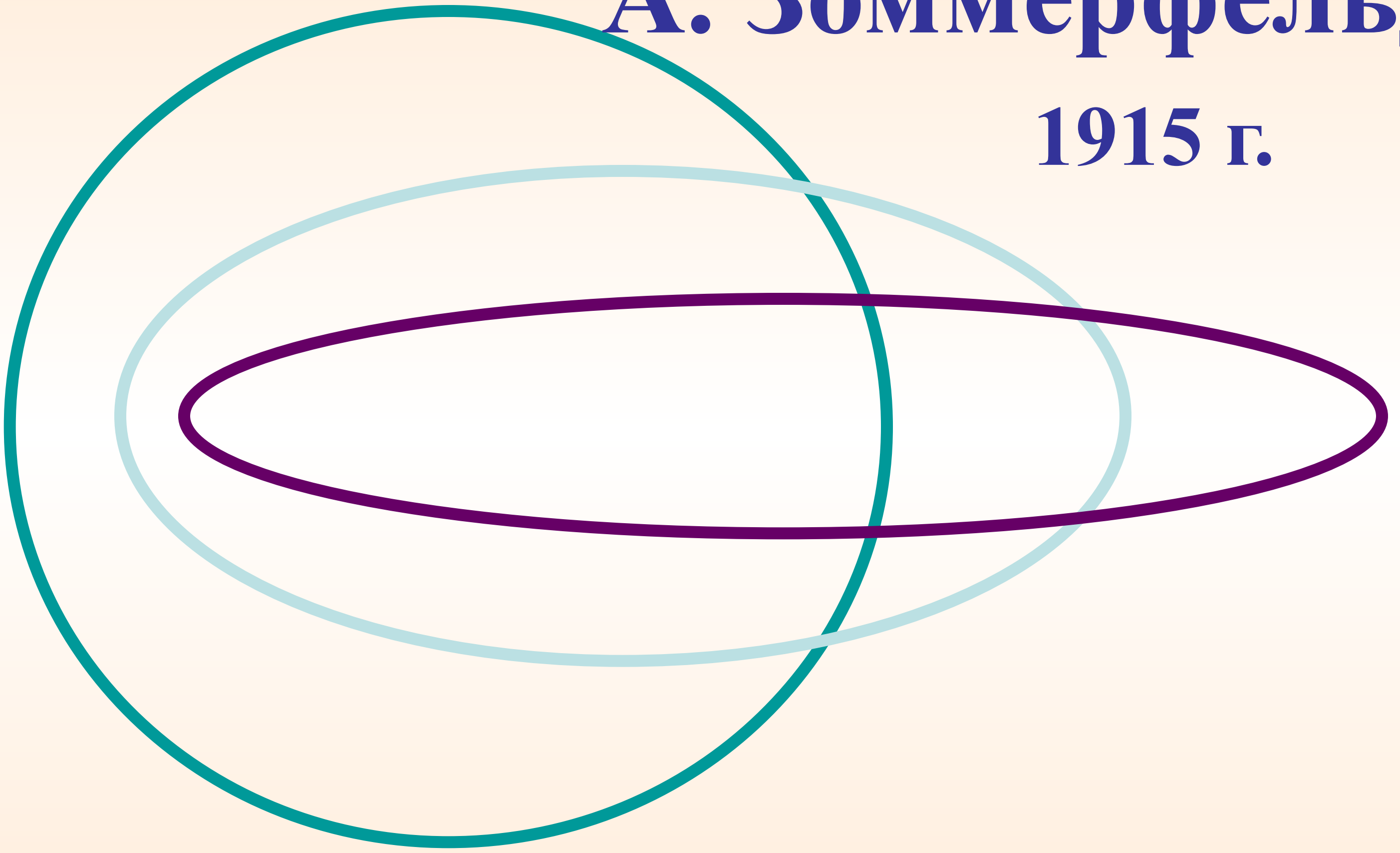
s, p, d, f,….

s*harp*, ***p****rincipal*, ***d****iffuse*, ***f****undamental*

l	**0**	**1**	**2**	**3**
	s	***p***	***d***	***f***

Эллиптические орбиты А. Зоммерфельда

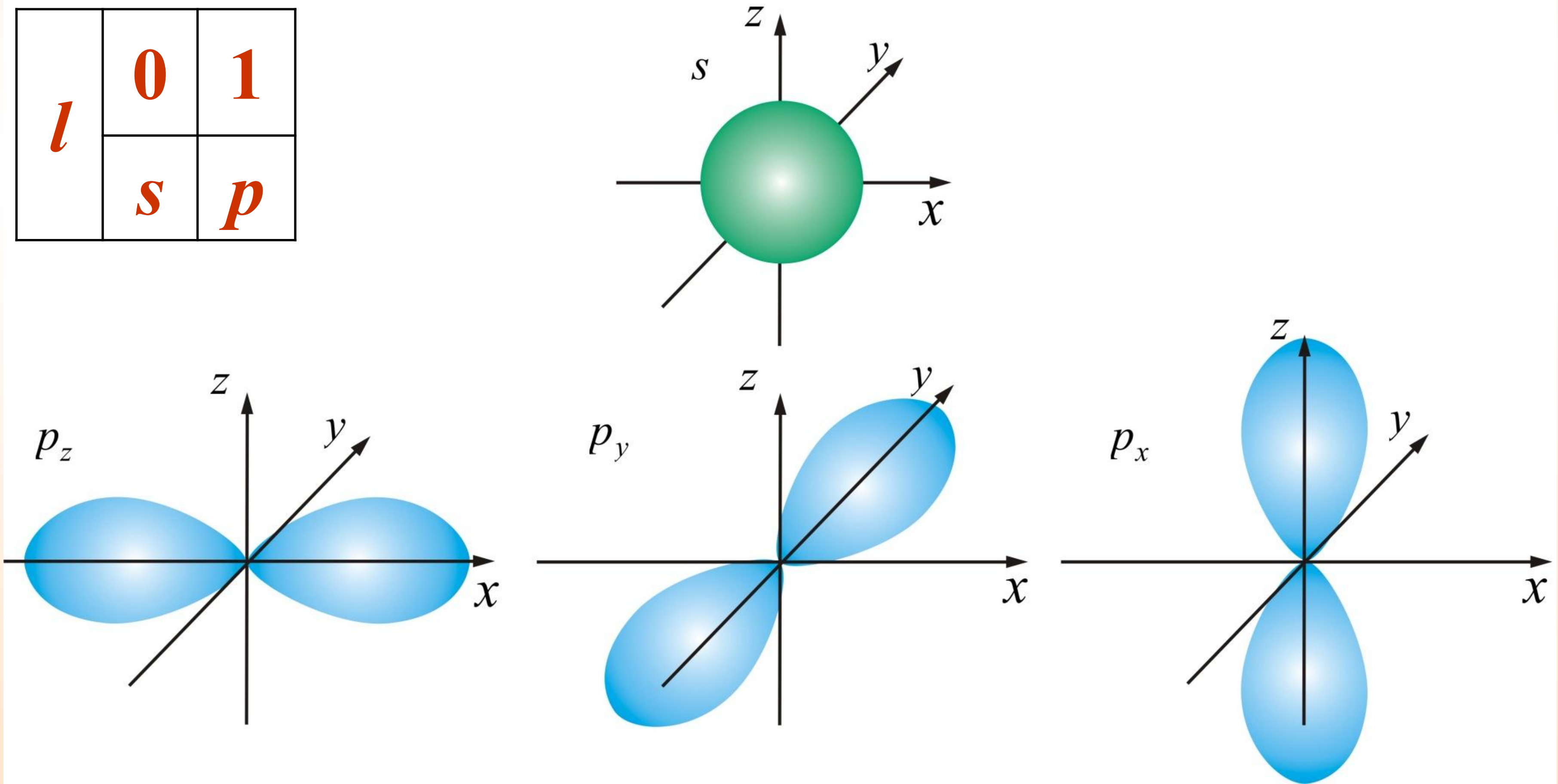
1915 г.



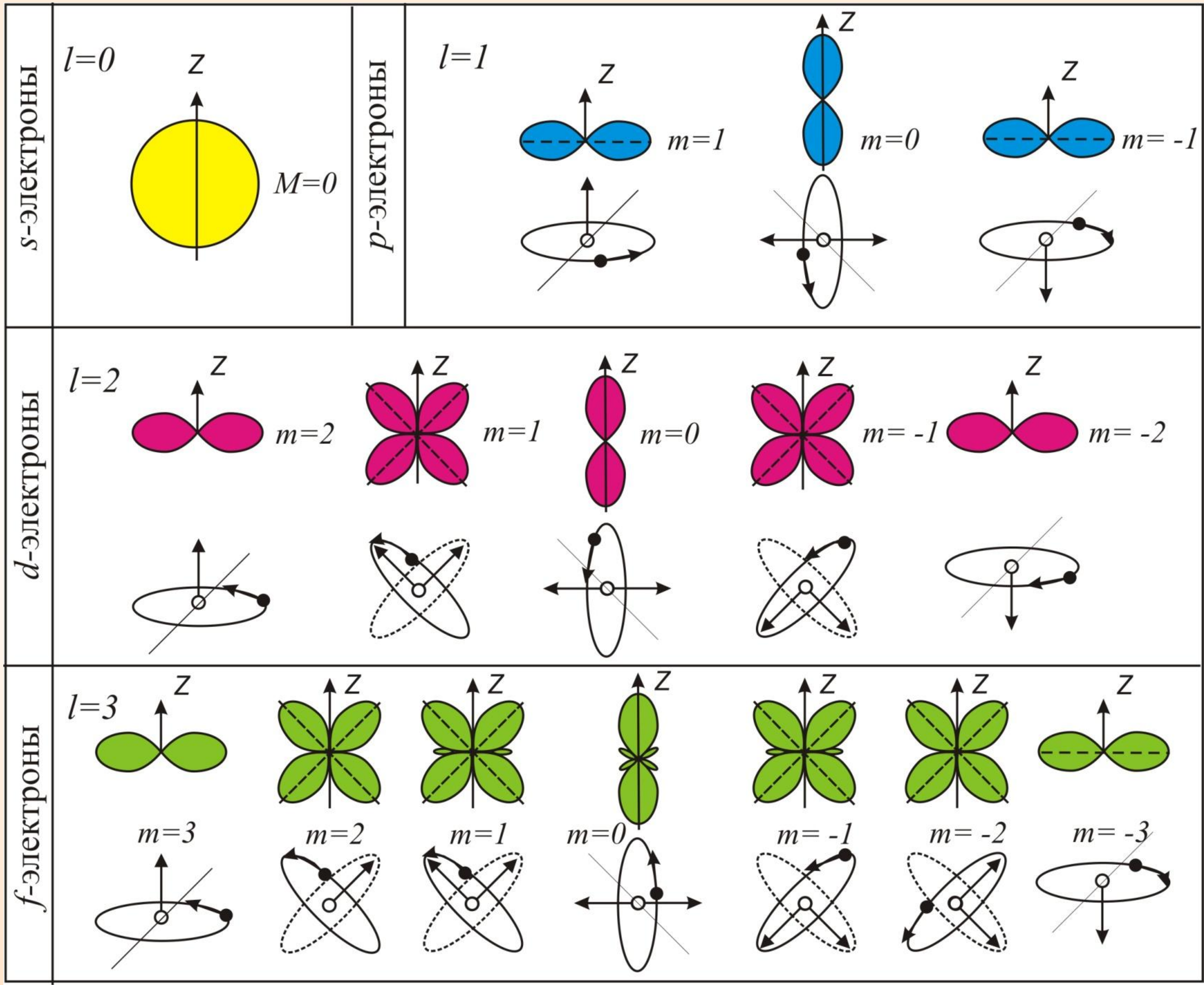
$$l = 1, 2, \ldots, (n-1)$$

Квадрат модуля функции $|\Psi|^2$ характеризует вероятность найти электрон в заданной точке. ***Область пространства***, **в *которой высока вероятность обнаружить электрон*** (не менее 0,95)**, *называют орбиталью*.**

l	**0**	**1**
	s	***p***



Орбитали часто называют подоболочками оболочек, *поскольку они характеризуют формы разных орбит, на которых можно обнаружить электроны, находящиеся в одной оболочке* (при заданном квантовом числе *n*).



