

## Тема: Квантовая механика

**Квантовая механика** – это теория, изучающая свойства микрочастиц и законы их движения и взаимодействия.

(под микрочастицей подразумеваются элементарные частицы, а так же атомы и молекулы вещества)

### Особенности поведения микрочастиц

Качественно отличительным признаком микрочастиц является сочетание в них корпускулярных и волновых свойств, а так же вероятностный характер в их поведении.

Наблюдения показывают, что:

1. поведение отдельного микрочастицы описывается законами теории вероятности, в то время как коллектив микрочастиц подчиняется вполне определённым законам (*законам радиоактивного распада, схемам распада и взаимопревращения элементарных частиц, законам сохранения энергии, импульса, момента импульса и др.*)
2. в мире микрочастиц существенную роль играет **квантование физических величин**, то есть некоторые физические величины при определённых условиях могут принимать лишь какие-то вполне определённые значения.
3. при взаимодействии микрочастиц с веществом иногда проявляются корпускулярные свойства, а иногда волновые, то есть все элементарные частицы обладают, так называемым, **корпускулярно-волновым дуализмом**.

Эти и другие экспериментальные данные свидетельствуют о том, что в зависимости от условий, микрочастицы в одних случаях ведут себя как частицы, а в других случаях проявляют свои волновые свойства.

Применение законов классической механики к движению микрочастиц давали неверные результаты. Необходимо было создать другую механику, которую назвали квантовой.

## Корпускулярно-волновые свойства вещества. Гипотеза Луи де Бройля

В 1924 г французский физик Луи де Бройль предложил идею о том, что корпускулярно-волновыми свойствами обладают не только кванты электромагнитного излучения, но и все движущиеся элементарные частицы. Причём связь корпускулярных характеристик – энергии  $E$  и импульса  $p$  с волновыми характеристиками – длиной волны  $\lambda$  такая же, как у квантов света:

$$E = \frac{hc}{\lambda} \quad \text{и} \quad p = \frac{h}{\lambda},$$

где  $c = 3 \cdot 10^8 \frac{\text{м}}{\text{с}}$  – скорость света в вакууме.

Таким образом, любой частице, обладающей импульсом, сопоставляется волновой процесс с длиной волны  $\lambda$ , определяемой по формуле де Бройля:

$$\lambda = \frac{h}{p}.$$

*Если частица классическая* (то есть её скорость много меньше скорости света в вакууме  $c = 3 \cdot 10^8 \frac{\text{м}}{\text{с}}$ ), то импульс находится по классической формуле

$$p = mv.$$

*Если частица релятивистская* (то есть её скорость сравнима со скоростью света в вакууме  $c = 3 \cdot 10^8 \frac{\text{м}}{\text{с}}$ ), то импульс находится по релятивистской формуле

$$p = \frac{mv}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}.$$

*В настоящее время экспериментально доказаны волновые свойства нейтронов, протонов и других элементарных частиц, а также некоторых атомов и даже молекул. Это свидетельствует о том, что волновые свойства частиц являются общим свойством материи.*

## Соотношения неопределённостей Гейзенберга

Двойственная природа частиц определяет ещё одно необычное, с точки зрения классических представлений, свойство микрообъектов: невозможность одновременно точно определить координату и соответствующую этой координате проекцию импульса микрочастицы.

Таким образом, при изучении движения микрочастиц и их взаимодействия с веществом приходится учитывать наряду с корпускулярными, ещё и волновые свойства частиц.

Как показал в 1927 году Гейзенберг эти ограничения имеют следующий вид:

1. Невозможно одновременно точно определить координату частицы ( $x, y$  или  $z$ ) и соответствующие им проекции импульса ( $p_x, p_y$  или  $p_z$ ), причём неопределённость этих величин удовлетворяют следующим уравнениям:

$$\Delta p_x \Delta x \geq \hbar; \quad \Delta p_y \Delta y \geq \hbar; \quad \Delta p_z \Delta z \geq \hbar$$

где  $\hbar = \frac{2\pi}{h} = 1,05 \cdot 10^{-34} \text{ Дж} \cdot \text{с}$  - постоянная Дирака.

2. Если микросистема находится в некотором состоянии с энергией  $E$  в течение какого – то промежутка времени  $\Delta \tau$ , то неопределённость энергии этого состояния  $\Delta E$  связана со временем  $\Delta \tau$  следующим соотношением:

$$\Delta E \Delta \tau \geq \hbar,$$

(то есть, чем больше времени  $\Delta \tau$  система находится в данном состоянии, тем точнее можно определить энергию этого состояния  $E$ )

Из соотношений неопределённостей Гейзенберга следует, что из-за малости величины постоянной Планка эти ограничения проявляются только для систем атомарного размера и массы.

