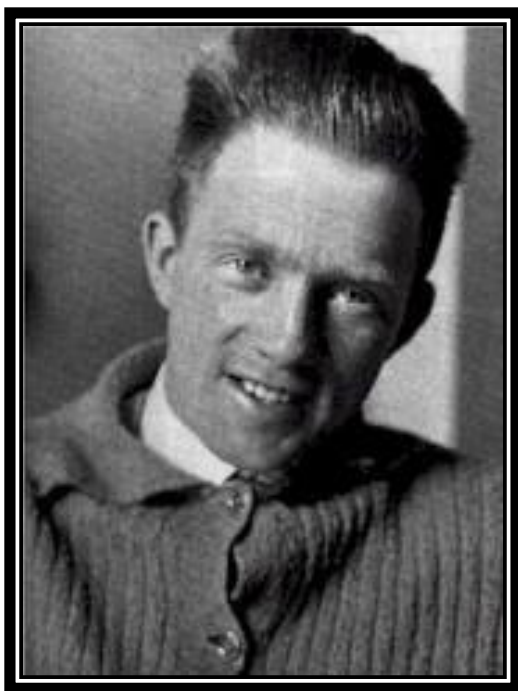


*Принцип  
неопределённости  
Гейзенберга (1927г).*



*Гейзенберг, Вернер Карл  
(1901-1976)*

# Оптика:

При каких то условиях свет в однородной среде распространяется в виде прямолинейных лучей



Можно говорить о фотонах (частицах), движущихся по прямолинейным траекториям.

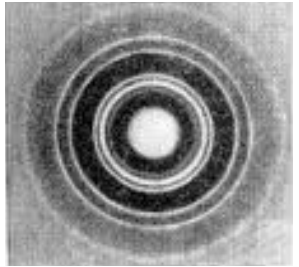
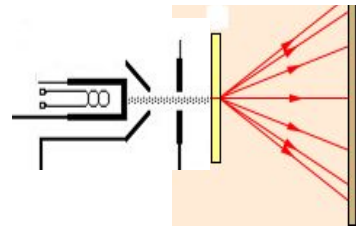
При других условиях наблюдается дифракция, т.е. существенно непрямолинейное распространение света, которое описывается, исходя из волновых представлений.



Понятие о траектории фотона здесь неадекватно.

# Микрочастицы вещества

Обладают волновыми свойствами: дают такие же дифракционные картины, как и рентгеновские лучи.



Следует ожидать, что при определённых условиях понятия о положении в пространстве и траектории неприменимы к описанию движения микрочастиц.

# Принцип неопределённости Гейзенберга

Степень точности, с которой к частице может быть применено представление об её определённом положении в пространстве



Соотношение неопределённости Гейзенберга

Частица не может иметь одновременно точного значения координаты  $x$  и проекции импульса на направление  $x$ .



$$\Delta p_x \Delta x \geq \frac{\hbar}{2}$$



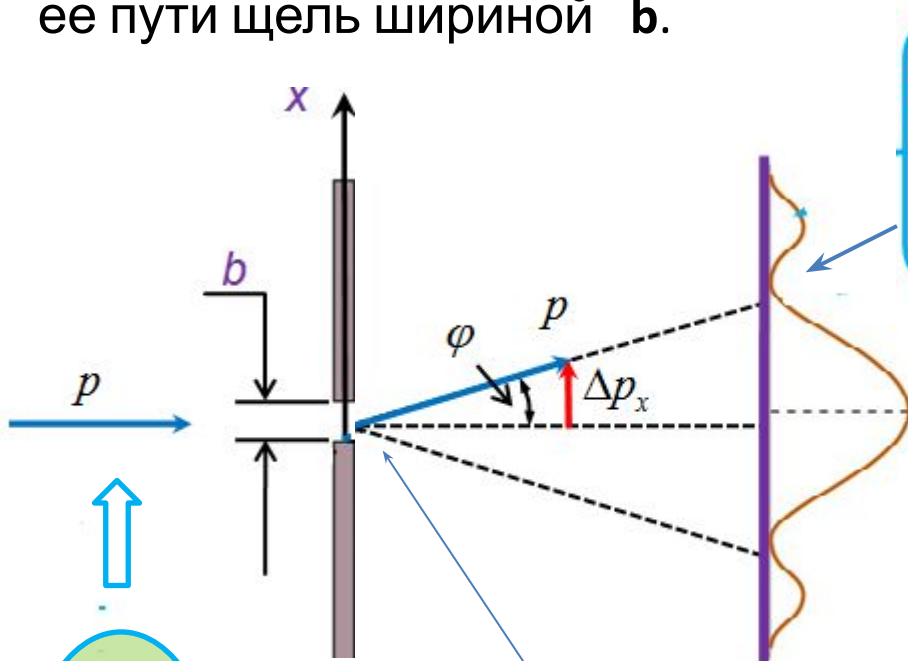
степень неточности

Соотношения неопределённости Гейзенберга

$$\Delta p_x \Delta x \geq \frac{\hbar}{2}, \quad \Delta p_y \Delta y \geq \frac{\hbar}{2}, \quad \Delta p_z \Delta z \geq \frac{\hbar}{2}$$

**Пример.** Определим значение координаты  $x$  свободно летящей микрочастицы, поставив на ее пути щель шириной  $b$ .

При прохождении щели появляется составляющая  $p_x$ . Её величина лежит в пределах  $\Delta p_x$ , определяемых шириной дифракционного максимума.