x

Решая последовательно задачу об электроне в прямоугольной потенциальной яме мы доказали только то, что ***энергия и положение электрона квантуются, т.е. принимают дискретные значения.***

Решая уравнения Шредингера для атома можно получить выражения для энергии, момента импульса и других динамических переменных электрона без привлечения каких-либо постулатов.

x

Рассмотрим (без вывода) движение электрона в потенциальном поле

$$U = -Ze^2 / r$$

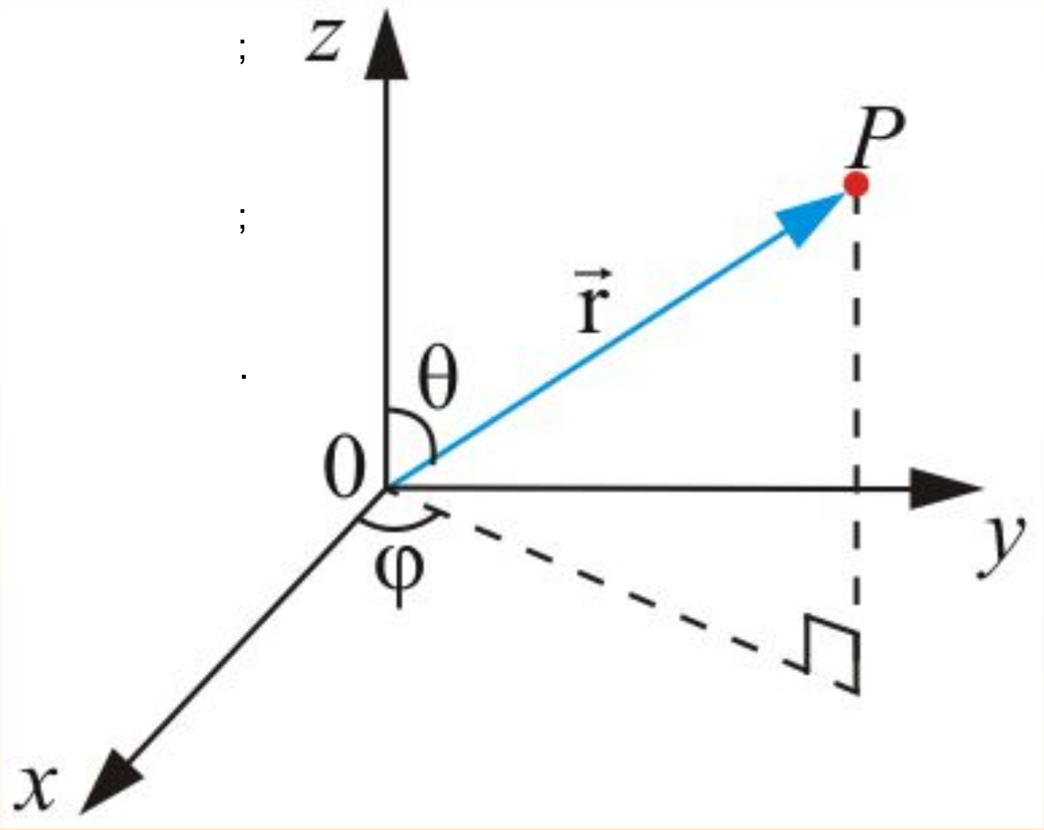
Стационарное уравнение Шредингера

$$\nabla^2 \Psi + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E + \frac{Ze^2}{r} \right)\Psi = 0 \qquad (1)$$

Так как электрическое поле – центрально-симметрично, то для решения этого уравнения воспользуемся сферической системой координат: r, θ, φ.

Воспользуемся сферической системой с координатами (r, θ, φ), которые связаны с декартовыми координатами, как это следует из рисунка, соотношениями:

$$x = r\sin\theta\cos\varphi \qquad y = r\sin\theta\sin\varphi \qquad z = r\cos\theta$$



x

Подставим в (1) выражение оператора Лапласа в сферических координатах, получим уравнение Шредингера в виде:

$$\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\Psi}{\partial r}\right)+\frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\Psi}{\partial\theta^2}\right)+\frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial^2\Psi}{\partial\varphi^2}+\frac{2m}{\hbar}\left(E+\frac{Ze^2}{r}\right)\Psi=0 \qquad (2)$$

Уравнение (2) имеет решение при всех значениях $E > 0$, это соответствует свободному электрону:

При $E < 0$

$$\boxed{E_n = -\frac{me^4Z^2}{2\hbar^2 n^2}}$$

где $n = 1, 2, 3\ldots$,

т.е. энергия принимает дискретные значения.

Вывод такой же как и в теории Бора, но здесь ***этот вывод получается как естественное следствие из уравнения Шредингера***.

x

В квантовой механике широко используется понятие – ***оператор***. Под оператором понимают *правило*, посредством которого одной функции **φ** сопоставляется другая функция ***f*** т е.

$$f = \hat{Q}\varphi$$

$\hat{Q}$ – символ обозначения оператора.

Есть операторы импульса, момента импульса и т.д.

$\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}$ – оператор скорости; $\dfrac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2}$ – ускорения.

Если S – путь, то $\dfrac{\mathrm{d}S}{\mathrm{d}t} = \upsilon$ – скорость и т.д.

x

С помощью оператора ***стационарное уравнение Шредингера*** можно записать в виде

$$\boxed{\hat{H}\Psi = E\Psi} \qquad (4)$$

Это традиционный вид записи уравнения Шредингера.

Здесь $\boxed{\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U}$ – ***оператор энергии***.

x

Воздействуя на Ψ – функцию, полученную при решении уравнения (2) ***оператором момента импульса*** (движение электрона вокруг ядра осуществляется по криволинейной траектории) ***можно получить выражение для момента импульса***.

Для ***момента импульса*** в квантовой механике вводятся четыре оператора: ***оператор квадрата момента импульса*** $\hat{L}^2$

и три оператора проекций момента импульса на оси координат $\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z$

x

$$\boxed{\hat{L}^2\Psi = L^2\Psi}$$

Уравнение для момента импульса электрона.

Решение этого уравнения является очень трудным

Ограничимся только конечным результатом:

Собственное значение ***орбитального момента импульса электрона L_e***

$$\boxed{L_e = \hbar\sqrt{l(l+1)}} \qquad (5)$$

l – орбитальное квантовое число($l = 0, 1, 2,\ldots\ n - 1$)

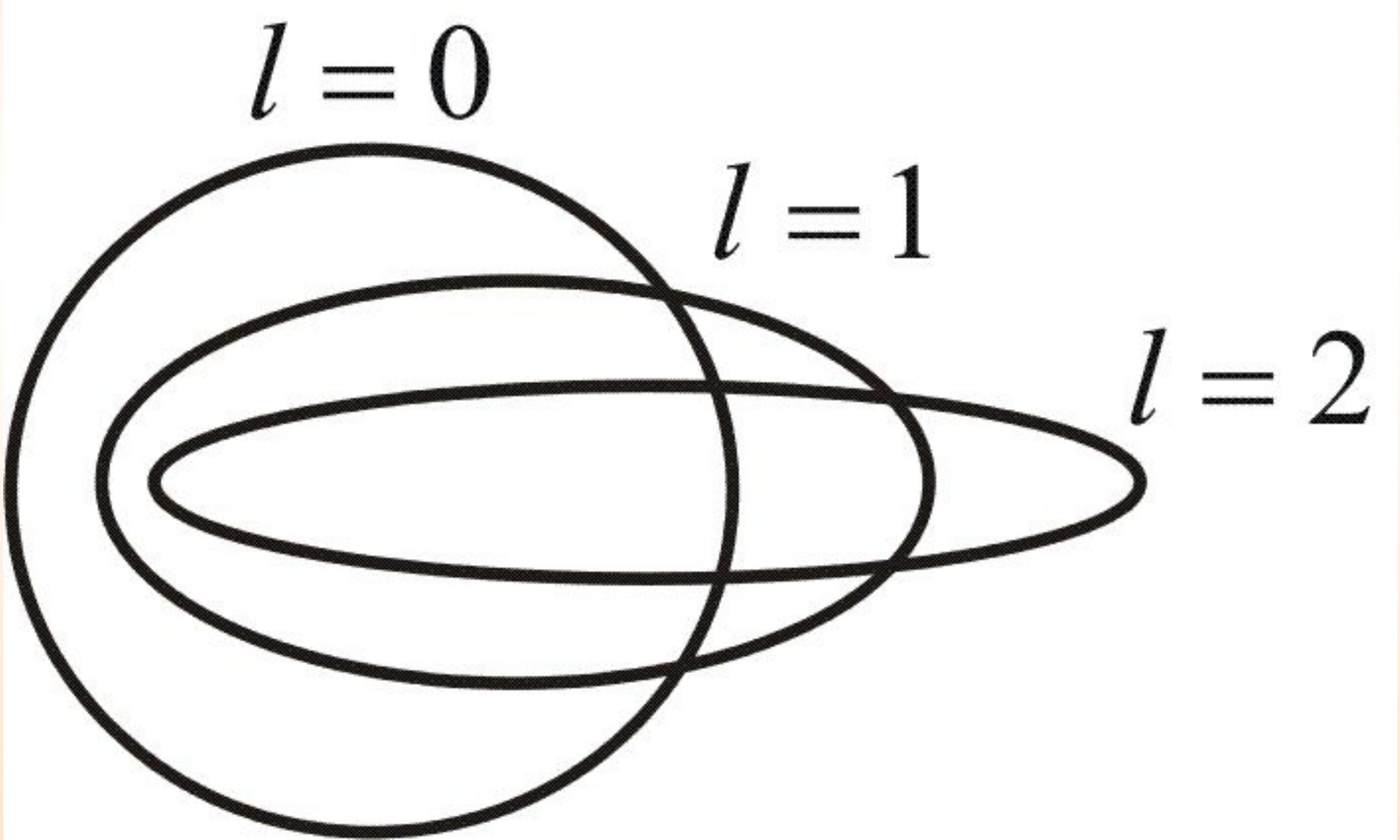
Из этого выражения видно, что ***момент импульса электрона в атоме тоже квантуется.***

