



Частина II

ОСНОВИ КВАНТОВОЇ ФІЗИКИ

Розділ 2.

2.1. Будова атома

2.2. Елементи квантової механіки

Лекції 15-16

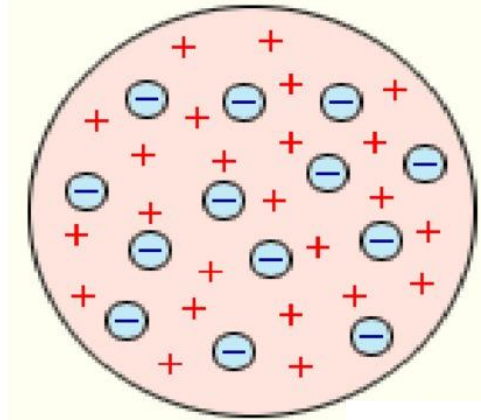
Іванова В.В.

ФТІ НТУУ “КПІ ім. І.Сікорського”

2.1. Будова атома

1. Будова атома за Дж. Томсоном.
Будова атома за Е.
Резерфордом та Н.Бором
2. Постулати Бора. Атом водню за
теорією Бора і пояснення
спектральних закономірностей

Модель атома Томсона



ОПТИКА Л.15. Будова атома

Планетарна модель будови атома (Резерфорд, 1911р.)

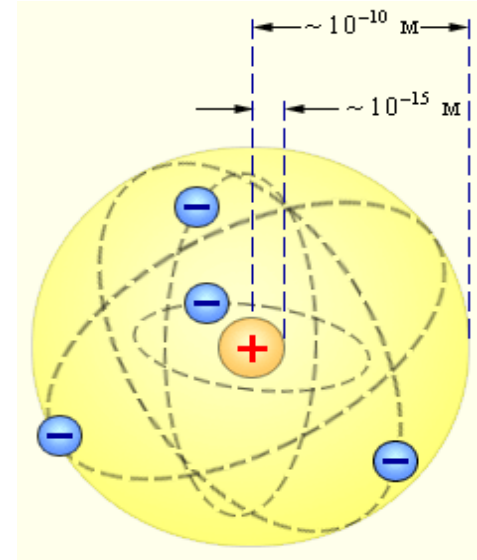
І чверть ХХ ст. : атом складається з ядра і електронної оболонки



Атом має бути прозорим для часток, які його пронизують!

$$m_p = 1836,15m_e$$

$$m_n = 1838,68m_e$$

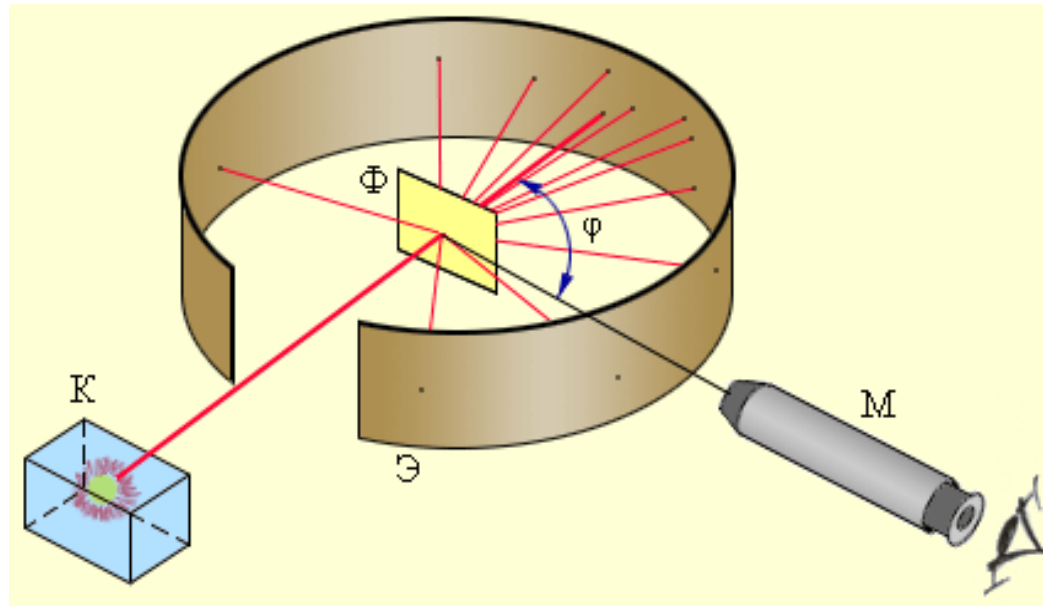


Коментар: 1911 року після проведення дослідів з розсіювання альфа-частинок на атомах Резерфорд на підставі аналізу результатів експерименту (учні Гейгер і Марсден) висунув і обґрунтував планетарну модель будови атома. Відповідно до цієї моделі атом складається з важкого позитивно зарядженого ядра дуже малих розмірів, навколо якого по деяких орбітах рухаються електрони. Назва "планетарна" у такої моделі атома відображає очевидну аналогію атома з Сонячною системою, в якій планети рухаються по деяких певних орбітах навколо масивного центру - Сонця.

Однак, на відміну від планетарної моделі Сонячної системи, планетарна модель атома виявляється внутрішньо суперечливою з точки зору класичної фізики. І це, перш за все, пов'язано з наявністю у електрона заряду.

ОПТИКА Л.15. Будова атома

Досліди Резерфорда по відхиленню α -частинок



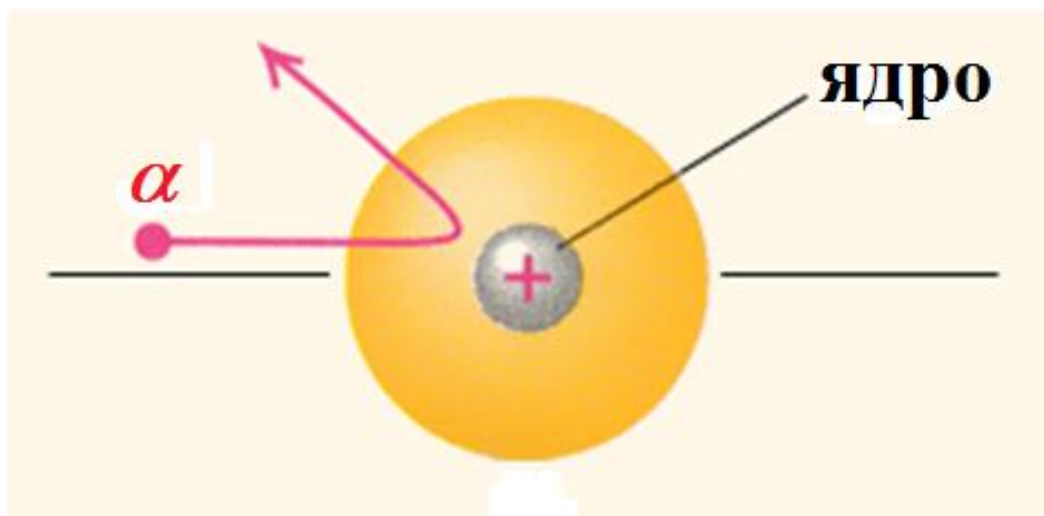
потік α -частинок (${}^4\text{He}^{2+}$) на золоту фольгу товщиною близько 0,1 мкм
швидкість α -частинок $1.6 \cdot 10^7$ м/с

ОПТИКА Л.15. Будова атома

Досліди Резерфорда по відхиленню α -частинок

Висновок:

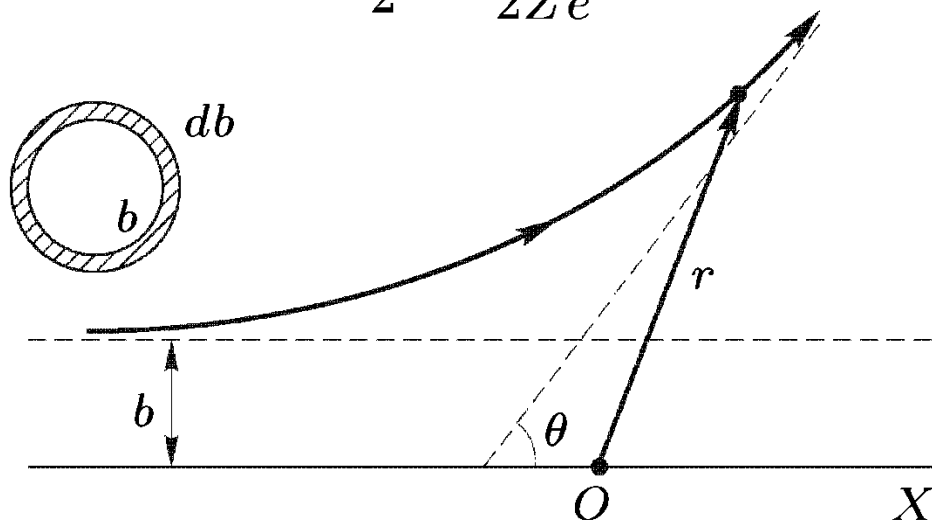
Причиною розсіювання α -частинки є її електрична взаємодія з малою за розміром позитивно зарядженою частинкою атома - ядром



У ядрі зосереджена майже вся маса атома і весь його позитивний заряд!