Первый дифракционный минимум  
 $b \sin \varphi = \lambda$

$$\lambda = \frac{h}{p}, \quad b = \Delta x$$

$$b \cdot \sin \varphi = \lambda \quad \longrightarrow \quad \Delta x \cdot \sin \varphi = \frac{h}{p}$$

$$p \sin \varphi = \Delta p_x$$

$$\Delta x \cdot p \sin \varphi = h \quad \underline{\Delta x \cdot \Delta p_x = h}$$

$p_x = 0$   
 $\Delta p_x = 0$   
 $\Delta x = \infty$

«Локализация» частицы путем сужения щели

$\Delta x \rightarrow 0$   
 $\Delta p_x \rightarrow \infty$

«Расползание» дифракционной картины

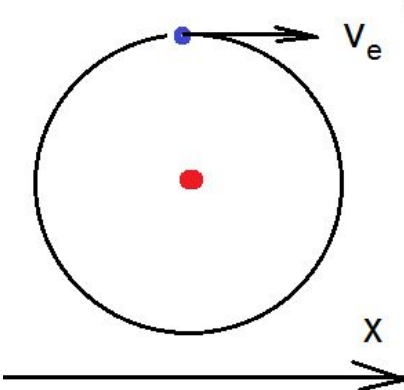
Определенность импульса может быть сохранена путем полной неопределенности координаты (отсутствии преграды со щелью)

$$\Delta p_x \rightarrow 0$$

$$\Delta x \rightarrow \infty$$

Соотношение неопределенности указывает, насколько корректно применять классическую механику к объектам микромира

Пример. Электрон в модели атома водорода Бора.



**Атом H , Z=1**  
 $r_1 = 0.53 \cdot 10^{-10} \text{ м} = 0.53 \text{ \AA}$   
 $v_1 = 2 \cdot 10^6 \text{ м/сек}$

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}$$



$$\Delta x \geq \frac{\hbar}{2\Delta p_x} = \frac{\hbar}{2m\Delta v_x}$$

$$\Delta v_x \approx 0.5v_x$$

$$v_x = 2 \cdot 10^6 \frac{\text{м}}{\text{сек}}$$

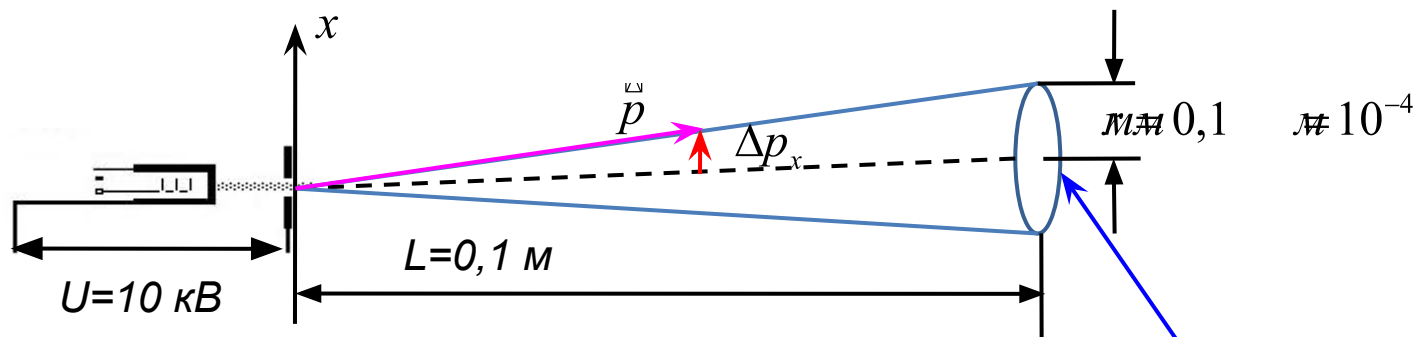
$$\Delta x = \frac{\hbar}{m v_x} = \frac{6.6 \cdot 10^{-34}}{9.1 \cdot 10^{-31} \cdot 2\pi \cdot 2 \cdot 10^6} \approx 0.5 \cdot 10^{-10} \frac{\text{м}}{\text{сек}} = 0.5 \text{ \AA}$$

$\Delta x \geq 0.5 \text{ \AA}$

Неопределенность координаты масштаба линейных размеров самого атома. **Понятие круговой орбиты в атоме Бора теряет смысл!**  
 Применение классической механики (Бор) – некорректно.

## Пример. Движение электрона в электронно-лучевой трубке

Пятно, которое даёт электронный луч на экране, должно восприниматься глазом. Соответственно, его радиус не должен быть меньше  $\approx 0.1$  мм. Пусть этот размер пятна полностью определяется неопределённостью импульса.



$$1. \Delta x \geq \frac{\hbar}{2\Delta p_x}$$

$$2. \frac{\Delta p_x}{p} = \frac{r}{L}$$

$$3. eU = \frac{mv^2}{2} = \frac{p^2}{2m}$$

$$\Delta x \geq \frac{\hbar}{2\Delta p_x} = \frac{\hbar L}{2pr} = \frac{\hbar L}{2r\sqrt{2meU}}$$

$$\Delta x \geq \frac{6,6 \cdot 10^{-34} \cdot 0,1}{2 \cdot 2 \cdot 3,14 \cdot 10^{-4} \sqrt{2 \cdot 9,1 \cdot 10^{-31} \cdot 1,6 \cdot 10^{-19} \cdot 10^4}} \sim 10^{-9}$$

$$\Delta x \geq 10^{-9} \ll m = 10^{-4}$$

Увеличенное изображение «пятна» от луча на экране электронно-лучевой трубки

Волновые свойства электронов можно не учитывать. **Понятие траектории – корректно для движения электрона в электронно-лучевой трубке.** Движение электрона можно рассчитывать по законам классической механики несмотря на то, что это микрочастица! Электронная оптика и т.п.