x

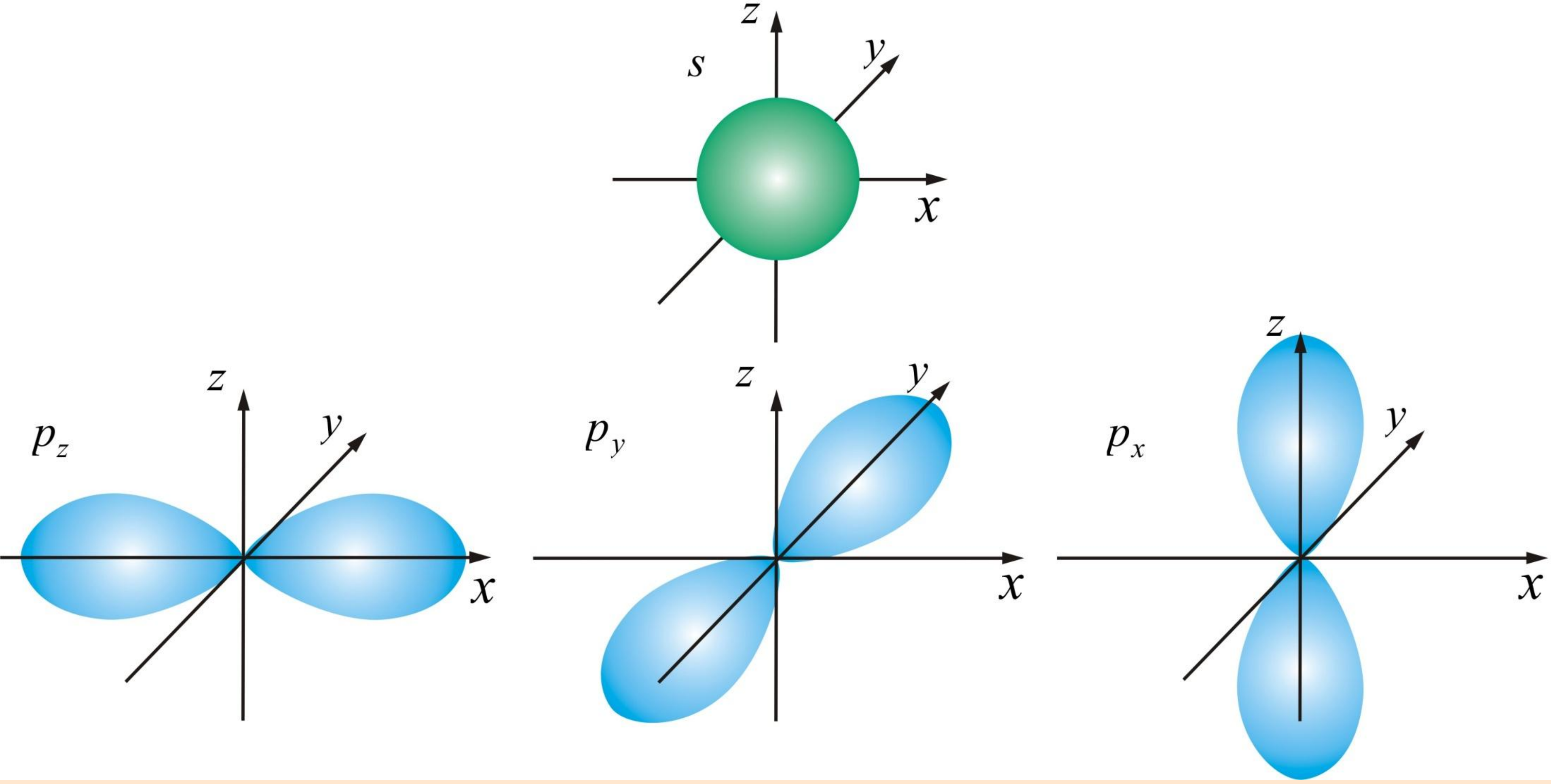
Если обратиться к привычной нам модели атома, то:

n – характеризует среднее расстояние электрона от ядра (радиус орбиты);

l – характеризует эллиптичность орбиты:



Основным состоянием электрона в атоме водорода является s – состояние:



Если вычислить ***наиболее вероятное расстояние от ядра для электрона***

в ***s –состоянии,*** получим:

$$r_1 = \frac{\hbar^2}{me^2}$$

в СИ:

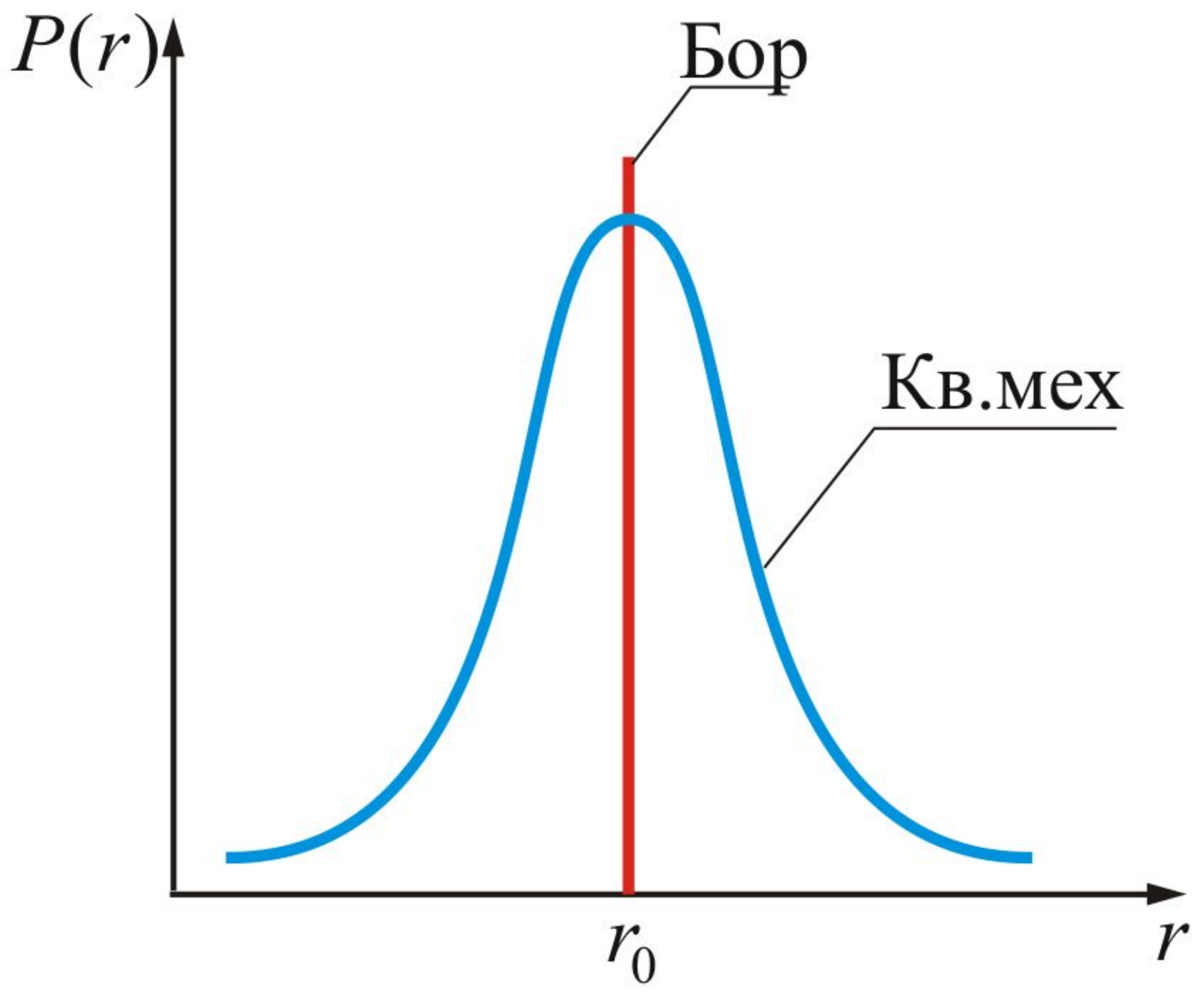
$$\boxed{r_1 = \frac{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}{me^2}}$$

– это **первый Боровский радиус**

Для других значений n получим выражения, соответствующие следующим Боровским орбитам.

x

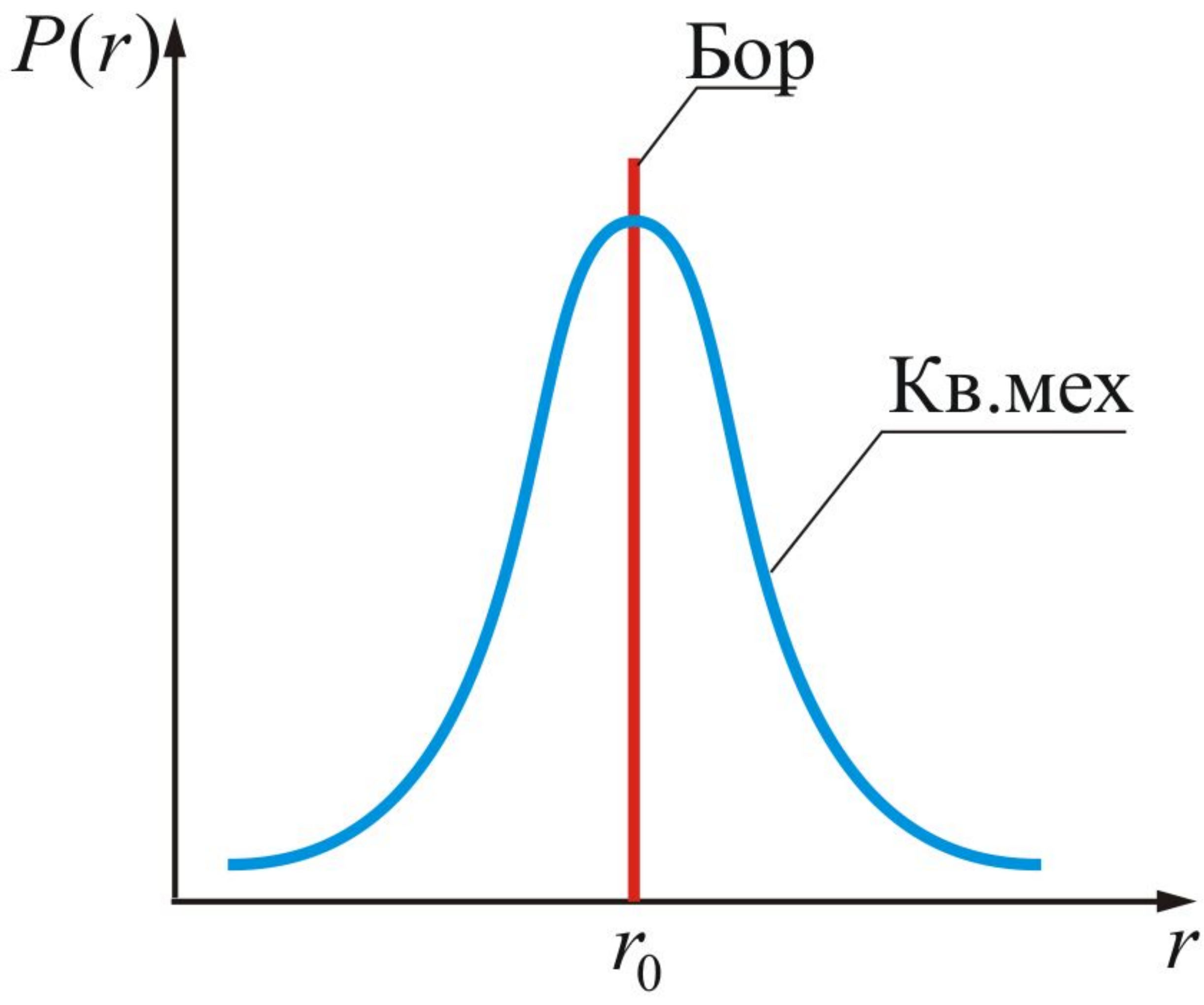
Боровские орбиты электрона представляют собой ***геометрическое место точек, в которых с наибольшей вероятностью может быть обнаружен электрон.***