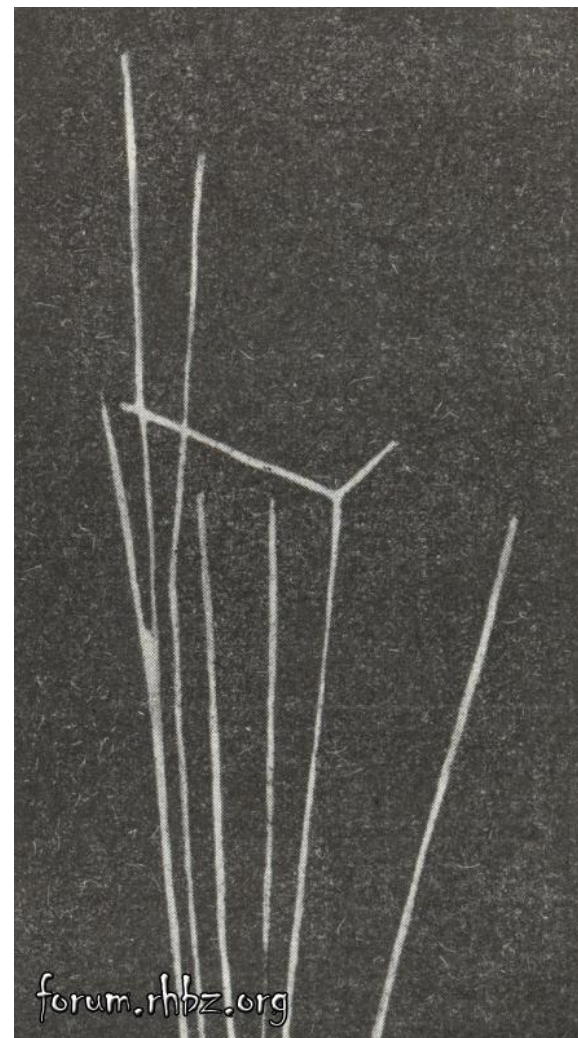
Досліди Резерфорда по відхиленню α -частинок

$$\operatorname{ctg} \frac{\theta}{2} = \frac{mbv^2}{2Ze^2}$$



Формула Резерфорда

$$dN = VnI d\sigma = VnI \left(\frac{Ze^2}{mv^2} \right)^2 \frac{d\Omega}{\sin^4(\theta/2)}$$



Планетарна модель будови атома

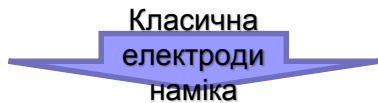
Несумісність планетарної моделі атома з
уявленнями класичної фізики

Резерфорд:

Атом - система заряджених частинок



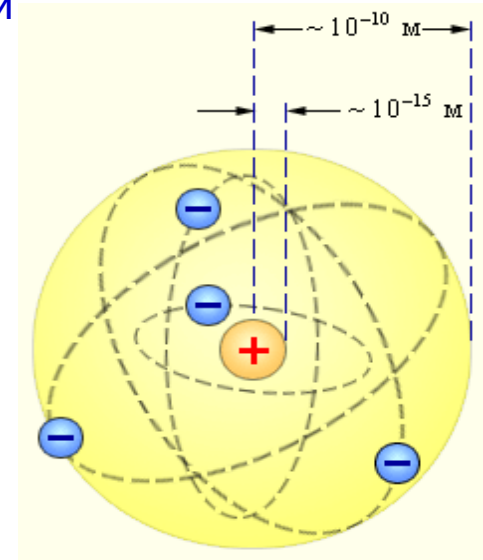
Електрони повинні обертатися навколо ядра



Електрон, який обертається (з доцентровим прискоренням), має випромінювати електромагнітні хвилі безперервно



Втрата енергії

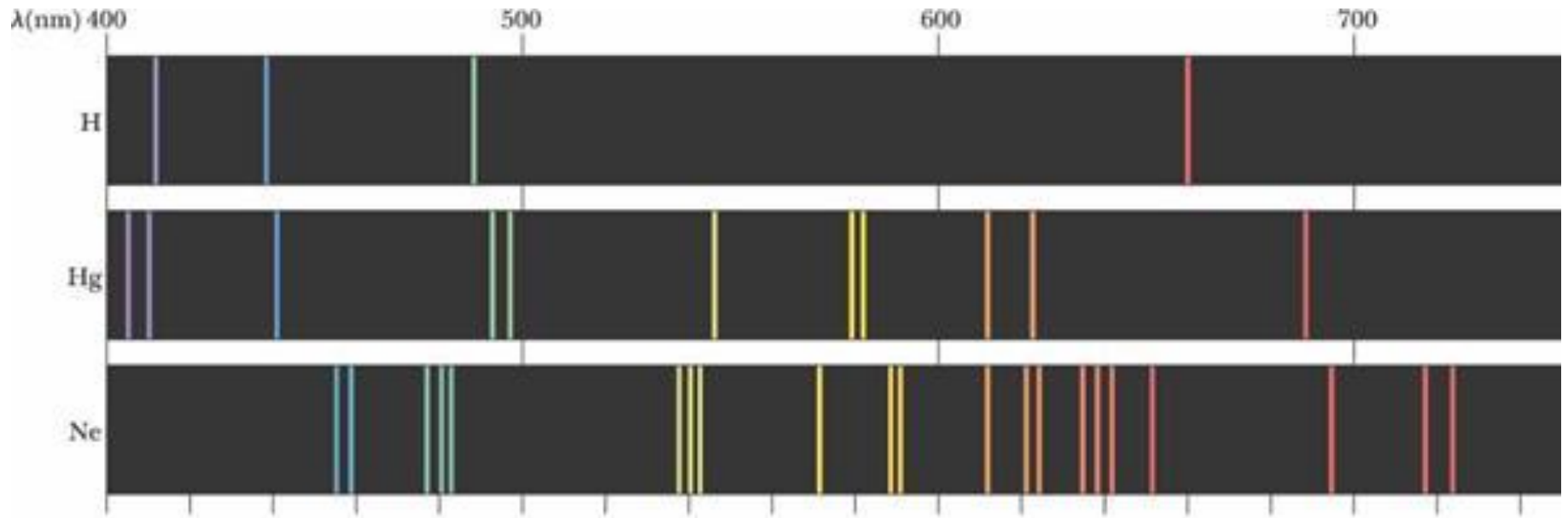


Планетарна модель атома нестійка в класичній фізиці!

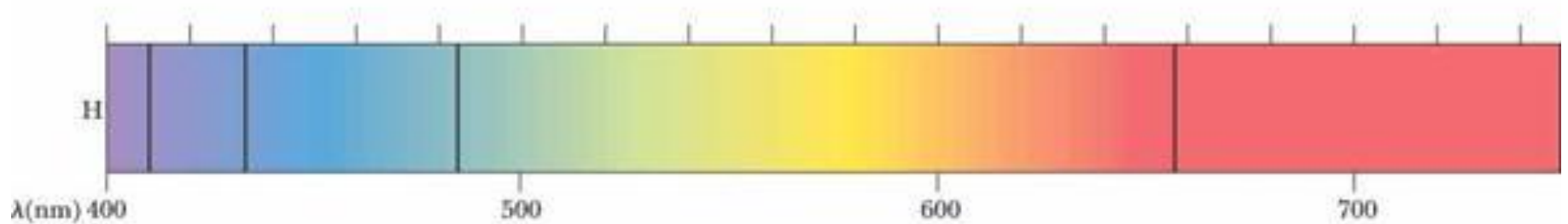
Не пояснює спектральні закономірності випромінювання, підпорядковані комбінаційному принципу Рітца

ОПТИКА Л.15.