## Пример. Пылинка



$$m = 10^{-12} \text{ г}$$



Линейный размер:  $r \approx 10^{-4} \text{ см} = 1 \text{ мкм}$

Будем определять координату пылинки  $x$  с точностью  $\Delta x = 10^{-6} \text{ см}$ .

$\Delta x \ll r$  и  $\Delta x \ll \lambda$  (длины волны  
видимого света,  $\approx 5 \cdot 10^{-5} \text{ см}$ )



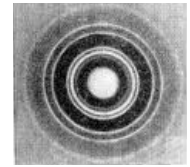
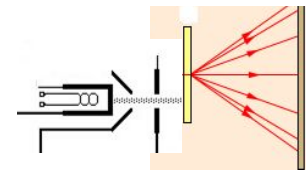
Очень высокая точность!

Какова неопределённость определения скорости?

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2} \quad \Delta v_x \geq \frac{\hbar}{2m\Delta x} = \frac{6,6 \cdot 10^{-34}}{2 \cdot 3,14 \cdot 2 \cdot 10^{-15} \cdot 10^{-8}} \approx \underline{0,5 \cdot 10^{-11} \text{ м/с}}$$

Пылинка – большая; у нее большая масса; она объект макромира и к ней применимы законы классической физики !!

# ВОЛНОВАЯ ФУНКЦИЯ



Микрочастицы обладают волновыми свойствами. А именно, их положение в пространстве задаётся определённым вероятностным законом и этот вероятностный закон таков, что при усреднении (по времени или по большому числу частиц) реализуется волновая картина.

Необходимо создать математический формализм, описывающий наблюдаемые в микромире явления и правильно предсказывающий поведение микрочастиц.

Такой формализм был создан



Описание поведения (состояния) микрочастиц с помощью **волновой функции  $\Psi$** .

Вводится комплексная **волновая функция  $\Psi$** , квадрат модуля которой даёт вероятность обнаружения частицы в пределах объёма  $dV$

Вероятность обнаружения частицы в объёме  $dV$

$$dW = |\Psi|^2 dV = \Psi\Psi^* dV$$

Плотность вероятности обнаружения частицы в данной точке пространства.

$$w = \frac{dW}{dV} = |\Psi|^2$$



Нобелевская премия за истолкование статистического смысла  $\Psi$

Макс Борн  
(1882-1970)

Для волновой функции  $\Psi$  должно быть найдено такое уравнение, чтобы найденная из него  $\Psi$  описывала поведение микрочастиц с учётом их волновых свойств.



# Уравнение Шредингера.



Эрвин Шредингер  
(1887-1961)

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi + U \Psi = i \hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}$$

# Уравнение Шредингера

Потенциальная энергия

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

Дифференциальное ур-ие 2-го порядка в частных производных – основное ур-ие нерелятивистской квантовой механики.



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

Не выводится – физический закон

Оператор Лапласа

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi + U\Psi = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}$$

## Стационарное уравнение Шредингера.

Если силовое поле, в котором движется частица, стационарно, т.е. не зависит от времени ( $U$  не зависит от  $t$ ), то уравнение Шредингера имеет вид

Полная энергия системы

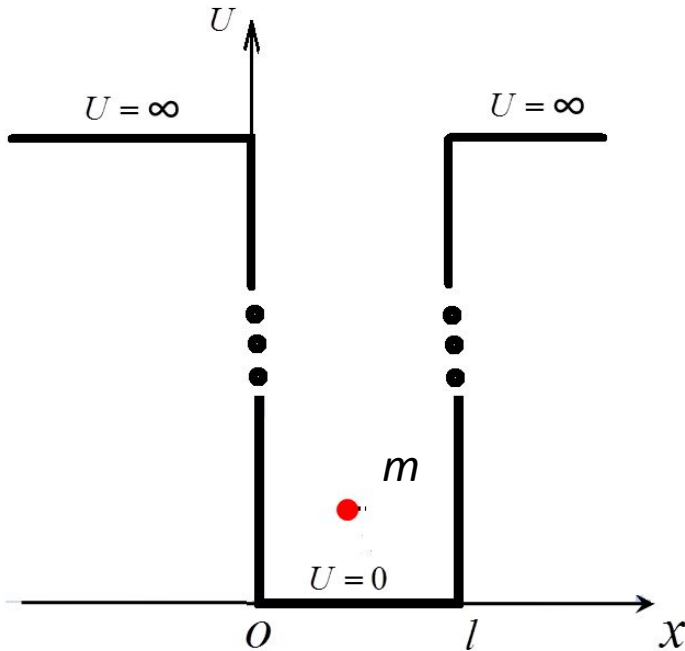
$$\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(x, y, z) + (E - U)\psi(x, y, z) = 0$$

Стационарное уравнение Шредингера.

$$\psi\psi^* = |\psi|^2$$

Не зависит от времени

# Частица в бесконечно глубокой одномерной потенциальной яме



$U$  – потенц. энергия

частицы  $0 \leq x \leq l \Rightarrow U = 0$

$x < 0$   $x > l \Rightarrow U = \infty$

$m$  – масса частицы

$E$  – полная энергия частицы

$l$  – ширина одномерной потенциальной ямы

$x$  – координата частицы

При  $x < 0$  и  $x > l$  вероятность нахождения частицы равна 0  $\Rightarrow |\psi|^2 = 0 \Rightarrow \psi = 0$