По теории Бора ***вероятность нахождения электрона*** при любых других значениях r, кроме $r = r_1$, ***равна нулю.***

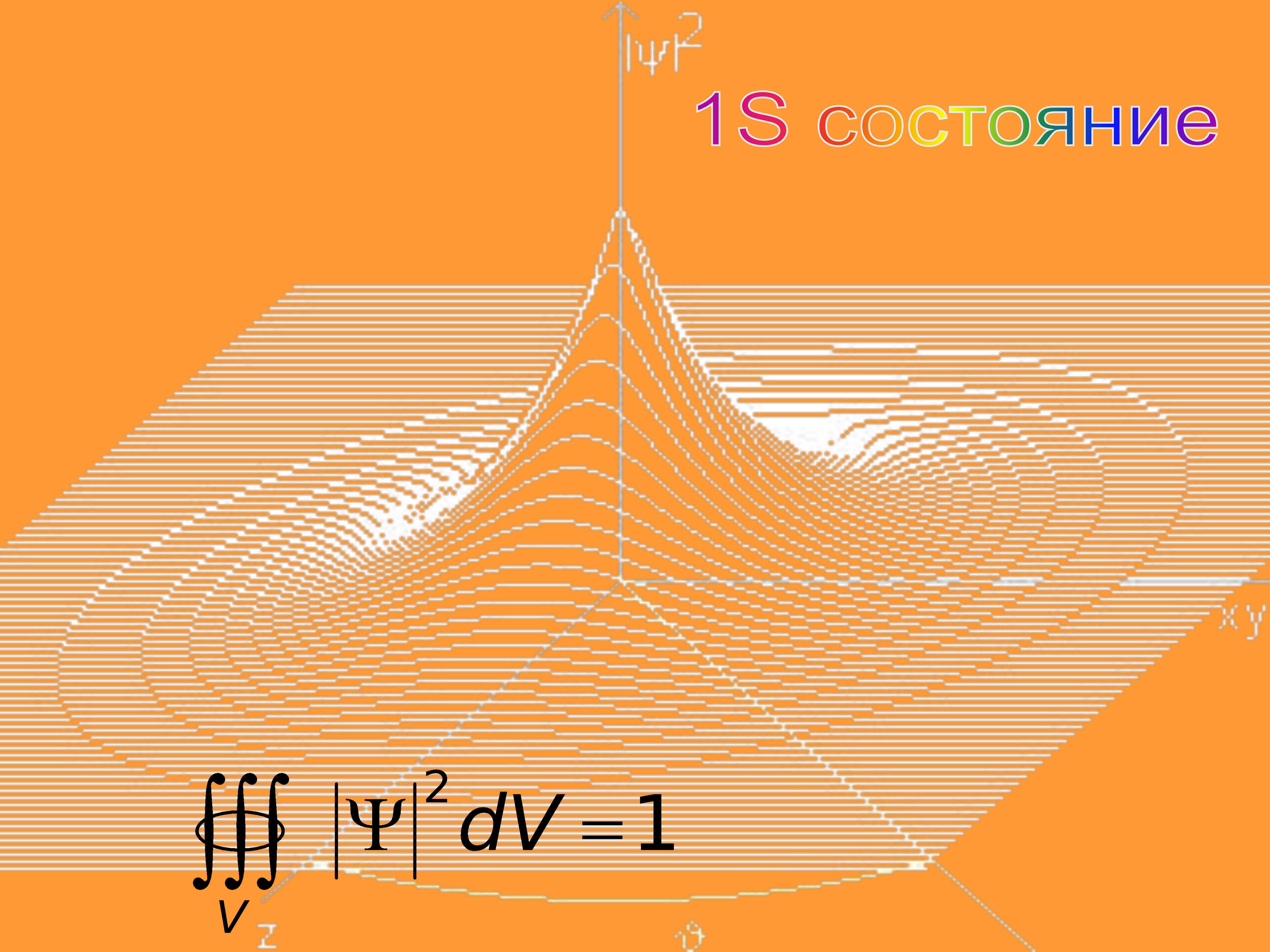
x

Согласно квантовой механике ***эта вероятность лишь достигает максимальное значение при*** $r = r_1$.



Допускается нахождение электрона и на других расстояниях от ядра, но ***с меньшей вероятностью.***

1S состояние

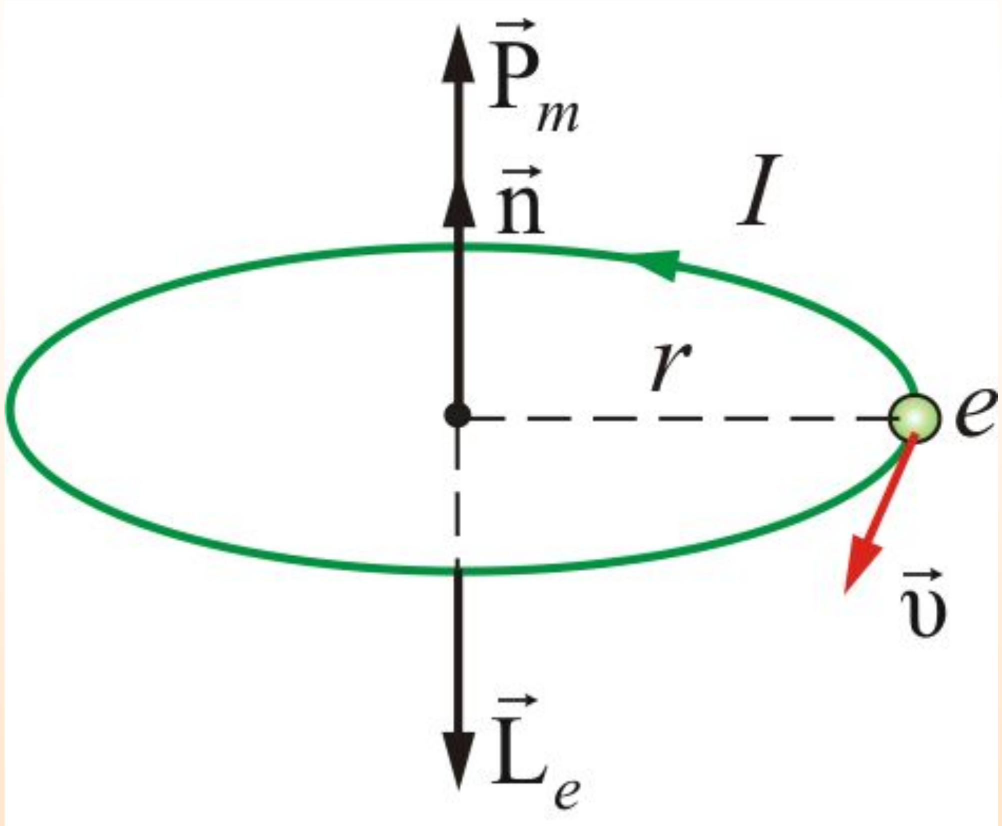


$$\iiint\limits_V |\Psi|^2 dV = 1$$

x

2.3. Пространственное квантование (магнитное квантовое число)

Из курса электричество магнетизма мы знаем, что орбитальный момент импульса электрона $\vec{L}$ и пропорциональный ему магнитный момент $\vec{P}_m$ ориентированы перпендикулярно плоскости орбиты электрона и противоположно направлены.