Лінійчасті атомарні спектри



(a)



(b)

©2004 Thomson - Brooks/Cole

Воднеподібний атом - це атом з одним зовнішнім електроном: Na, K, Rb, Cs

ОПТИКА Л.15.

Будова атома

Спектральні серії атому водню

Й. Бальмер 1885 р.

$$\lambda = 3645,6 \frac{n^2}{n^2 - m^2} \text{ \AA}$$

$$m=2, n=3,4,5,6$$

К. Рунге 1888 р.

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

$$R = 3,3 \cdot 10^{15} \text{ Гц}$$

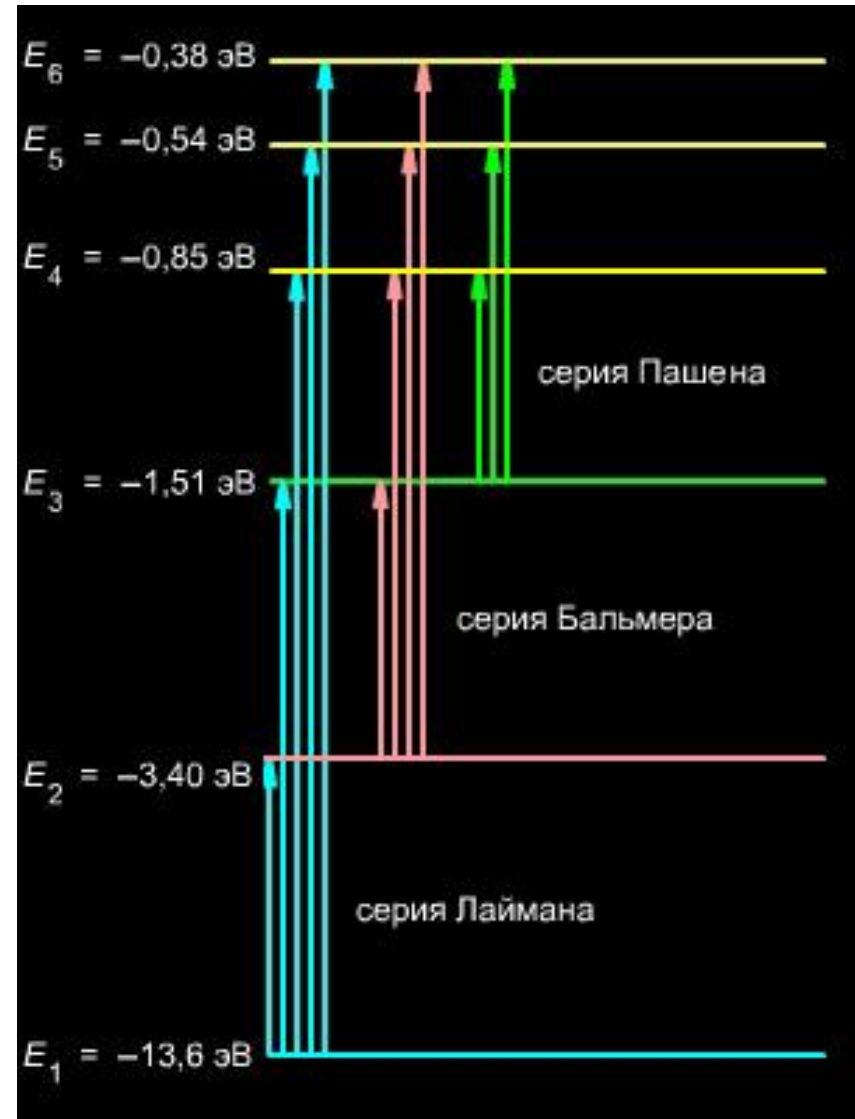
$$\nu = R_y \left(\frac{1}{1^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad n = 2, 3, 4, \dots, \text{ Лайман, 1906 г.,}$$

$$\nu = R_y \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad n = 3, 4, 5, \dots, \text{ Бальмер, 1885 г.,}$$

$$\nu = R_y \left(\frac{1}{3^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad n = 4, 5, 6, \dots, \text{ Пашен, 1908 г.,}$$

$$\nu = R_y \left(\frac{1}{4^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad n = 5, 6, 7, \dots, \text{ Брэккет, 1922 г.,}$$

$$\nu = R_y \left(\frac{1}{5^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad n = 6, 7, 8, \dots, \text{ Пфунд, 1924 г.}$$



ОПТИКА Л.15. Будова атома

Спектральні серії атому водню

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

$R = 3,3 \cdot 10^{15}$ Гц - частотна стала Рідберга

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

$R' = 1,1 \cdot 10^7$ м⁻¹ - хвильова стала Рідберга



Комбінаційний принцип Рітца (1908 р.)

$$\bar{\nu} = \frac{1}{\lambda} = T_m - T_n$$

Будова атома

Приклад

1. Знайти спектральний інтервал, в якому розташовані спектральні лінії серії Бальмера

нм – нм

2. Знайти високочастотну границю для серії Лаймана

$$R=109678,76 \text{ см}^{-1}$$

ОПТИКА Л.15.

Будова атома

Постулати Бора

Досліди Франка і Герца

Нільс Бор (1913 р.)

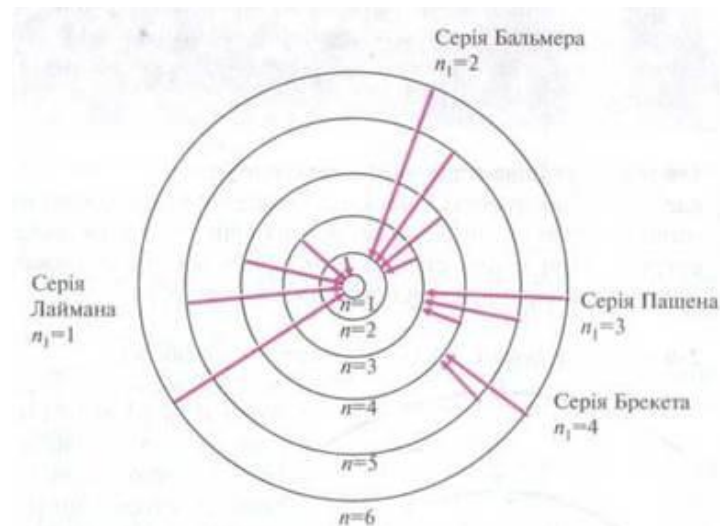
- **Перший постулат Бора (постулат стаціонарних станів)**

Атом може згаходитись не у всіх станах, які допускає класична механіка, а тільки в деяких вибраних (квантових) станах, які характеризуються певними дискретними значеннями енергії. В цих станах атом не випромінює. Тому вони називаються стаціонарними