При  $0 < x < l$  вероятность нахождения частицы найдём из уравнения Шредингера

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + (E - U) \psi(x) = 0 \Rightarrow \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U) \psi(x) = 0 \Rightarrow \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + \frac{2m}{\hbar^2} E \psi(x) = 0$$

$\psi(x) = a \sin(\omega x + \alpha)$  решение

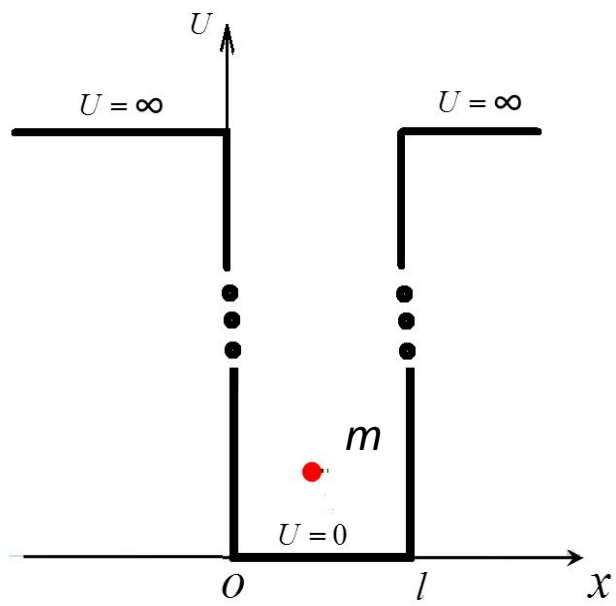
$a - ? \omega - ? \alpha - ?$

Уравнение подобное уравнению гармонического осциллятора

$$\frac{2m}{\hbar^2} E = \omega^2$$

$$\psi''(x) + \omega^2 \psi(x) = 0$$

$$\psi''(x) + \omega^2 \psi(x) = 0$$



← Уравнение подобное уравнению гармонического осциллятора →

$$\psi(x) = a \sin(\omega x + \alpha)$$

$a - ? \omega - ? \alpha - ?$

**Непрерывность** волновой функции → **граничные условия** :

$$\psi|_{x=0} = \psi|_{x=l} = 0$$

$$\psi|_{x=0} = 0 \Rightarrow a \sin \alpha = 0 \Rightarrow \alpha = 0$$

$$\psi|_{x=l} = 0 \Rightarrow a \sin \omega l = 0 \Rightarrow \omega l = \pm n\pi \quad n = 1, 2, \dots$$

$$\omega^2 = \frac{\pi^2}{l^2} \cdot n^2 \iff \frac{2m}{\hbar^2} E = \omega^2$$

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} \omega^2 \Rightarrow E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ml^2} \cdot n^2$$

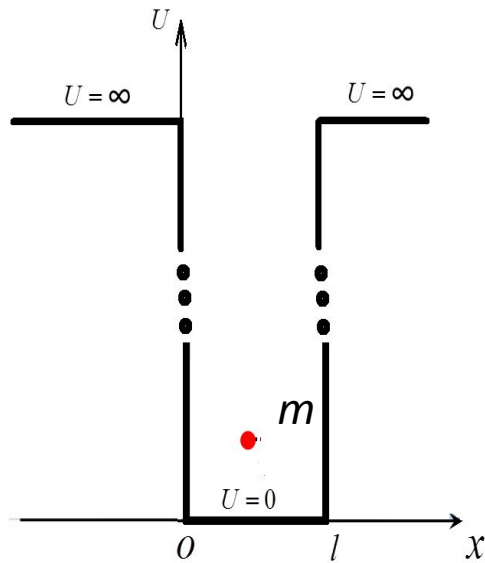
**Собственные значения энергии**  
**Квантование энергии!**  
 Вытекает прямо из уравнения Шредингера

$$\Delta E_n = E_{n+1} - E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ml^2} (2n + 1)$$

**Расстояние между соседними энергетическими уровнями**

**ДО СИХ**

# Найдём $\Psi$



$$\psi(x) = a \sin(\omega x + \alpha)$$

$$\omega^2 = \frac{\pi^2}{l^2} \cdot n^2$$

$$\alpha = 0$$

$$\psi(x) = \psi_n(x) = a \sin \frac{n\pi}{l} x$$

$$a = ?$$

## Условие нормировки :

частица с вероятностью 1  
находится в потенциальной яме:

$$\longleftrightarrow \int_0^l \psi \psi^* dx = 1$$

$$\int_0^l \Psi \Psi^* dx = a^2 \int_0^l (\sin^2 \frac{n\pi}{l} x) dx = a^2 \int_0^l \frac{1}{2} (1 - \cos 2 \frac{n\pi}{l} x) dx =$$

$$= a^2 \left( \frac{1}{2} x \Big|_0^l - \frac{l}{4n\pi} \cdot \sin \frac{2n\pi}{l} x \Big|_0^l \right) = \frac{1}{2} a^2 l = 1 \implies a = \sqrt{\frac{2}{l}}$$

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{l}} \sin \frac{n\pi}{l} x$$