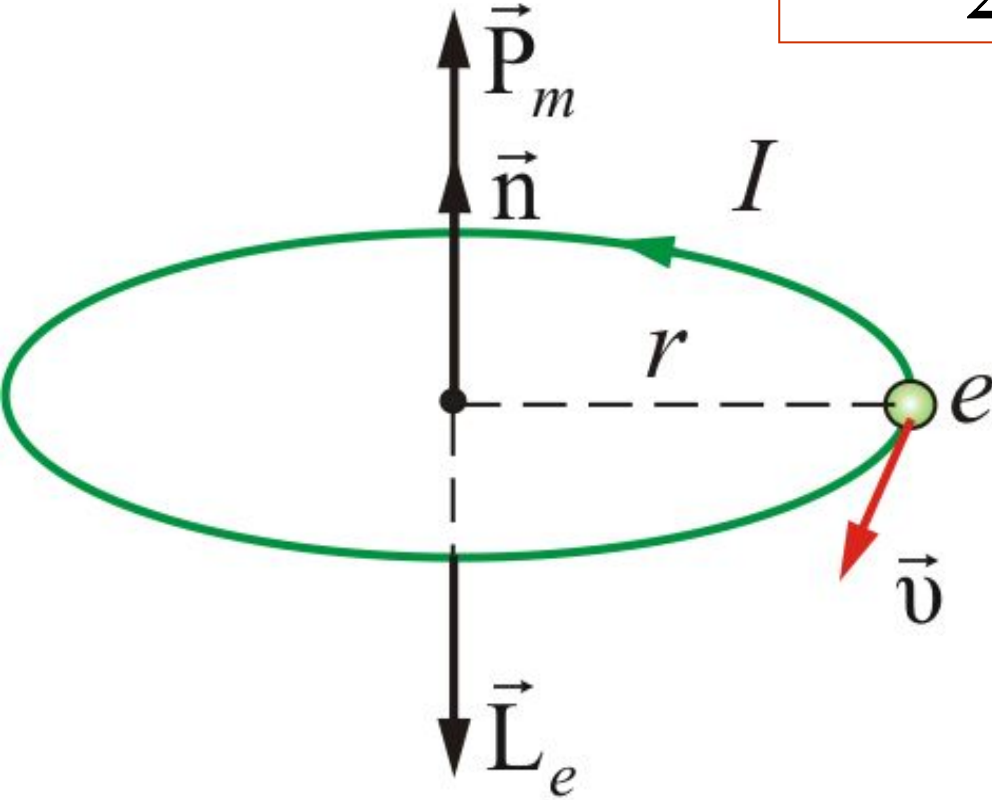
x

Между $\vec{L}$ и $\vec{P}_m$ существует связь

$$\boxed{\vec{P}_m = -g\vec{L} = -\frac{|e|}{2m}\vec{L}}$$

$$\boxed{g = \frac{|e|}{2m}}$$

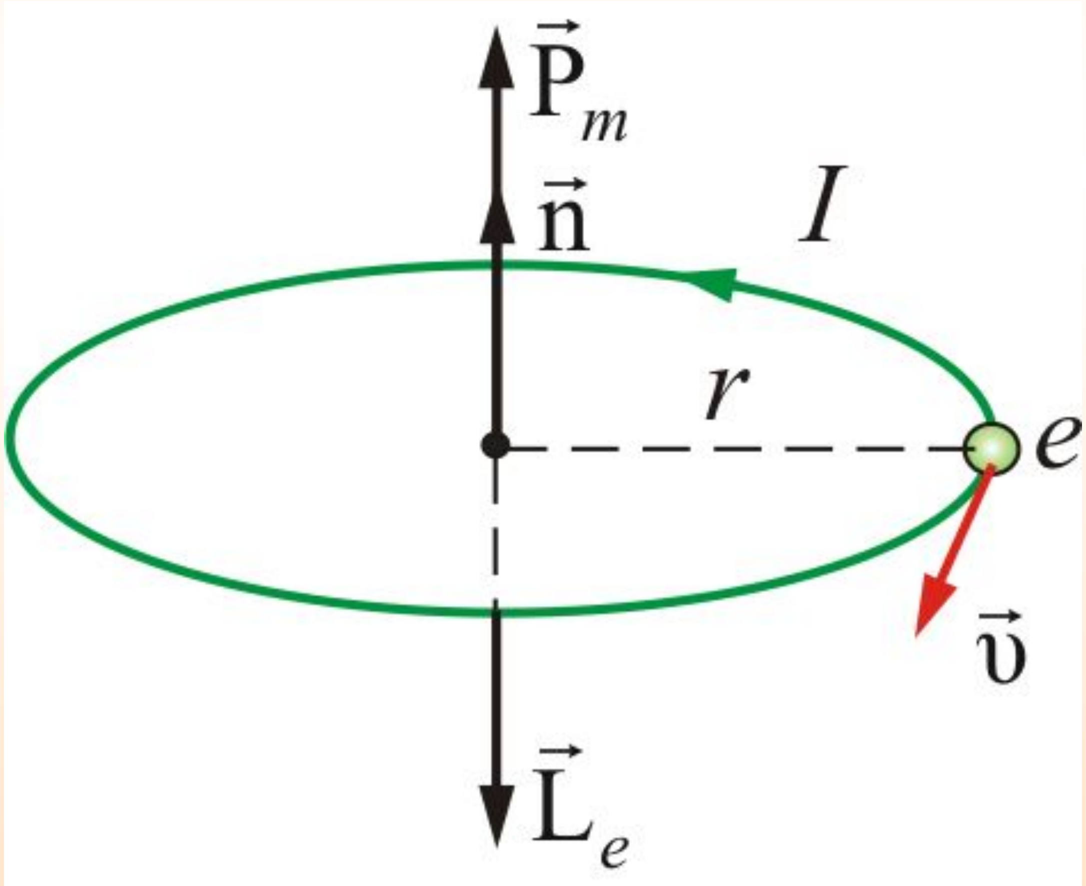
– орбитальное гиромагнитное отношение.



Такая связь векторов сохраняется и в теории Бора.

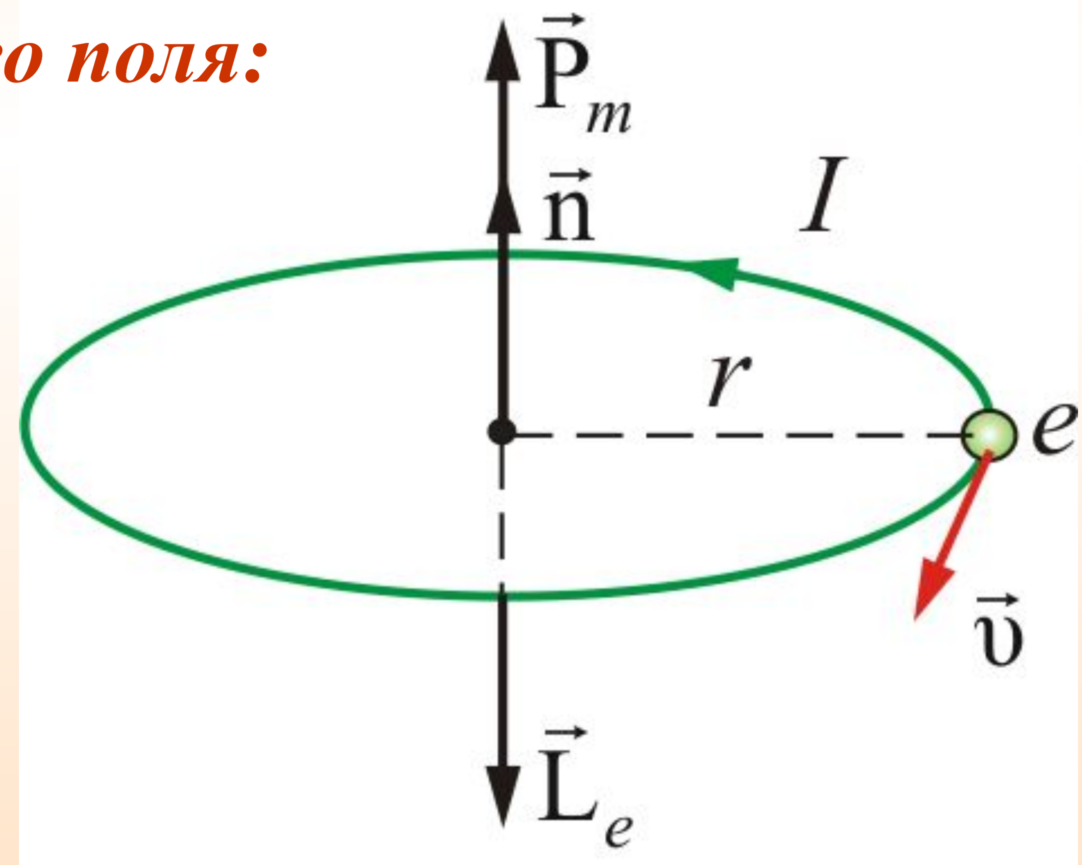
x

В *квантовой механике*, естественно, не может быть указана ориентация $\vec{L}$ и $\vec{P}_m$ относительно плоскости электронной орбиты (орбиты, в буквальном смысле этого слова, нет).



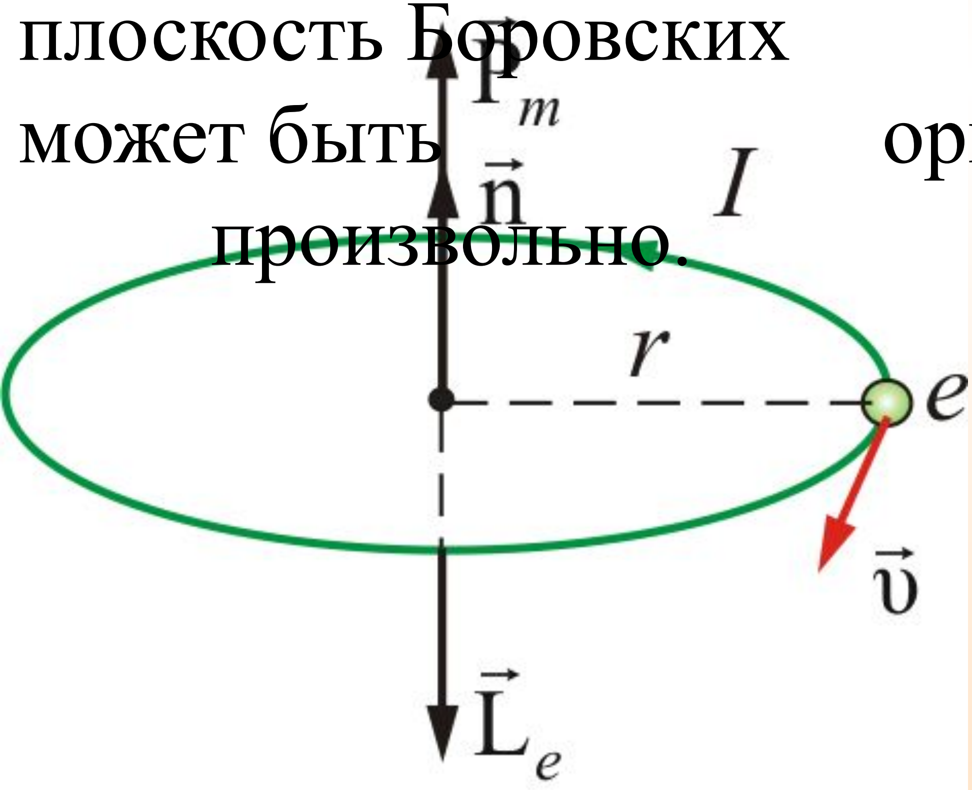
x

Для указанной ориентации $\vec{L}$ и $\vec{P}_m$ должно быть выбрано некоторое направление в пространстве, и расположение $\vec{L}$ может быть задано углом между вектором $\vec{L}$ и этим направлением. ***За указанное направление выбирается направление внешнего магнитного поля:***



x

В классической физике представлялось само собой разумеющимся, что вектор орбитального момента импульса электрона $\vec{L}$ (или магнитного момента $\vec{P}_m$) может быть ориентирован ***относительно выбранного направления*** ***произвольным образом***, т.е. плоскость Боровских орбит тоже может быть ориентирована произвольно.



x

Однако, такое предположение оказалось ошибочным.

В квантовой механике строго доказывается (это следует из решения уравнения Шредингера), что ***проекция*** (L_z) вектора $\vec{L}$ на направление внешнего поля (z) ***может принимать лишь целочисленные значения кратные*** $\hbar$

$$\boxed{L_Z = m\hbar} \qquad (2.3.2)$$

***m* = 0, ±1, ±2,…±*l* – *магнитное квантовое число*.**

l – орбитальное квантовое число,

Таким образом, $\vec{L}$ может принимать $(2l + 1)$ ориентаций в пространстве.

Определим величину модуля $\vec{L}$.