- **Другий постулат Бора (правило частот)**

При переході атома з одного стаціонарного стану з енергією E_n в інше з енергією E_m випромінюється або поглинається квант, енергія якого дорівнює різниці енергій цих станів

$$h\nu = E_n - E_m$$



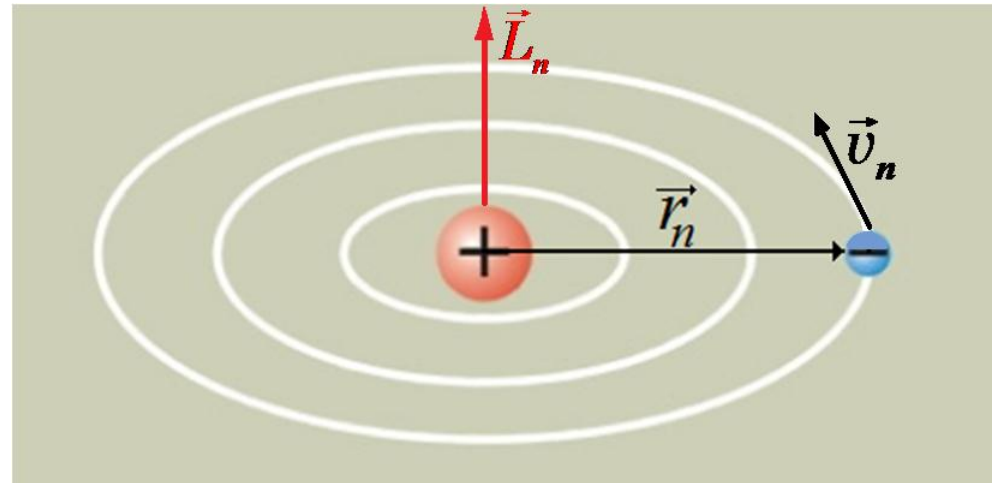
Будова атома

Постулати Бора

Стаціонарними можуть бути тільки ті орбіти електрона, для яких **значення моменту імпульсу квантовані**

$$m v_n r_n = n \hbar$$

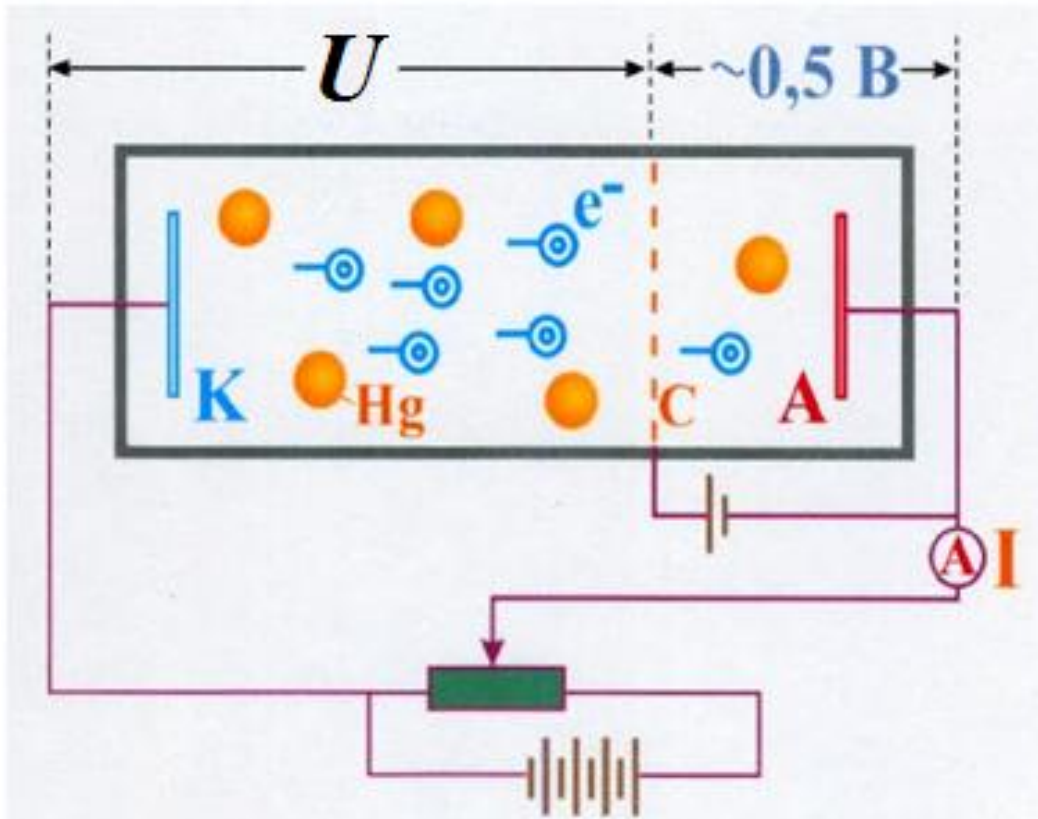
$$L_n = m v_n r_n$$



ОПТИКА Л.15. Будова атома

Постулати Бора Досліди Франка і Герца

Пропускання електронного пучка через пари ртуті

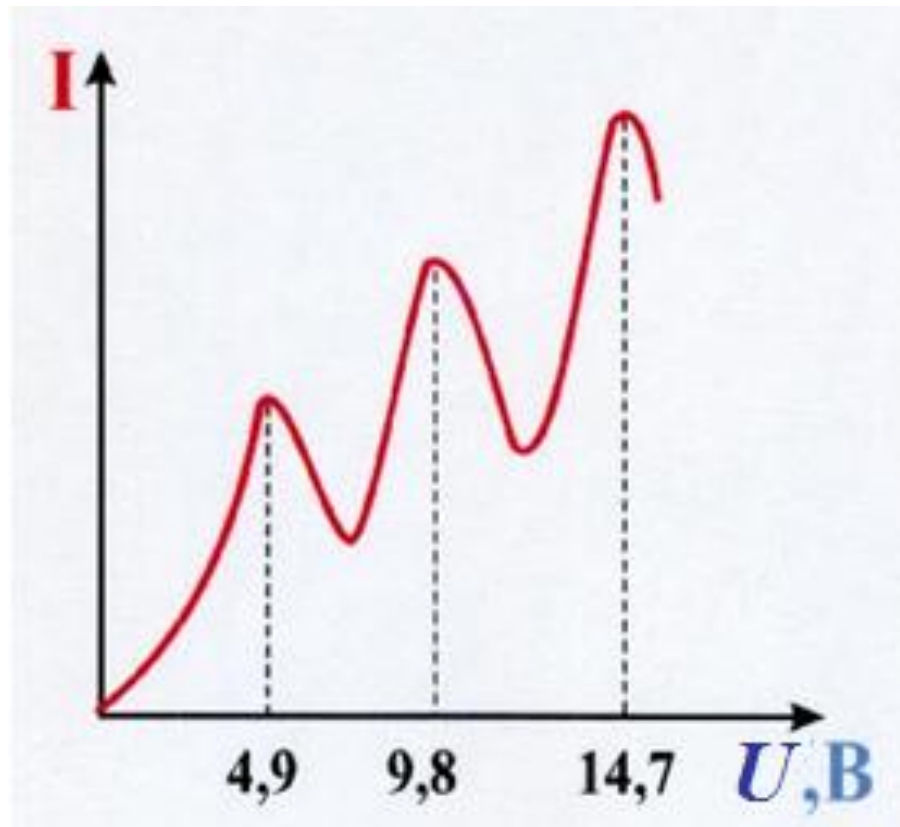


Експеримент, поставлений у 1913-1914 роках Джеймсом Франком та Густавом Людвігом Герцом, з непружного розсіяння електронів на атомах.

Електрони з катоду К, прискорюються в електричному полі, створеному між катодом і анодом А. Між катодом і сіткою С підтримується невелика напруга ($\sim 0,5\text{В}$), яка затримує «ослаблі» електрони на шляху до анода.

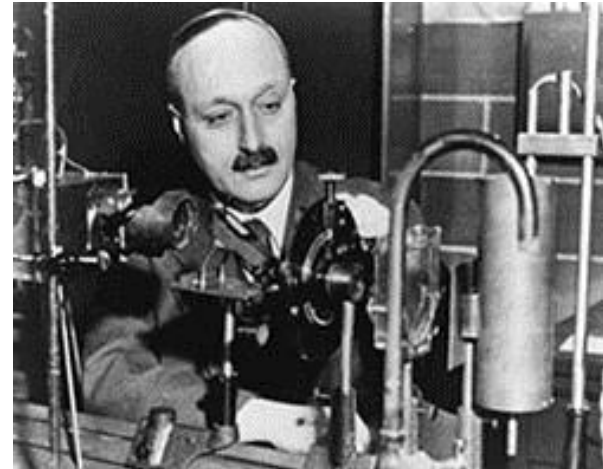
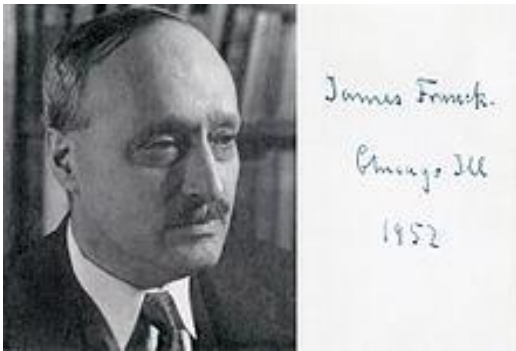
Будова атома