← **Собственные функции, соответствующие собственным значениям энергии с квантовым числом  $n$  ( $n=1, 2, 3, \dots, \infty$ ).**

$$\psi_n^2 = \frac{2}{l} \sin^2 \frac{n\pi}{l} x$$

← **Плотность вероятности обнаружить частицу в данной точке**

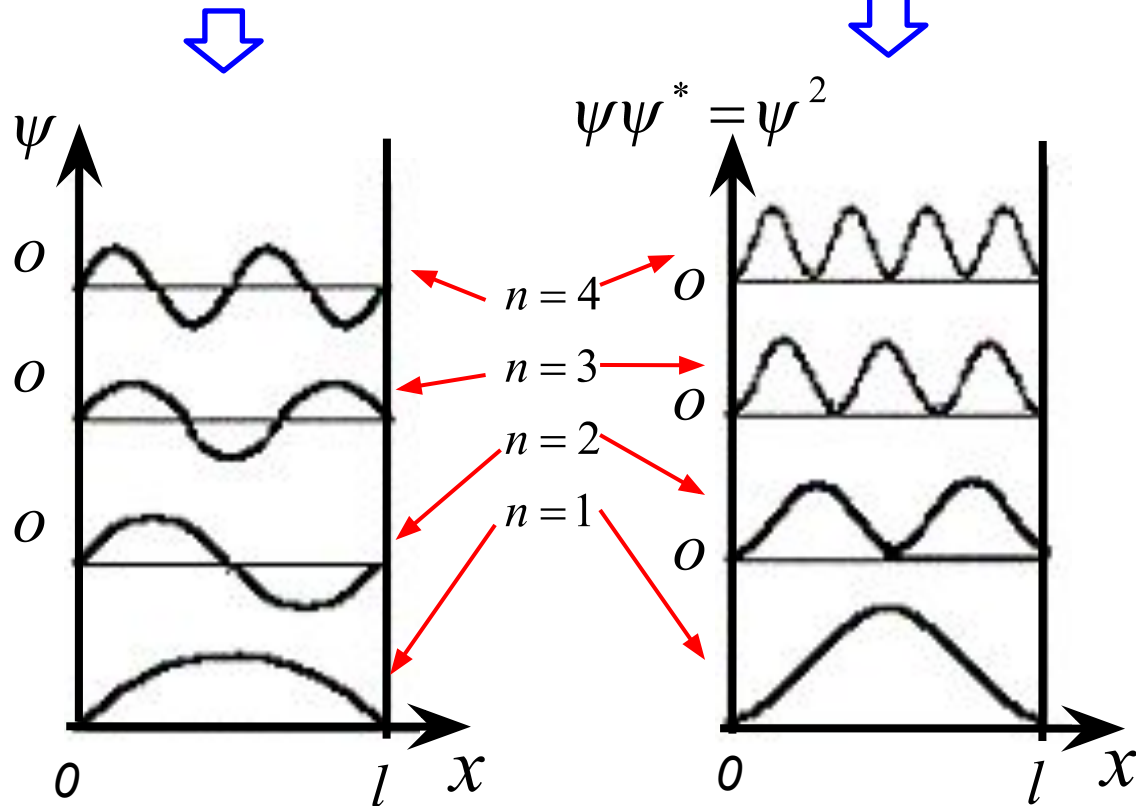
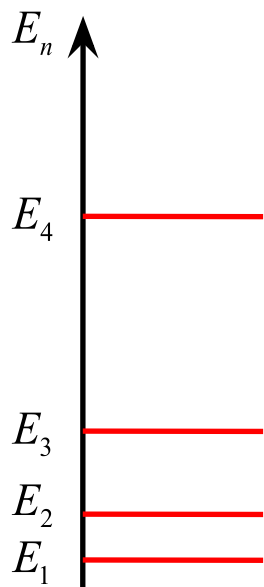
# Квантование энергии

Плотность вероятности обнаружить частицу в данном месте

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ml^2} \cdot n^2$$

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{l}} \sin \frac{n\pi}{l} x$$

$$\psi_n^2 = \frac{2}{l} \sin^2 \frac{n\pi}{l} x$$



$$\Delta E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ml^2} (2n+1)$$

$m \rightarrow \infty \dots$   
 $l \rightarrow \infty \dots$


**Классическая физика**

## Найдём масштаб квантования энергии.

Пример 1: электрон,  $m \approx 10^{-30}$  кг, размер ямы  $l = 10$  см (свободный электрон в металле)

$$\Delta E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ml^2} (2n+1) \approx \frac{\pi^2 \hbar^2}{ml^2} n = \frac{\pi^2 6.6^2 \cdot 10^{-68}}{4\pi^2 10^{-30} 10^{-2}} n \approx 10^{-37} n \text{ Дж} \approx 10^{-18} n \text{ эВ}$$

Спектр энергии – практически непрерывный  классическая физика

Пример 2: электрон, размер ямы  $l \approx 10^{-8}$  см  Размеры области порядка размера атома

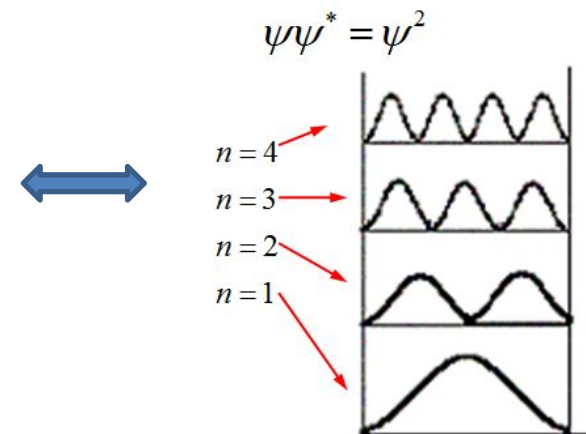
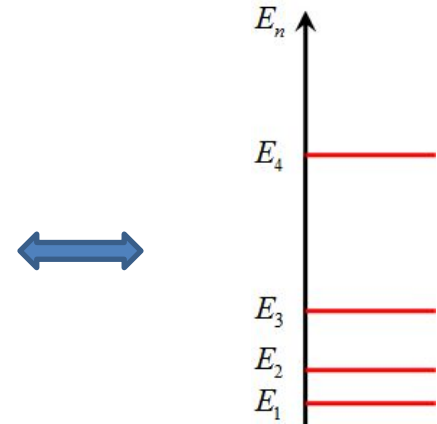
$$\Delta E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{ml^2} n = \frac{\pi^2 6.6^2 \cdot 10^{-68}}{4\pi^2 10^{-30} 10^{-20}} n \approx 10^{-19} n \text{ Дж} \approx 1n \text{ эВ (!!)}$$

 Энергия квантована!