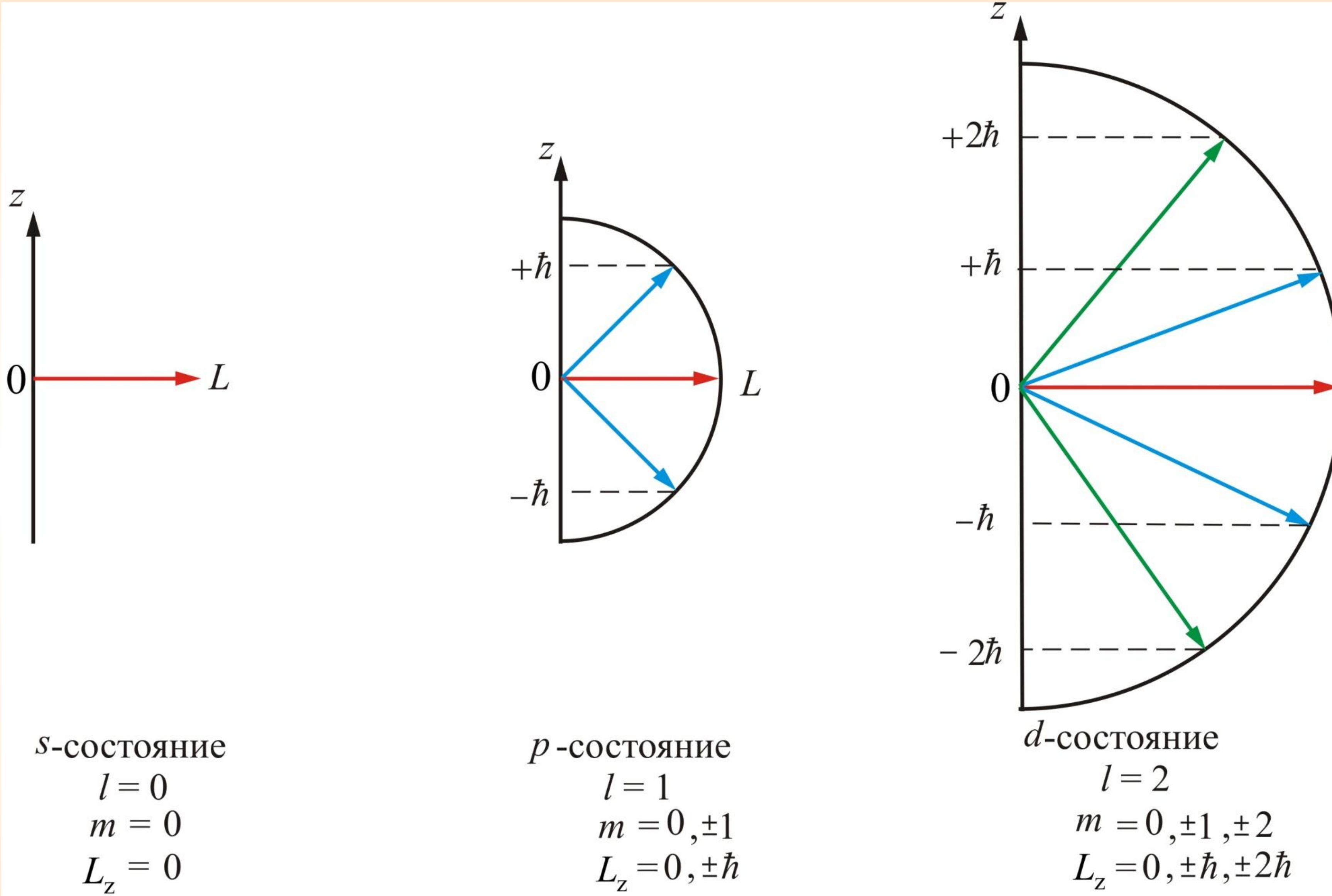
Т.к. проекция не может быть больше модуля вектора, то, следовательно $m\hbar \le \hbar\sqrt{l(l+1)}$.

Отсюда следует, что максимальное значение $|m| = l$ (m – целое число).

Итак, m тоже может принимать $(2l + 1)$ значений ($l = 0$ дает одно «лишнее» значение),

т. е. $\vec{L}$ может принимать $(2l + 1)$ ориентаций в пространстве.

Возможные ориентации вектора $\vec{L}$ в состояниях s, p, d.



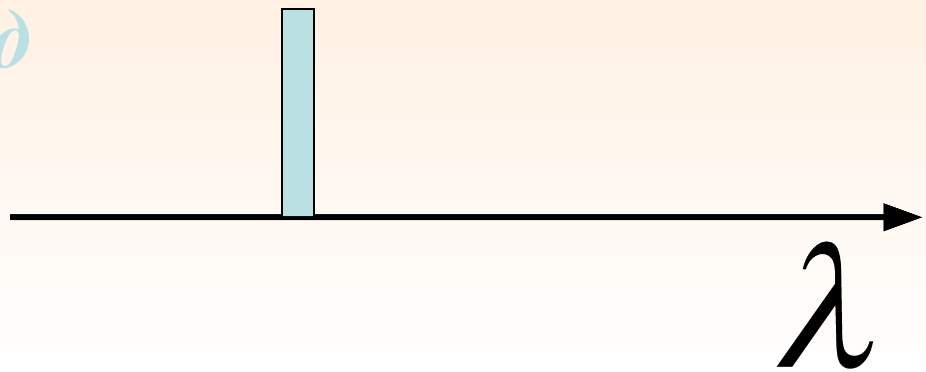
Таким образом, пространственное квантование приводит к «расщеплению» энергетических уровней на ряд подуровней.

Расщепление энергетических уровней в **<u>магнитном поле</u>** ***было обнаружено в 1896 г. голландским физиком П. Зееманом*** и получило название **эффекта Зеемана**.

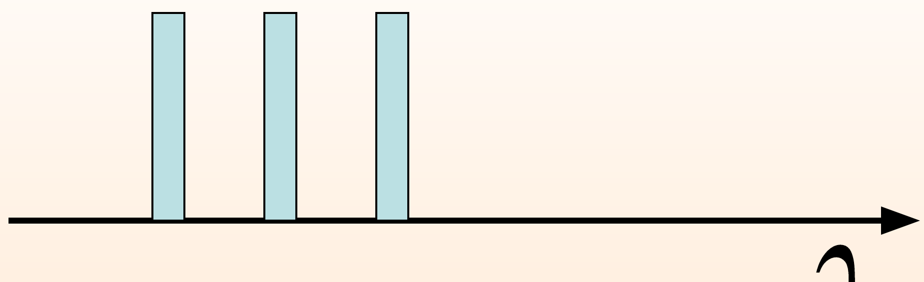
Расщепление уровней энергии во внешнем **<u>электрическом поле</u>** тоже доказано экспериментально и называется **эффектом Штарка.**