### Основные уравнения квантовой механики (уравнения Шрёдингера)

В квантовой механике возникла необходимость получения уравнения подобного второму закону Ньютона в классической механике, при этом следовало учесть волновые свойства микрочастиц. Эту задачу решил в 1926 году Шредингер.

Как и уравнения Ньютона, уравнения Шредингера не выводятся, а постулируются, и их справедливость доказывается тем, что выводы, полученные с их помощью, находятся в хорошем согласии с опытом.

Задавая вид потенциального поля, в котором движется микрочастица, из уравнений Шрёдингера можно определить энергетический спектр микрочастицы и вероятность её нахождения в любой точке пространства.

Анализ уравнений Шрёдингера позволил:

- объяснить природу химической связи;

- выяснить строение атома;
- объяснить периодичность в химических свойствах атомов, объяснить существование в природе проводников, полупроводников и диэлектриков;
- объяснить механизм протекания термоядерных реакций на Солнце и звёздах и др.

В 1926 г Шрёдингер написал основное уравнение нерелятивистской квантовой механики, которое учитывает волновые свойства элементарных частиц.

Оно имеет следующий вид:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi + U\Psi = i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} \text{ - временное уравнение} \quad (1)$$

Шрёдингера,

где  $\Psi(x, y, z, t)$  - волновая функция,  $m$  - масса частицы,

$U(x, y, z, t)$  - потенциальная функция (описывает воздействие на частицу силового поля, в котором она движется);  $i = \sqrt{-1}$  - мнимая единица.

Уравнение (1) является основным уравнением нерелятивистской квантовой механики (то есть оно описывает движение частиц, скорость которых много меньше скорости света в вакууме).

Для свободной частицы (то есть на которую не действуют внешние силы), уравнение Шрёдингера будет иметь вид:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi = i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} \text{ - временное уравнение} \quad (2)$$

Шрёдингера  
для свободной частицы.

Уравнения (1) и (2) называются временными, потому что в них содержится производная по времени  $\frac{\partial\Psi}{\partial t}$ , то есть вид волновой функции зависит от времени.

## Стационарное уравнение Шрёдингера

Если частица находится в стационарном внешнем силовом поле (то есть вид потенциальной функции не зависит от времени и в этом случае она имеет смысл потенциальной энергии частицы в данном силовом поле), то уравнение (1) можно упростить, и оно позволяет получить уравнение, описывающее стационарные состояния частицы (например, стационарные состояния электронов в атоме):

$$\Delta \psi + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U) \psi = 0 - \text{стационарное уравнение Шрёдингера.} \quad (3)$$

где  $\psi(x, y, z)$  — стационарная часть волновой функции,

$E$  — полная энергия частицы в данном силовом поле (в стационарном состоянии полная энергия частицы имеет определённое значение и не изменяется с течением времени),

$U$  — потенциальная энергия частицы в данном силовом поле.

## Понятие о квантовых числах

Из анализа уравнения Шрёдингера для электрона в атоме водорода следует, что физические величины, описывающие его состояние (энергия, импульс, орбитальный момент импульса и собственный момент импульса) могут принимать не любые значения, а лишь строго определённый дискретный набор значений. В этом случае говорят, что они *квантуются*. Оказалось, что для полного описания состояния электрона в атоме необходимо ввести 4 так называемых, *квантовых числа*.

*Квантовыми числами* называется набор чисел, которые однозначно описывают состояние электрона в атоме, молекуле или кристалле.

- **Главное квантовое число  $n$  (Эн)** (совпадает с порядковым номером орбиты электрона, определяет величину полной механической энергии  $E$  электрона в атоме и характеризует размер электронного облака).

Чем больше номер  $n$ , тем больше размер электронного облака.

Энергию электрона в атоме водорода на орбите с номером  $n$  можно определить по формуле:

$$E_n = -\frac{1}{n^2} \frac{m_e e^4}{8\epsilon_0 h^2}, \quad (4)$$

где  $n$  — номер орбиты электрона (он совпадает с главным квантовым числом);  $m_e = 9,1 \cdot 10^{-31}$  кг — масса электрона;

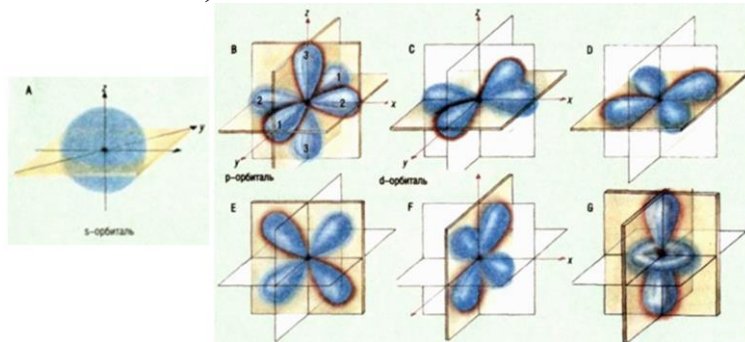
$e = -1,6 \cdot 10^{-19}$  Кл — заряд электрона;

$\varepsilon_0 = 8,85 \cdot 10^{-12} \frac{\Phi}{\text{М}}$  - электрическая постоянная;

$h = 6,62 \cdot 10^{-34} \text{ Дж} \cdot \text{с}$  - постоянная Планка.