# Общие выводы из рассмотренного примера:

**Квантование энергии** – следствие «волновых» свойств частиц – получается из основных положений квантовой механики (уравнение Шредингера) без каких-либо дополнительных предположений (постулатов).

**Результат решения уравнения Шредингера: информация о распределении вероятности** нахождения частицы с определенным (дискретным) значением энергии в соответствующем квантовом состоянии с номером  $n$ .



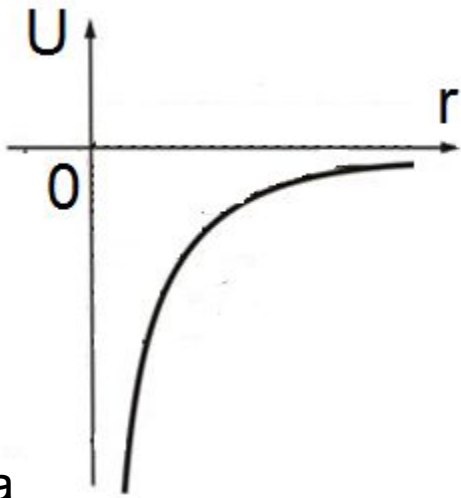
Увеличение массы частицы или увеличение линейных размеров пространства приводит к переходу от дискретного спектра энергии к непрерывному, т.е. **квантовая механика не противоречит классической физике**, а является более общей теорией.



**Квантово-механическая  
модель атома водорода.  
Квантовые числа.**

# Решение уравнения Шредингера для электрона в центрально-симметричном поле ядра

Система: ядро с зарядом  $+Ze$  и один электрон



Полная энергия системы

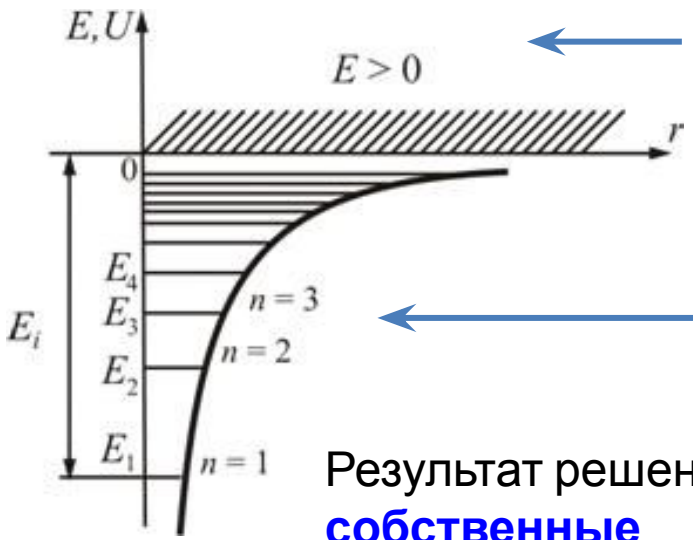
Потенциальная энергия системы

$$U = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

$$\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(x, y, z) + (E - U) \psi(x, y, z) = 0 \quad \text{Ур-е Шредингера}$$

Можно показать: уравнение Шредингера имеет однозначные, конечные и непрерывные решения при **любых** положительных значениях полной энергии:  $E > 0$  (свободный электрон);

при **дискретных** отрицательных значениях полной энергии:  $E < 0$  (связанный электрон).



Результат решения: **собственные значения энергии**

$$E_n = -\frac{m_e Z^2 e^4}{8h^2 \epsilon_0^2} \cdot \frac{1}{n^2}$$

$$n = 1, 2, 3, \dots$$

Совпадает с  $E_n$ , полученной Бором (!!). Но здесь **получается из ур-я Шредингера без каких либо дополнительных предположений** (типа постулатов Бора).

# АТОМ ВОДОРОДА: КВАНТОВЫЕ ЧИСЛА

Собственные функции ур-я Шредингера для атома водорода содержат три целочисленных параметра, которые определяют квантовое состояние электрона в атоме.

Собственные функции  
(решения уравнения Шредингера)

$$\psi_{nlm} \quad n; \ell; m$$

Квантовые числа

Магнитное кв. ч.

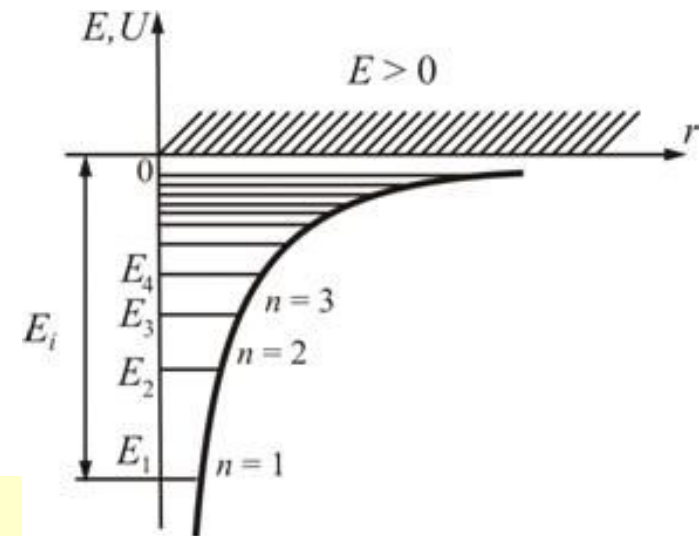
Главное кв. ч.