Эффект Зеемана

P - S переход

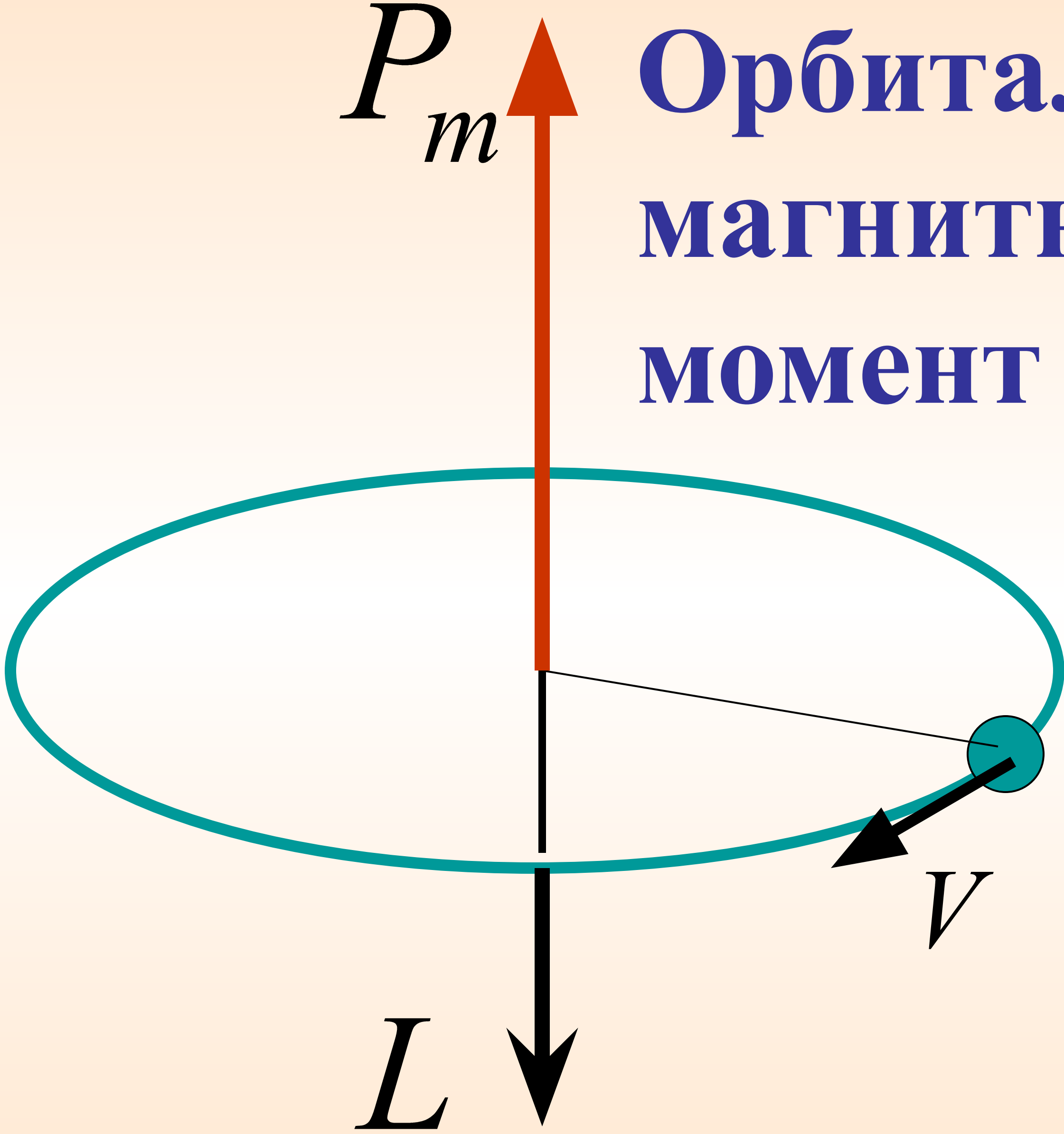


В магнитном поле

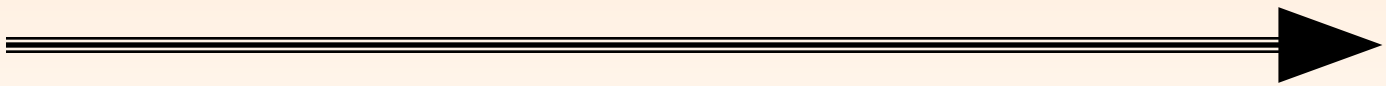


Триплет линий

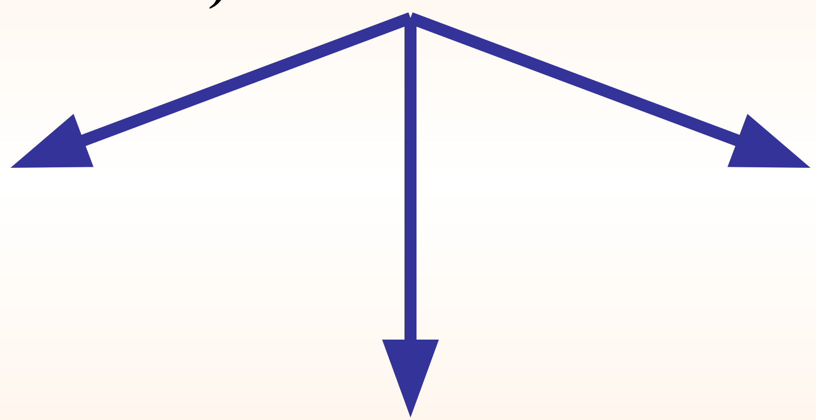
Орбитальный магнитный момент



Вектор индукции магнитного поля B



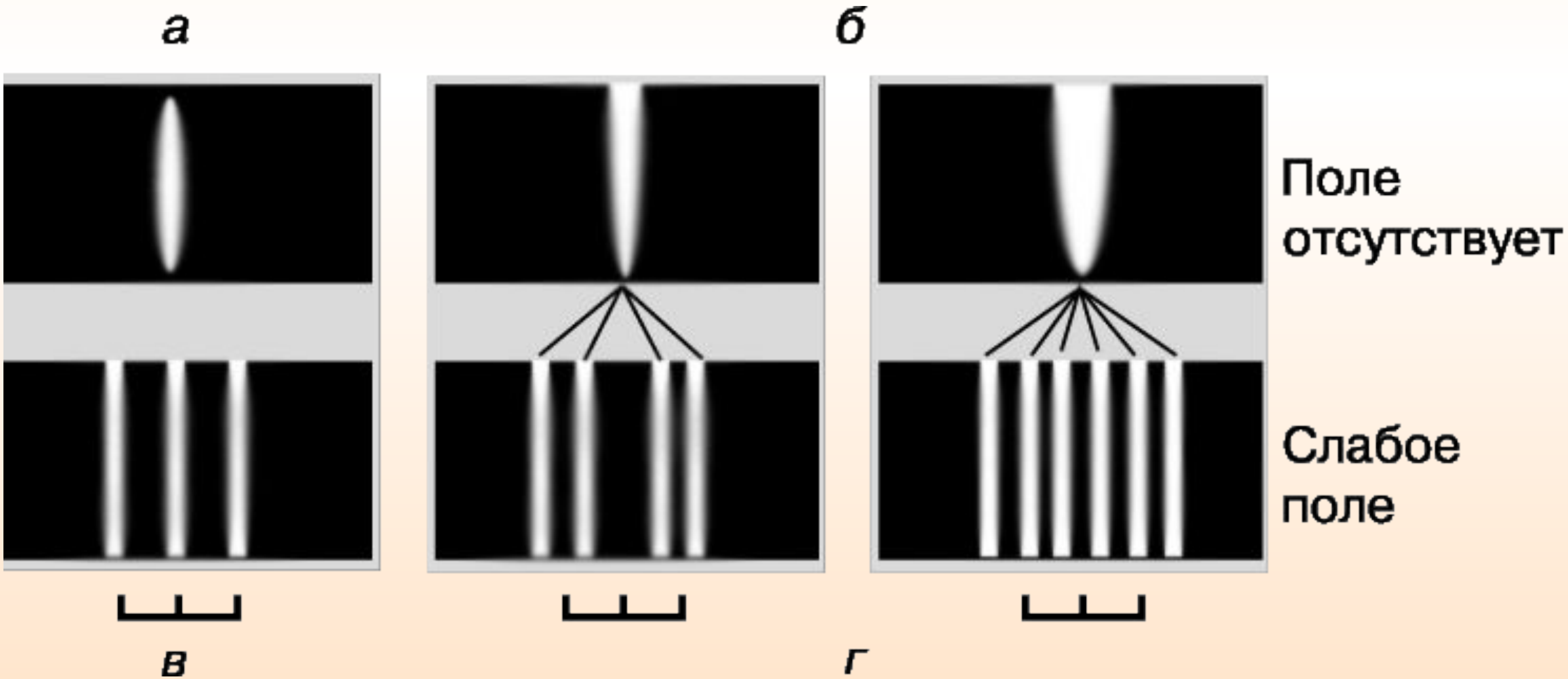
(для орбиты с $l = 1$ **).**



Возможные ориентации вектора орбитального магнитного момента P_m

Эффект Зеемана нормальный и аномальный (вид перпендикулярно направлению магнитного поля).

а – синглет цинка; *б* – главный дублет натрия; *в* – нормальный триплет; *г* – аномальное расщепление.



x

2.4. Опыт Штерна и Герлаха.

В 1922 году Штерн и Герлах поставили опыты, целью которых было измерение магнитных моментов P_m атомов различных химических элементов.

Для химических элементов, образующих первую группу таблицы Менделеева и имеющих один валентный электрон, магнитный момент атома равен магнитному моменту валентного электрона, т. е. одного электрона.

x

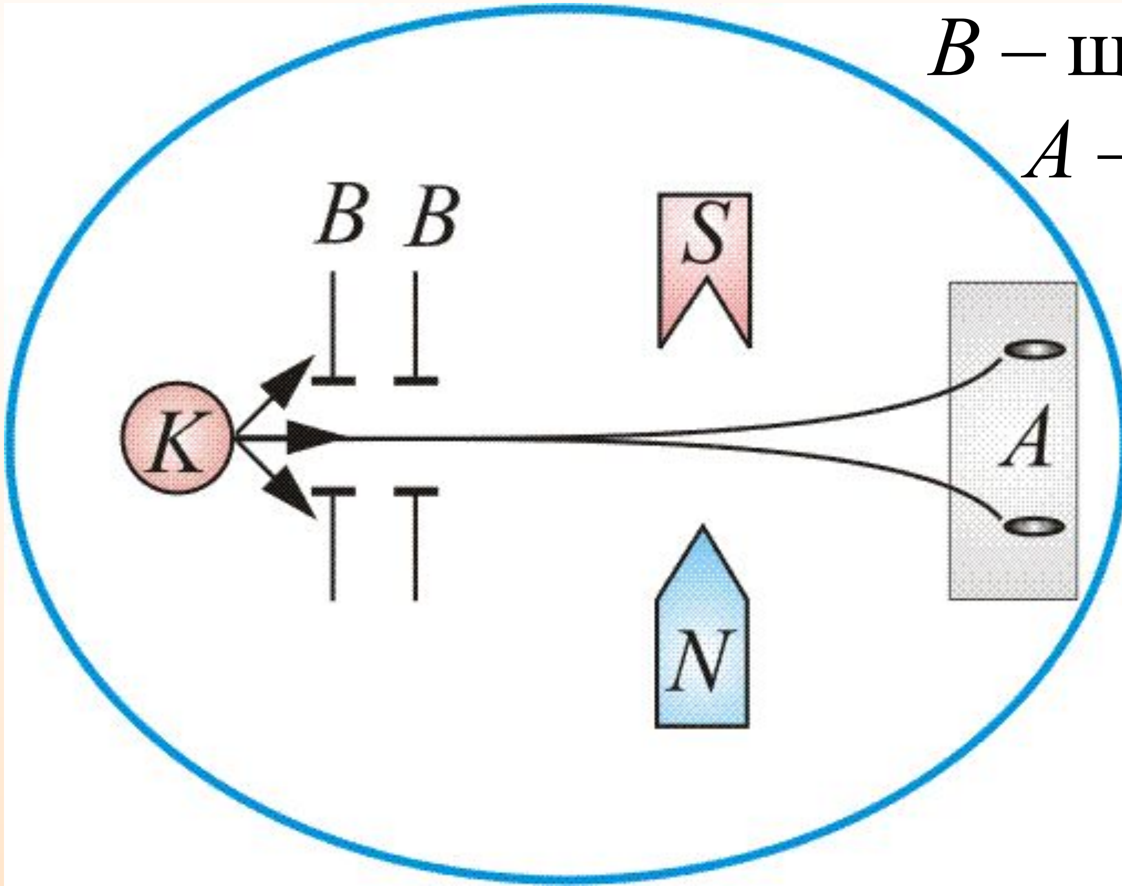
Идея опыта заключалась в измерении силы, действующей на атом в сильно - неоднородном магнитном поле.

Неоднородность магнитного поля должна быть такова, чтобы она сказывалась на расстояниях порядка размера атома. Только при этом можно было получить силу, действующую на каждый атом в отдельности.

x

В колбе вакуум 10^{-5} мм. рт. ст., ***K – серебряный шарик,*** который нагревался до температуры испарения.

Атомы серебра летели с тепловой скоростью около 100 м/с



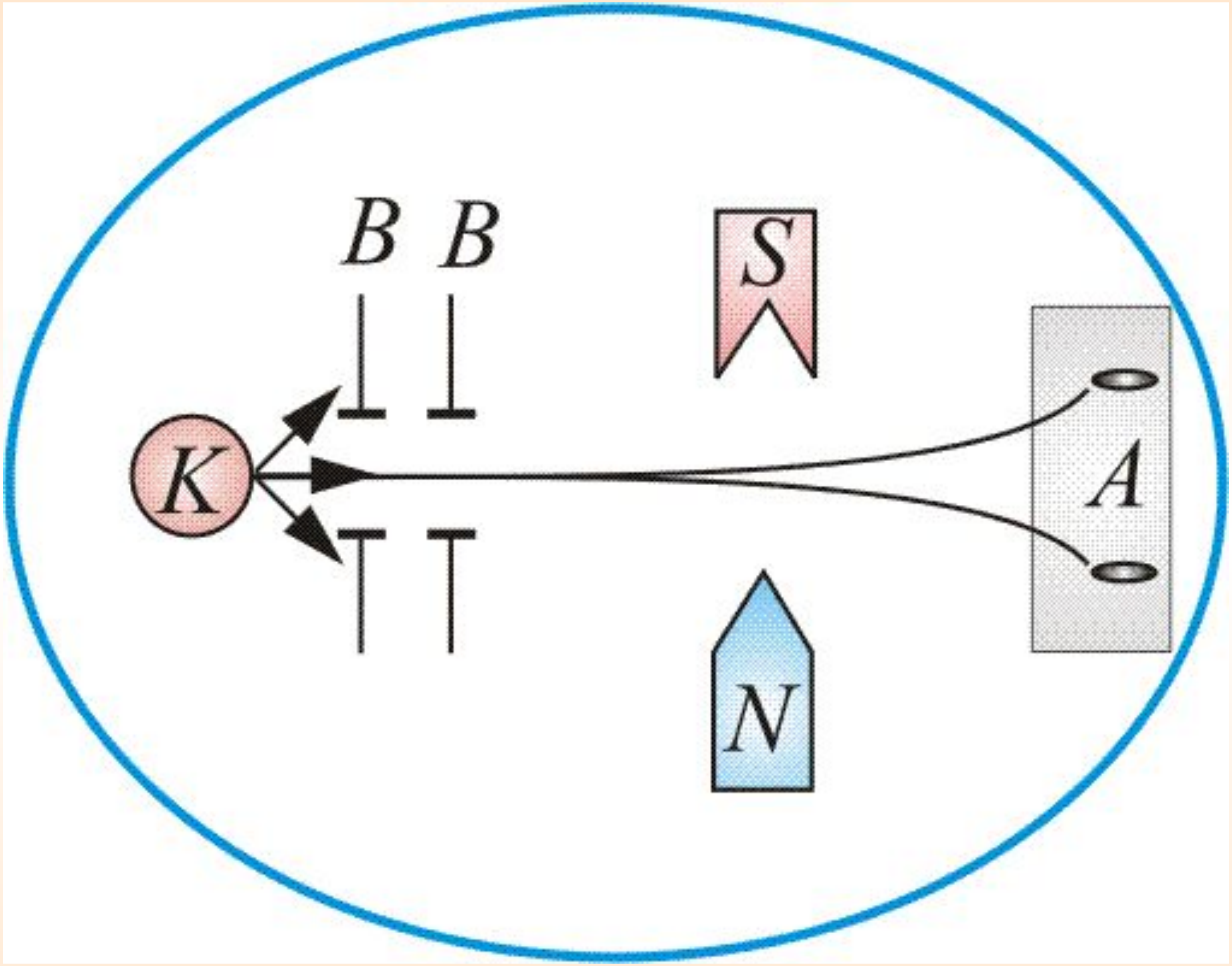
B – щелевые диафрагмы

A – фотопластинка.

x

Если бы момент импульса атома $\vec{L}$ (и его магнитный момент $\vec{P}_m$) мог принимать произвольные ориентации в пространстве, т.е. в магнитном поле, то можно было ожидать непрерывного распределения попаданий атомов серебра на фотопластинку с большой плотностью попаданий в середине.

Но на опыте были получены совершенно неожиданные результаты: на фотопластинке получились ***две резкие полосы*** – все атомы отклонялись в магнитном поле двояким образом, соответствующим лишь ***двум возможным ориентациям магнитного момента*** (рисунок 6).