Постулати Бора
Досліди Франка і Герца



Будова атома

Постулати Бора
Досліди Франка і Герца



Дослід Франка - Герца показав, що спектр енергії, який поглинається атомом, дискретний. Мінімальна порція, яку може поглинути атом ртуті Hg, дорівнює 4,9 еВ

Франк і Герц були нагороджені Нобелівською премією з фізики за 1925 рік

Будова атома

Модель атома Бора

На електрон діє кулонівська сила. За 2-м законом Ньютона

$$m\vec{a} = \vec{F}_k$$

$$m \frac{v^2}{r} = k \frac{Ze \cdot e}{r^2} \quad m v_n r_n = n \hbar$$

$$r_n = \frac{\hbar^2}{kZe^2 m} n^2 \quad Z - \text{заряд ядра} \quad k = \frac{1}{4\pi\epsilon_0}$$

Радіус найближчої до ядра орбіти називають першим борівським радіусом

$$a_B = r_1 = \frac{\hbar^2}{kZe^2 m} = 52,8 \text{ пм}$$

Повна енергія електрона в атомі:

$$W_n = -\frac{k^2 e^4 m}{2\hbar^2} \cdot \frac{Z^2}{n^2}$$

$$W_1 = -13,55 \text{ эВ}$$

Будова атома

Переваги і недоліки теорії Бора

Переваги:

1. Пояснила лінійчатий спектр атомів
2. Передбачила значення частот
3. Правильно визначила розміри атома водню
4. Розрахувала сталу Рідберга

Недоліки:

1. Для пояснення квантових явищ використовувала не тільки квантову, а й класичну фізику (непослідовна)
2. Не змогла розрахувати інтенсивність спектра випромінювання
3. Не дає пояснень причин переходу між рівнями енергії
4. Не вірна для багатоелектронних атомів (He, тощо)

Сам Бор розглядав свою теорію як проміжний етап в пошуках правильної теорії

2.2. Основи квантової механіки

1. Формула Луї Де Бройля
2. Дослідне обґрунтування корпускулярно-хвильового дуалізму властивостей речовини
3. Хвильова функція та її статистичний зміст
4. Загальне рівняння Шредінгера
5. Співвідношення невизначеностей Гайзенберга

Створення квантової теорії
1925 – 1928 р.р.

1. Формула Луї Де Бройля

У 1924 р. французький фізик Луї де Бройль, виходячи з корпускулярно-хвильової природи світла, висунув гіпотезу про існування аналогії між властивостями світла і частинок речовини. Будь-якій **частинці** речовини масою m , яка рухається зі швидкістю v , можна зіставити **хвильовий процес**, для якого енергія і імпульс збігаються з відповідними значеннями для рухомої частинки згідно з теорією відносності

$$\epsilon = mc^2, \quad \vec{p} = m\vec{v}, \quad \text{де } m = m_0 / \sqrt{1 - v^2 / c^2} \rightarrow mc^2 = h\nu,$$

$$\epsilon = h\nu, \quad \vec{p} = \hbar\vec{k}, \quad \text{звідки } \lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{m\nu}, \quad p = m\nu = \frac{h}{\lambda}.$$

Фазова швидкість $v_\phi = \frac{2\pi\nu}{2\pi/\lambda} = \nu\lambda = \frac{h\nu\lambda}{h} = \frac{\epsilon}{p} = \frac{mc^2}{m\nu} = \frac{c^2}{v}$

$$v < c \rightarrow v_\phi > c$$

Групова швидкість $u = \frac{d\omega}{dk} = \frac{d(2\pi\nu h)}{d(2\pi h/\lambda)} = \frac{d\epsilon}{dp}$

$$\epsilon = \frac{p^2}{2m}, \quad \text{то } \frac{d\epsilon}{dp} = \frac{p}{m} = \frac{m\nu}{m} = v$$

$$u = v$$

$$\epsilon = (p^2 c^2 + m_0^2 c^4)^{1/2}.$$



Луї Віктор П'єр Раймон, 7-й герцог Брольї, відомий як **Луї де Бройль** (1892—1987) — французький фізик, лауреат Нобелівської премії з фізики. Один з засновників квантової механіки

Формула Луї Де Бройля

$$\lambda = \frac{h}{mv}$$

Наприклад, для частинки масою 10^{-3} кг, яка летить зі швидкістю $1,12 \cdot 10^4$ м/с, довжина хвилі де Бройля становити

$$\lambda = \frac{h}{mv} = \frac{6,63 \cdot 10^{-34}}{10^{-3} \cdot 1,12 \cdot 10^4} \approx 6 \cdot 10^{-35} \text{ (м)}.$$

Жоден прилад не здатний зареєструвати настільки малу довжину хвилі (нині можна виміряти відстань порядку не менше 10^{-18} м).

Однак з часом існування хвиль де Бройля було підтверджено експериментальне за дифракцією електронних, протонних, нейтронних та інших пучків частинок.

ОПТИКА Л.16.

Основи квантової механіки

Хвиля де Бройля $\psi = \psi(x, t)$

$$\psi(x, t) \sim e^{i(kx - \omega t)}$$

Експериментально хвильові властивості мікрочастинок уперше виявили в досліджах з дифракції електронів на кристалах у 1927 році

К. Девіссон і Л.Джермер у Нью-Йорку та **Г. П. Томсон** в Абердіні (Шотландія)

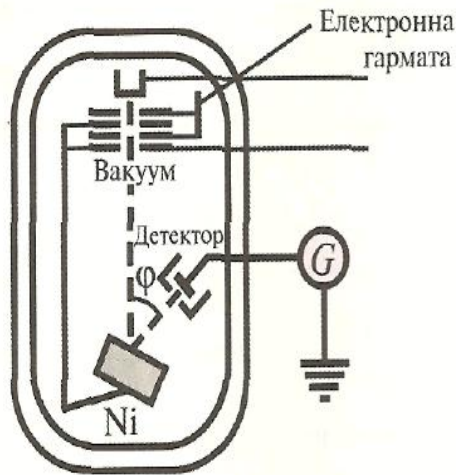
*Нобелівська премія 1933 року за відкриття нових форм атомної теорії була присуджена **Е.Шрединґерові та П. А. М. Діракові***

***М. Борн** - Нобелівська премія 1954 року за роботи з квантової механіки*

***К. Девіссон і Г. П. Томсон** поділили Нобелівську премію 1937 року за відкриття дифракції електронів*

2. Дослідне обґрунтування корпускулярно-хвильового дуалізму властивостей речовини

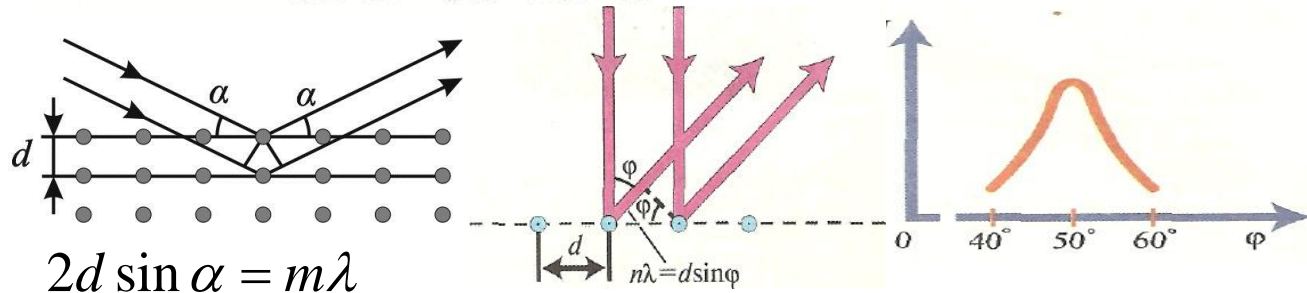
Дифракція електронів. Класична фізика розглядає електрони, протони і нейтрони як дуже малі частинки речовини. Рух електронів і протонів в електромагнітних полях у лабораторних умовах узгоджується з розрахунками за формулами класичної механіки для руху точкового заряду. Однак проведені досліді щодо взаємодії електронів з атомами засвідчили, що в цих умовах до електронів не можна застосовувати закони класичної механіки.