Азимутальное кв. ч.

**Главное квантовое число**

**$n$  – главное квантовое число,  $n = 1, 2, 3, \dots$**

совпадает с номером энергетического уровня;  
характеризует **энергетическое состояние** электрона в атоме.



$$E_n = -\frac{m_e Z^2 e^4}{8h^2 \varepsilon_0^2} \cdot \frac{1}{n^2}$$

# АТОМ ВОДОРОДА: КВАНТОВЫЕ ЧИСЛА

$$\psi_{nlm} \quad n ; \ell ; m$$

Азимутальное квантовое число

$\ell$  – азимутальное квантовое число  $\ell = 0, 1, 2, \dots, n-1$

$\ell$  определяет величину (модуль) момента импульса электрона в атоме:

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

Величина момента импульса **КВАНТОВАНА**  
(!)

$n = 1 \rightarrow l = 0, L = 0$  ← В отличие от модели Бора  
(!!)

$$l = 0, L = 0$$

$$n = 2 \rightarrow l = 0, L = 0$$

$$n = 3 \rightarrow l = 1, L = \hbar \sqrt{2}$$

$$n = 4. \rightarrow \dots\dots\dots$$

$$l = 1, L = \hbar \sqrt{2}$$

$$l = 2, L = \hbar \sqrt{6}$$

# АТОМ ВОДОРОДА: КВАНТОВЫЕ ЧИСЛА

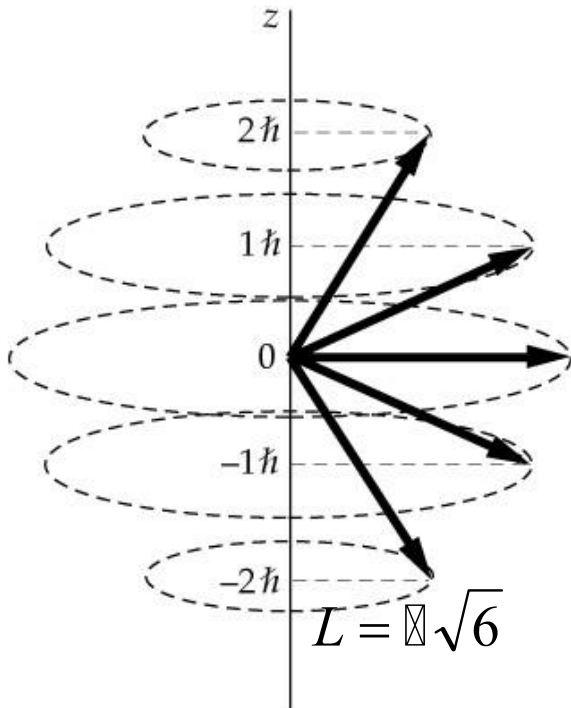
$$\Psi_{nlm} \quad n; \ell; m$$

Магнитное квантовое число

$m$  – магнитное квантовое число  $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm \ell$

$m$  определяет **проекцию** момента импульса на выделенное направление (например, направление магнит. или электр.

$$L_z = m \hbar$$



Т.е. проекция момента импульса на некоторое выделенное направление принимает **дискретные значения - пространственное квантование.**

Например, электрон в атоме водорода в квантовом состоянии  $n = 3, \quad l = 2 \quad L = \hbar\sqrt{6}$



$$m = 0, \pm 1, \pm 2$$

может иметь **5 значений для проекции** момента импульса на заданное направление.

# АТОМ ВОДОРОДА: ВЫРОЖДЕННЫЕ СОСТОЯНИЯ

$$\Psi_{nlm} \quad n; \ell; m$$


$n$  – главное квантовое число,  $n = 1, 2, 3, \dots$

$\ell$  – азимутальное квантовое число  $\ell = 0, 1, 2, \dots, n - 1$

$m$  – магнитное квантовое число  $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm \ell$

$$E_n = -\frac{m_e Z^2 e^4}{8h^2 \varepsilon_0^2} \cdot \frac{1}{n^2}$$

Энергия зависит **только от  $n$**



Одному **энергетическому** состоянию может соответствовать **несколько квантовых состояний** электрона – **вырожденные состояния**.

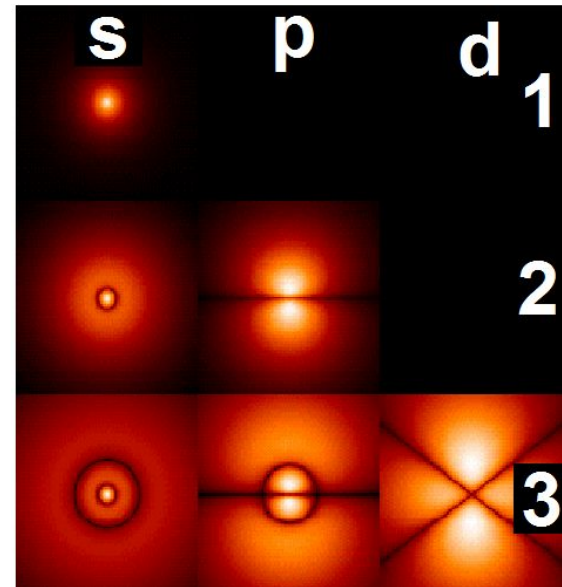
Число вырожденных состояний – **кратность вырождения  $\sigma$** .