B B
S
K
A
N

x

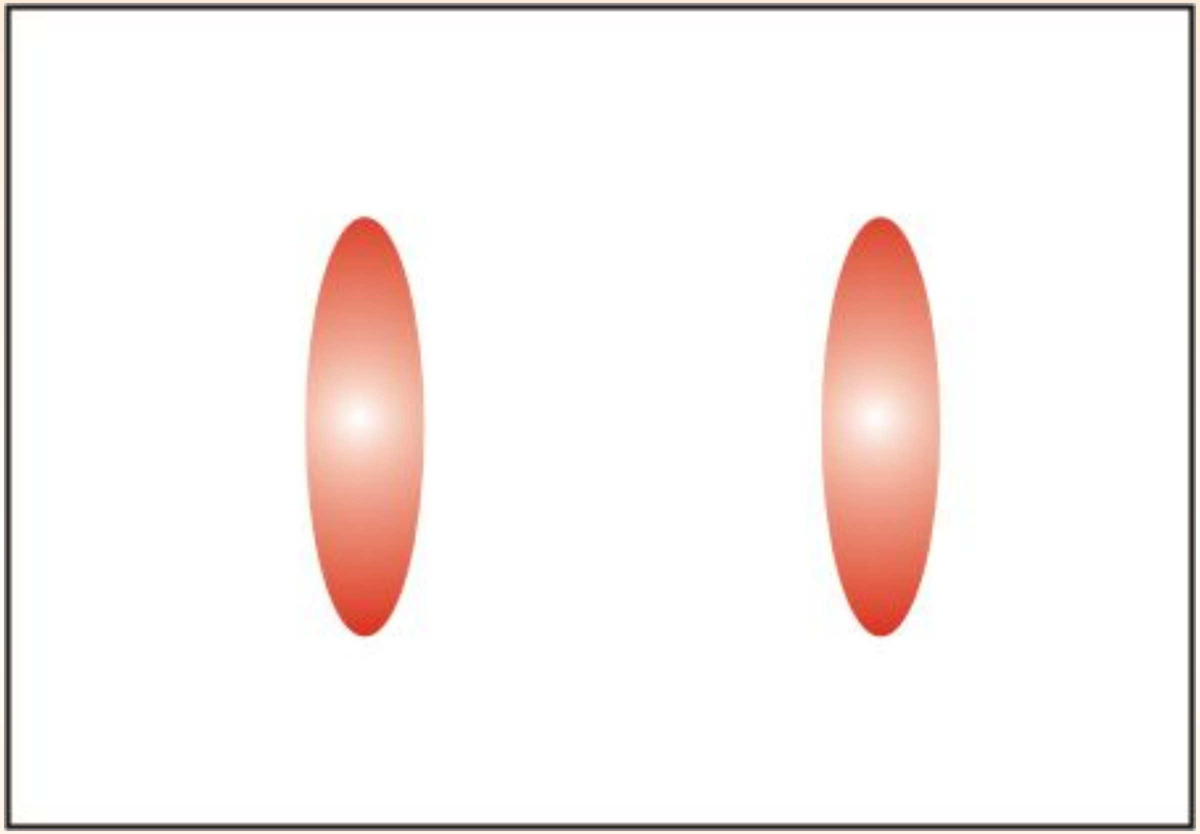


Рисунок 6

x

Этим доказывался квантовый характер магнитных моментов электронов.

Количественный анализ показал, что проекция магнитного момента электрона равна

$$\boxed{\mu_{\acute{A}} = \frac{e\hbar}{2m} = 0{,}927 \cdot 10^{-23}\,\text{Äæ} \cdot \text{Òë}^{-1}}$$ магнетон Бора

Т.е. для серебра Штерн и Герлах получили, что ***проекция магнитного момента*** атома (электрона) на направление магнитного поля ***численно равна магнетону Бора***.

Напомню: $$P_m = \frac{e}{2m}L = \frac{e\hbar}{2m}\sqrt{l(l+1)} = \mu_{Б}\sqrt{l(l+1)}$$

x

Опыты Штерна и Герлаха не только ***подтвердили пространственное квантование*** моментов импульсов в магнитном поле, но и дали экспериментальное подтверждение тому, что ***магнитные моменты электронов тоже состоят из некоторого числа «элементарных моментов», т.е. имеют дискретную природу.***

Единицей измерения магнитных моментов электронов и атомов является магнетон Бора ($\hbar$ – единица измерения механического момента импульса).

x

Кроме того, в этих опытах было обнаружено новое явление. Валентный электрон в основном состоянии атома серебра имеет орбитальное квантовое число $l = 0$ (s – состояние).

Но при $l = 0$,

$$L = \hbar\sqrt{l(l+1)} = 0$$

(проекция момента импульса на направление внешнего поля равна нулю).

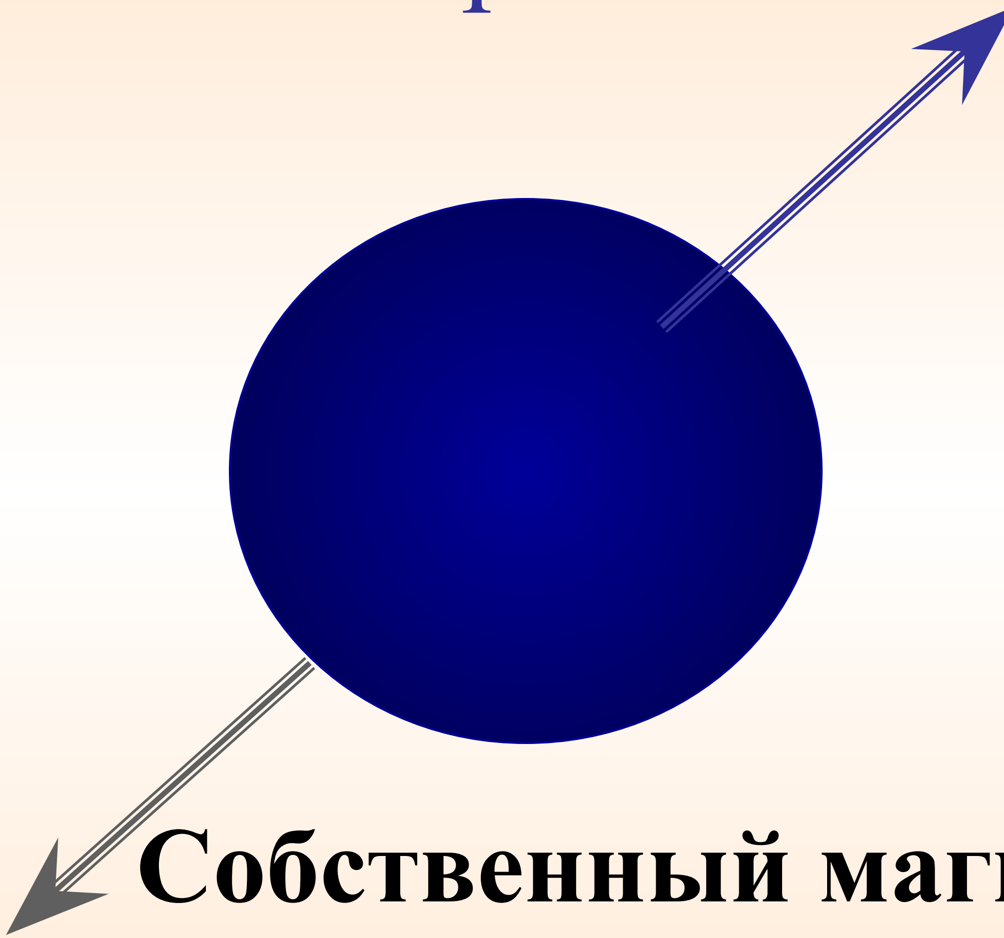
Возник вопрос, пространственное квантование ***какого момента импульса*** обнаружилось в этих опытах и проекция какого магнитного момента равна магнетону Бора?

x

В 1925 г. студенты Геттингенского университета ***Гаудсмит*** и ***Уленбек*** предложили существование **собственного механического <u>момента импульса у электрона S</u>** (**спина**) **и,** *соответственно,* ***собственного магнитного момента электрона m_S.***

Введение понятия спина сразу объяснило ряд затруднений, имевшихся к тому времени в квантовой механике и в первую очередь, результатов опытов Штерна и Герлаха.

Спин электрона ***S***



Собственный магнитный момент электрона

x

Авторы дали такое толкование ***спина***: ***электрон вращающийся волчок.***

Но тогда следует, что «поверхность» волчка (электрона) должна вращаться с линейной скоростью равной 300*c*, где *c* – скорость света. От такого толкования спина пришлось отказаться.

Спин, как заряд и масса есть свойство электрона

П.Дирак впоследствии показал, что ***существование спина вытекает из решения релятивистского волнового уравнения Шредингера.***

Из общих выводов квантовой механики следует, что ***спин***

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

S –спиновое квантовое число.

x

Аналогично, проекция спина на ось z (L_{Sz}) (ось z совпадает с направлением внешнего магнитного поля) должна быть квантована и вектор L_{Sz} может иметь $(2S + 1)$ различных ориентаций в магнитном поле.

Из опытов Штерна и Герлаха следует, что таких ориентаций ***всего две***:

$$2S + 1 = 2,$$

а значит $S = 1/2$.

x

Для атомов первой группы, валентный электрон которых находится в s – состоянии (l = 0) ***момент импульса атома равен спину валентного электрона***.

Поэтому ***обнаруженное для таких атомов пространственное квантование момента импульса в магнитном поле является доказательством наличия у спина лишь двух ориентаций во внешнем поле.***

(Опыты с электронами в p – состоянии подтвердили этот вывод, хотя картина получилась более сложной) (желтая линия натрия – дуплет из-за наличия спина).

x

Численное значение спина электрона

$$L_S = \sqrt{(1/2)(1/2+1)}\hbar = \frac{\sqrt{3}\hbar}{2}$$

По аналогии с пространственным квантованием орбитального момента (L) проекция $L_{Sz} = m_S\hbar$, т.е. тоже ***должна быть квантованной величиной*** (аналогично, как $m = \pm e$, то и $m_S = \pm S$).

Проекция спина на направление внешнего магнитного поля, являясь квантовой величиной, определяется выражением: $\boxed{L_{sz} = \hbar m_s}$

где m_s – ***магнитное спиновое квантовое число***.

$m_s = \pm 1/2$ **может принимать только два значения, что и наблюдается в опыте Штерна и Герлаха.**

И так ***магнитное спиновое квантовое число*** $m_s = \pm 1/2$ ***может принимать два значения***.

Спиновое квантовое число S имеет только одно значение $\boldsymbol{S} = 1/2$.

Итак, **проекция** *спинового механического момента импульса на направление внешнего магнитного поля может принимать два значения:*

$$L_{Sz} = \pm 1/2\hbar \tag{2.4.1}$$

Так как мы всегда имеем дело с проекциями, то говоря, что спин имеет две ориентации; имеем в виду, что две проекции.

Проекция магнитного момента электрона на направление внешнего поля:

$$\boxed{P_{mSz} = \mu_{\acute{A}} = \frac{e\hbar}{2m}}$$

(часто говорят о собственном магнитном моменте электрона)

Отношение

$$\frac{P_{msz}}{L_{sz}} = -\frac{e}{m_e} = \gamma_s$$

– спиновое гиромагнитное отношение.

Лекция окончена!!!