Главное квантовое число  $n$  может принимать значения  $n = 1, 2, 3, \dots$

- **Орбитальное квантовое число  $l$  (эль)** (определяет величину орбитального момента импульса  $L$  электрона в атоме и характеризует форму электронного облака).



Этот рисунок можно не рисовать

Величину орбитального момента импульса электрона в атоме можно определить по формуле:

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

где  $L$  - орбитальный момента импульса электрона в атоме,  $\text{Дж} \cdot \text{с}$ ;

$\hbar = 1,05 \cdot 10^{-34} \text{ Дж} \cdot \text{с}$  - постоянная Дирака;

$l$  - орбитальное квантовое число,

Орбитальное квантовое число  $l$  может принимать значения

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

то есть всего  $n$  значений, где  $n$  - главное квантовое число.

- **Магнитное квантовое число  $m$  (эм)** (определяет величину проекции механического орбитального момента импульса  $L_Z$  электрона в атоме на направление внешнего магнитного поля, в котором находится атом (либо внутреннего магнитного поля, создаваемого всеми электронами атома, кроме рассматриваемого) и характеризует ориентацию электронного облака в пространстве).

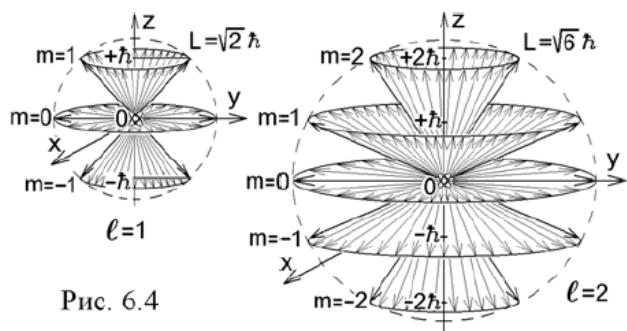


Рис. 6.4

Величину проекции механического орбитального момента импульса  $L_Z$  электрона в атоме на направление внешнего магнитного поля можно определить по формуле:

$$L_Z = m\hbar,$$

Этот рисунок можно не рисовать

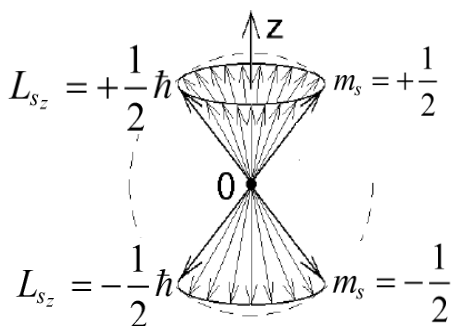
где  $L_Z$  - величина проекции механического орбитального момента импульса  $L_Z$  электрона в атоме на направление внешнего магнитного поля, Дж·с;  
 $m$  - магнитное квантовое число;  
 $\hbar$  - постоянная Дирака.

Магнитное квантовое число  $m$  может принимать значения

$$m = -l, \dots, -1, 0, 1, \dots, l,$$

то есть всего  $2l + 1$  значение, где  $l$  - орбитальное квантовое число.

- **Спиновое квантовое число  $m_s$  (эм эс)** (определяет величину проекции собственного механического момента импульса электрона  $L_{s_z}$  (то есть спина) в атоме на направление внешнего магнитного поля, в котором находится атом.



Величину проекции спина электрона  $L_{s_z}$  в атоме на направление внешнего магнитного поля, в котором находится атом, можно определить по формуле:

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

Этот рисунок можно не рисовать

где для электрона  $m_s$  может принимать только два значения:

$$m_s = +\frac{1}{2} \quad \text{или} \quad m_s = -\frac{1}{2}.$$

### Принцип Паули (1925 г)

(был введён для объяснения периодической системы Д.И. Менделеева)

**Принцип Паули:** В любом атоме не может быть даже двух электронов, находящихся в одинаковых стационарных состояниях, определяемых набором четырёх квантовых чисел:  $n$ ,  $l$ ,  $m$  и  $m_s$ .

(то есть каждый электрон в коллективе себе подобных должен отличаться хотя бы одним квантовым числом от всех остальных)

Принцип Паули позволил:

- теоретически обосновать периодическую систему Менделеева,
- создать квантовую статистику,
- создать современную теорию твёрдых тел (зонную теорию твёрдого тела).