$$\sigma = \sum_{\ell=0}^{n-1} (2\ell + 1) = \frac{1 + [2(n-1) + 1]}{2} \cdot n = n^2 \quad \Longrightarrow \quad \sigma = n^2$$

# АТОМ ВОДОРОДА: РАЗЛИЧНЫЕ КВАНТОВЫЕ СОСТОЯНИЯ, ОРБИТАЛИ

$E_n$	$\sigma$	$\psi_{nlm}$	$n$	$\ell$	$m$
$E_1$	1	$\psi_{1, 0, 0}$	1	0	0
$E_2$	4	$\psi_{2, 0, 0}$	2	0	0
		$\psi_{2, 1, -1}$	2	1	-1
		$\psi_{2, 1, 0}$	2	1	0
		$\psi_{2, 1, +1}$	2	1	+1
$E_3$	9	$\psi_{3, 0, 0}$	3	0	0
		$\psi_{3, 1, -1}$	3	1	-1
		$\psi_{3, 1, 0}$	3	1	0
		$\psi_{3, 1, +1}$	3	1	+1
		$\psi_{3, 2, -2}$	3	2	-2
		$\psi_{3, 2, -1}$	3	2	-1
		$\psi_{3, 2, 0}$	3	2	0
		$\psi_{3, 2, +1}$	3	2	+1
		$\psi_{3, 2, +2}$	3	2	+2

$\ell = 0 \quad 1 \quad 2 \quad 3 \dots$   
 $s \quad p \quad d \quad f \dots$



← 1s

← 2s

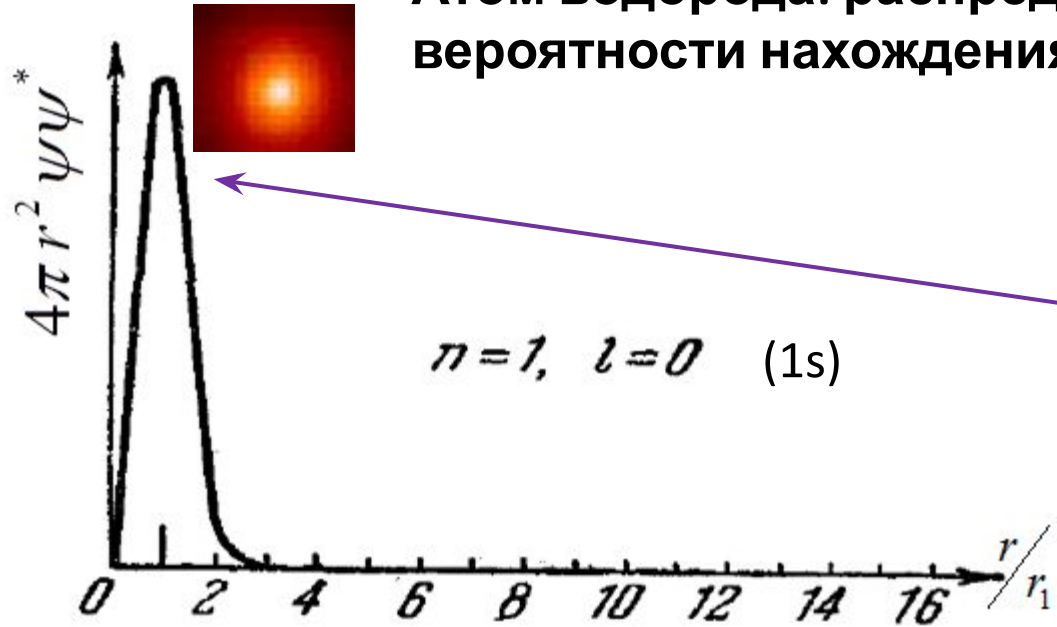
} 2p

← 3s

} 3p

} 3d

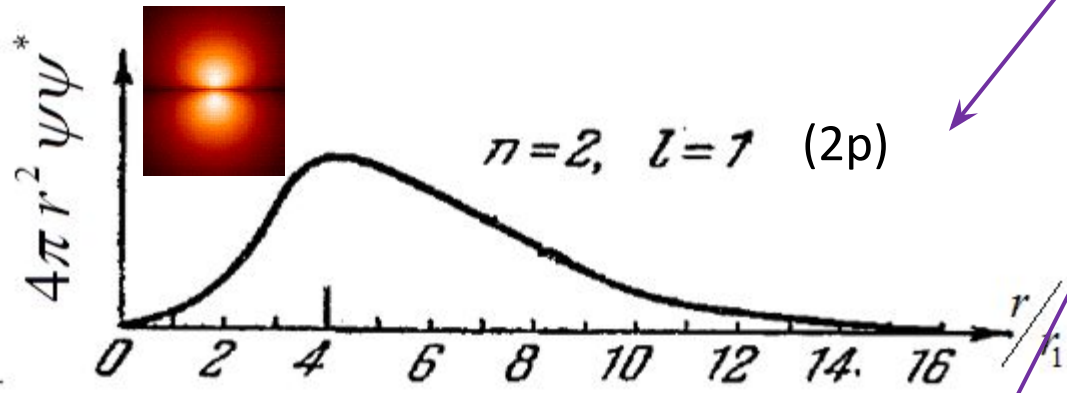
# Атом водорода: распределение плотности вероятности нахождения электрона по $r$



Зависимость плотности вероятности нахождения электрона на расстоянии  $r$  от ядра в единицах 1-го боровского радиуса  $r_1$



↑  
Определяется  
**главным квантовым  
числом**  
 **$n$**



Т.о., радиусы боровских орбит совпадают с наиболее вероятными расстояниями электрона от ядра.