Довжина хвилі де Бройля електрона, кінетична енергія якого дорівнює 54 еВ:

$$\lambda = \frac{h}{mv} = \frac{h}{(2mE_k)^{1/2}} = \frac{6,63 \cdot 10^{-34}}{(2 \cdot 9,11 \cdot 10^{-31} \cdot 54 \cdot 1,6 \cdot 10^{-19})^{1/2}} = 1,67 \cdot 10^{-10} \text{ (м)} = 1,67 \text{ \AA}$$

довжина хвилі де Бройля електрона має такий самий порядок, як і значення міжатомної відстані в кристалі нікелю



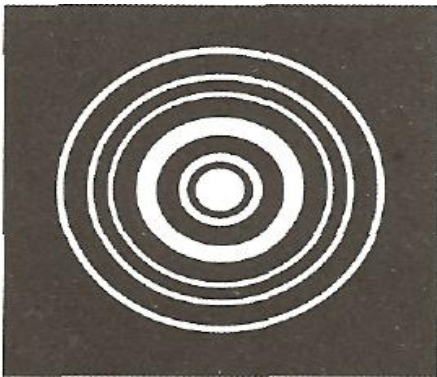
Досліді американських фізиків **К.Д.Девіссона і Л.Х.Джермера (1927р.)** з відбивання електронів від металевих поверхонь

Дифракція електронів на кристалічній ґратці нікелю

2. Дослідне обґрунтування корпускулярно-хвильового дуалізму властивостей речовини

Дифракція електронів. Максимуми інтерференції хвиль, розсіяних різними рядами атомів, спостерігаються за умови дотримання співвідношення Вульфа—Брегга: $2d \sin \alpha = m\lambda$

Картина зміщувалась при увімкненні магнітного поля: електрони, а не вторинні рентгенівські промені



Електроннограма тонкого шару золота. Результати проведених дослідів повністю відповідають формулі довжини хвилі де Бройля (П.О.Тартаковський і Д. П. Томсон)

Фундаментальний закон природи - корпускулярно-хвильовий дуалізм.

Будь-якому мікрооб'єкту притаманні властивості як частинки, так і хвильового поля. Енергія мікрооб'єкта пропорційна частоті його хвилі, а імпульс — хвильовому вектору. Обидва коефіцієнти пропорційності однакові, не залежать від природи мікрооб'єкта і дорівнюють сталій Планка:

$$\varepsilon = h\nu = \hbar\omega \quad \vec{p} = \frac{\hbar n_0}{\lambda} = \hbar\vec{k},$$

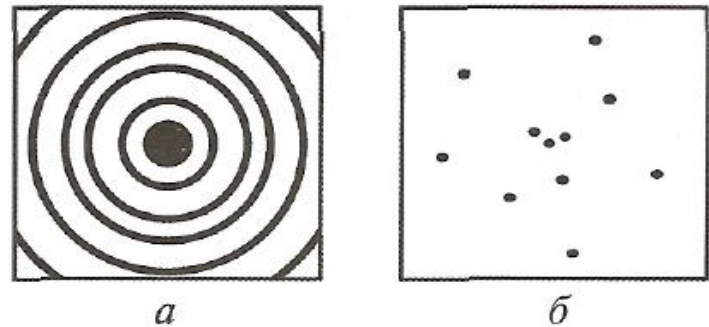
2. Дослідне обґрунтування корпускулярно-хвильового дуалізму властивостей речовини

За яких умов виявляються хвильові властивості електронів — коли пучок містить велике число електронів, що рухаються, чи коли рухаються окремі електрони?

Для з'ясування цього питання радянські фізики **Л.М.Біберман**, **Н.Г.Сушкін** і **В.О.Фабрикант** пропускали крізь розсіювач пучок електронів **дуже малої інтенсивності** і реєстрували одержану картину. В результаті дослідів виявлено, що окремі електрони потрапляють у різні точки фотопластинки

Найбільше число їх виявляється в тих місцях, які відповідали дифракційним максимумам у досліді з інтенсивними пучками електронів. Після того як на пластинку попадало велике число електронів, хоча вони проходили один за одним через значні проміжки часу, на фотопластинці виникала повна система дифракційних кілець.

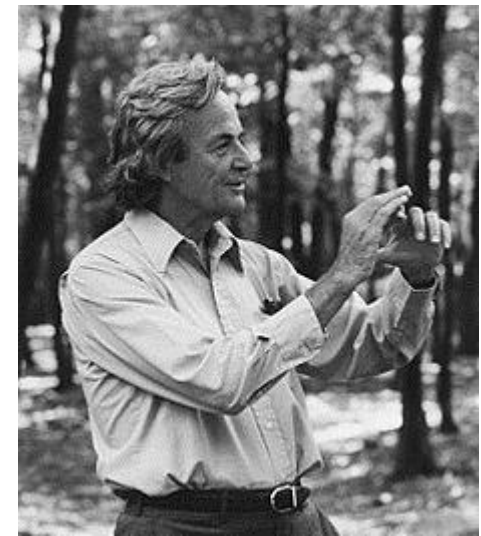
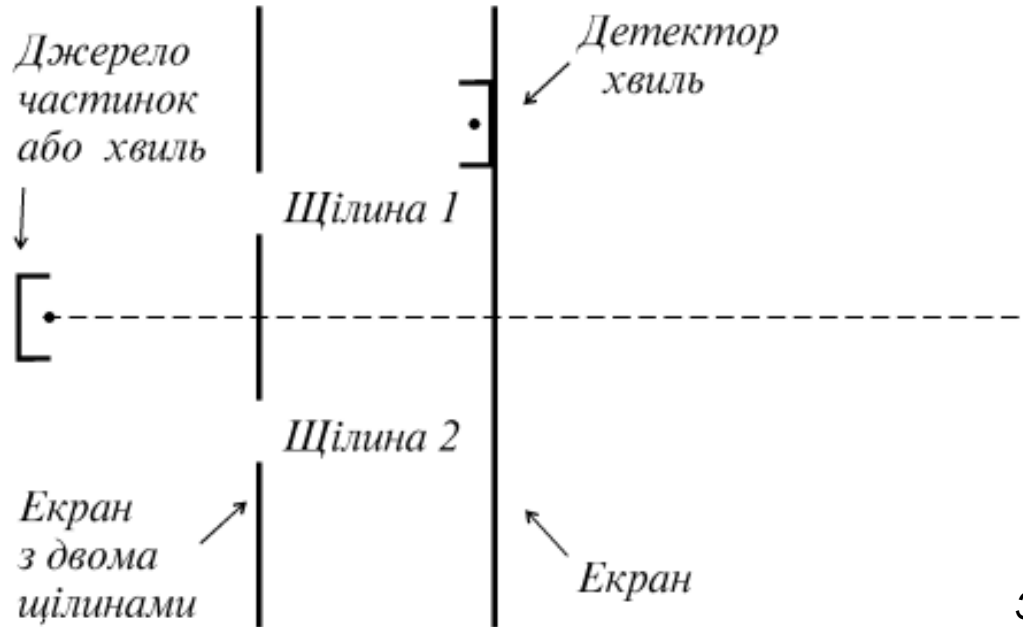
За результатами цих дослідів можна дійти висновків: а) хвильові властивості виявляються за руху окремих електронів; б) заздалегідь не можна передбачити, в яке місце потрапить окремий електрон. Це приводить до ймовірнісного тлумачення значення електронної хвилі.



Основи квантової механіки

3. Хвильова функція та її статистичний зміст

Експериментальна установка для дослідження розсіяння хвиль і частинок на двох щілинах



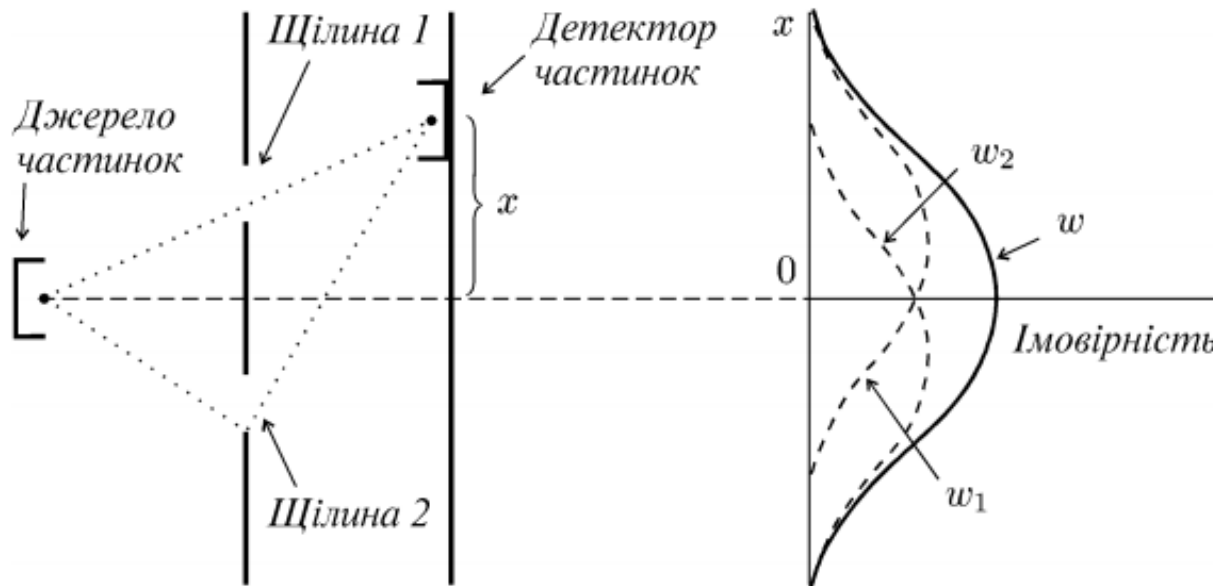
Richard Phillips Feynman
(11.05.1918 – 15 .02.1988)

За фундаментальний внесок у квантову електродинаміку, що має важливе значення для фізики елементарних частинок, **Р. Фейнманові** разом з **С. Томонаґою** та **Ю.Швінгером** присуджено **Нобелівську премію** за 1965 рік.

Основи квантової механіки

3. Хвильова функція та її статистичний зміст

«Дитячий більярд» - експеримент із розсіяння класичних частинок



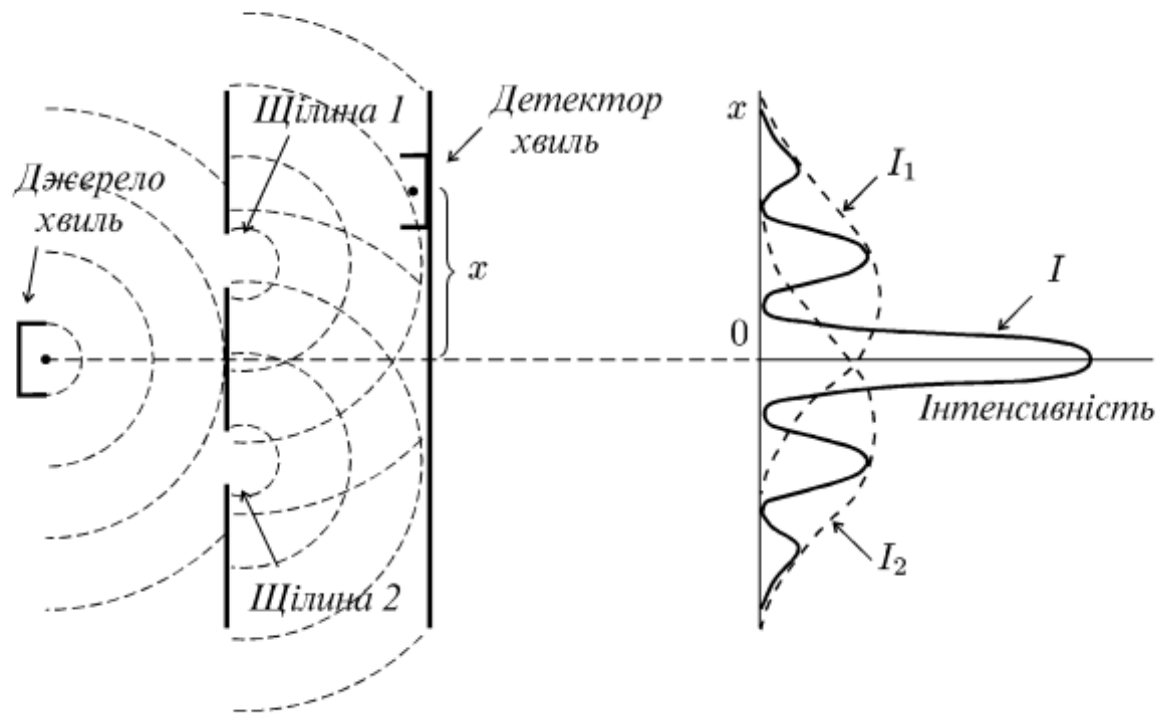
повна ймовірність
при відкритих обох
щілинах:

$$w(x) = w_1(x) + w_2(x).$$

Основи квантової механіки

3. Хвильова функція та її статистичний зміст

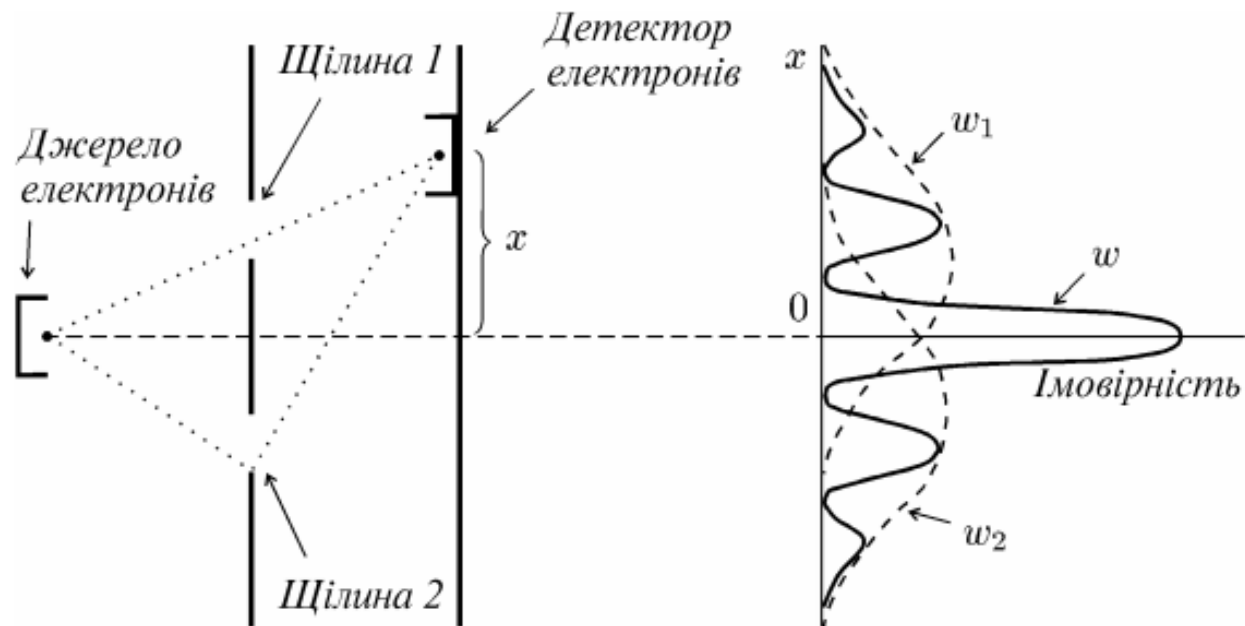
Дифракція хвиль на двох щілинах



$$\begin{aligned}
 I &= |A|^2 = |A_1 + A_2|^2 = |A_1|^2 + |A_2|^2 + 2|A_1||A_2| \cos \delta \\
 &= I_1 + I_2 + 2\sqrt{I_1 I_2} \cos \delta.
 \end{aligned}$$

3. Хвильова функція та її статистичний зміст

Дифракція електронів на двох щілинах



$$|\psi|^2 = |\psi_1|^2 + |\psi_2|^2 + 2|\psi_1||\psi_2| \cos \delta,$$

$$w = |\psi|^2 \quad \psi = \psi_1 + \psi_2.$$

3. Хвильова функція та її статистичний зміст

Трактування М. Борна фізичного змісту хвиль де Бройля (1926 р.)

Статистична інтерпретація: «хвилі де Бройля – хвилі ймовірностей»

Замість класичного закону додавання ймовірностей – закон додавання амплітуд ймовірностей:

$$\psi = \psi_1 + \psi_2.$$

$$|\psi|^2 = |\psi_1|^2 + |\psi_2|^2 + 2|\psi_1||\psi_2| \cos \delta,$$

$$w = |\psi|^2$$

$$\delta = \delta_1 - \delta_2 \quad \text{- різниця фаз}$$

$$\psi_1 = |\psi_1|e^{i\delta_1} \quad \text{амплітуд}$$

ймовірностей

$$\psi_2 = |\psi_2|e^{i\delta_2}$$

Квантовомеханічний

закон додавання ймовірностей: $w = w_1 + w_2 + 2\sqrt{w_1 w_2} \cos \delta.$

$$dP = |\Psi|^2 dV = \Psi\Psi^* dV \quad \text{- ймовірність знаходження частинки в межах об'єму } dV$$

Умова нормування $\int_V |\Psi|^2 dV = 1.$ $w = |\psi|^2$ - густина ймовірності

$\psi(\vec{r}, t)$ - хвильова функція

3. Хвильова функція та її статистичний зміст

В квантовій механіці положення частинки задається тільки розподілом імовірності, що визначається видом функції ψ . Однозначно описати рух частинки неможливо, тобто не можна вказати, по якій траєкторії рухатиметься електрон, можна тільки визначити ймовірність знаходження електрона в певному місці простору в даний момент часу.

“Господь Бог не грає в кості” — вислів А. Ейнштейна - передає зміст так званої теорії схованих параметрів.

Відповідь Н. Бора на вислів А. Ейнштейна в цьому контексті:

“Не наша журба — приписувати Богу, як йому слід керувати цим світом”.

4. Рівняння Шредингера

Хвиля де Бройля $\psi = \psi(x, t)$ повинна задовольняти хвильове рівняння

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} - \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} = 0,$$

($\omega = kv$, v — фазова швидкість), одночасно задовольняючи співвідношення для енергії $E = \hbar\omega$ та імпульсу $p = \hbar k$ частинки

З урахуванням виразу для повної енергії частинки $E = \frac{p^2}{2m} + U(x)$,

де $U(x)$ — потенціальна енергія частинки, Шрединґер записав (1926р.)

основне рівняння квантової теорії - рівняння Шрединґера

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + U(x)\psi \quad (\text{одновимірне})$$

$$i\hbar \frac{d\psi(\vec{r}, t)}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(\vec{r}, t) + U(\vec{r}) \cdot \psi(\vec{r}, t)$$

4. Рівняння Шредінгера

Стационарне рівняння Шредінгера



$$\psi(\vec{r}, t) = \psi(\vec{r}) e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$$

$$i\hbar \frac{d\psi(\vec{r}, t)}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(\vec{r}, t) + U(\vec{r}) \cdot \psi(\vec{r}, t)$$



$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(\vec{r})\right) \psi(\vec{r}) = E \psi(\vec{r})$$

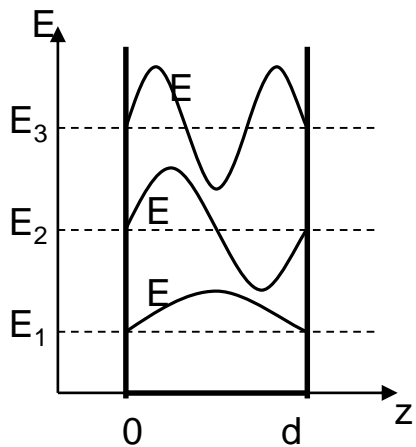
$$\hat{H} \psi(\vec{r}) = E \psi(\vec{r})$$

*Erwin Rudolf Josef Bastida
Alexander Schrödinger
(1887-1961)
австрійський фізик-
теоретик*

Нобелівська премія з фізики 1933 р.
«за відкриття нових плідних форм атомної теорії»

4. Приклади застосування рівняння Шредінґера

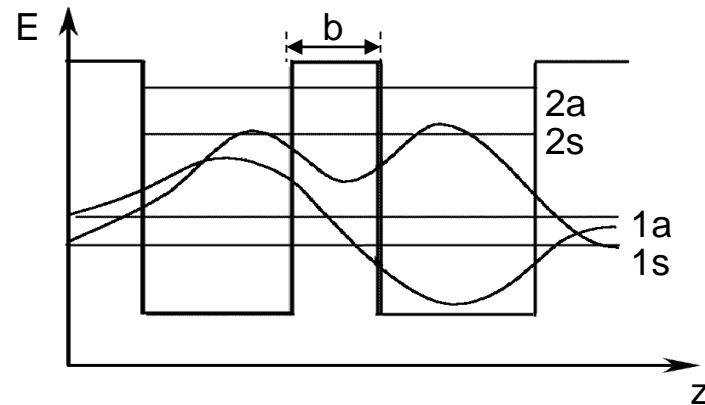
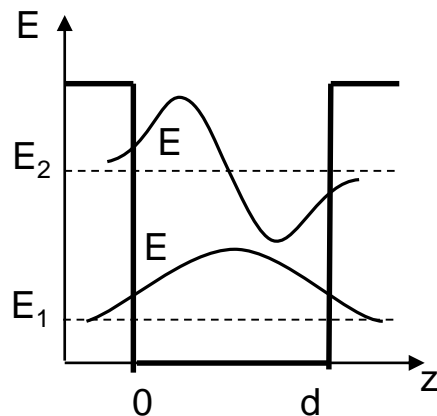
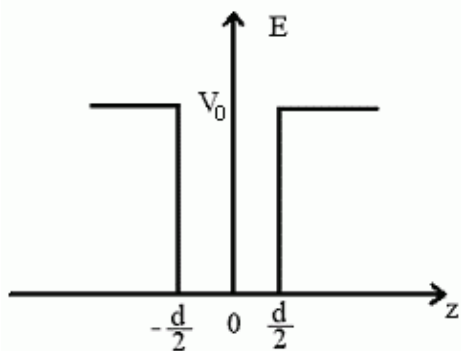
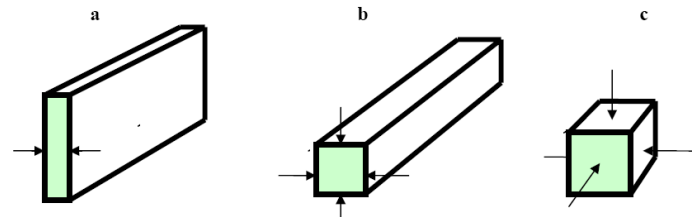
Електрон в потенціальній ямі



$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m^* \cdot d^2} n^2, \quad n \in \mathbb{N}$$

$$\Psi_g = \sqrt{\frac{2}{d}} \cos\left(\pi \frac{z}{d} n\right), \quad n = 2K + 1, K \in \mathbb{N}$$

$$\Psi_h = \sqrt{\frac{2}{d}} \sin\left(\pi \frac{z}{d} n\right), \quad n = 2K, K \in \mathbb{N}$$



2.2. Основи квантової механіки

5. Принцип невизначеності Гайзенберга. Співвідношення невизначеностей

Співвідношення невизначеностей

(характеризує межі застосування уявлень класичної механіки в мікросвіті)

Координата-імпульс $\Delta x \Delta p_x \geq \hbar$, $\Delta y \Delta p_y \geq \hbar$, $\Delta z \Delta p_z \geq \hbar$;
Гайзенберг (1927 р.)

Енергія-час $\Delta E \Delta t \geq \hbar$

$$\langle (\widehat{\Delta x})^2 \rangle \langle (\widehat{\Delta p})^2 \rangle \geq \frac{\hbar^2}{4}$$