

ЛЕКЦИИ 15-16

СООТНОШЕНИЕ НЕОПРЕДЕЛЁННОСТЕЙ ГЕЙЗЕНБЕРГА

Микрочастица (микрообъект) не может иметь одновременно и определённую координату (x, y, z), и определённую соответствующую проекцию импульса (p_x, p_y, p_z), причем неопределённости этих величин удовлетворяют условиям:

$$\begin{aligned}\Delta x \Delta p_x &\geq h \\ \Delta y \Delta p_y &\geq h \\ \Delta z \Delta p_z &\geq h\end{aligned}$$

$$\Delta x \Delta p_x \geq h$$

Произведение неопределённостей координаты и соответствующей ей проекции импульса не может быть меньше величины порядка h .

Неспособность одновременно точно определить координату и соответствующую ей составляющую импульса, не связана с несовершенством методов измерения

или приборов, а является следствием специфики мик-рообъектов, отражающей особенности их объективных свойств, а именно двойственной корпускулярно-волно-вой природы. Соотношение неопределённостей получено при одновременном использовании классических характеристиках движения частицы (координаты, импульса) и наличия у неё волновых свойств.

В классической механике принимается, что измерение координаты и импульса может быть определено с лю-бой точностью, и соотношение неопределённостей является **КОНТРАДИКЦИОННЫМ**

ВОЛНОВАЯ ФУНКЦИЯ И ЕЁ СТАТИСТИЧЕСКИЙ СМЫСЛ

Экспериментальное подтверждение идеи де-Бройля об универсальности корпускулярно-волнового дуализма и ограниченности применения классической механики привели к созданию **КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ** описывающей законы движения и взаимодействия микрочастиц, с учетом их волновых свойств. При этом возникли новые проблемы, в частности проблема физической природы волн де-Бройля. Можно ли волны де-Бройля считать волнами вероятности, то есть считать что вероятность обнаружения микрочастиц в различных точках пространства меняется по волновому закону? **НЕЛЬЗЯ!!!** Такое толкование волн де-Бройля неверно, потому что тогда вероятность обнаружить частицу в некоторых точках пространства будет отрицательной.

Что бы устранить эти трудности немецкий физик М. Борн (1882-1970) в 1926 г. Предположил что по волновому закону изменяется НЕ сама вероятность, а величина называемая амплитудой вероятности (или волновой функцией).

Амплитуда вероятности может быть комплексной, и вероятность пропорциональна квадрату её модуля $|ψ(x, z, t)|^2$. Таким образом, описание состояния микрообъекта с помощью волновой функции имеет **статистический, вероятностный характер**: квадрат модуля волновой функции (квадрат модуля амплитуды волн де-Бройля) определяет вероятность нахождения частицы в момент времени t в области с координатами x и z .

Состояние микрочастицы в квантовой механике описывается с помощью волновой функции, которая является основным носителем информации об волновых и корпускулярных свойствах микрочастиц. Вероятность нахождения частицы в элементе объема dV равна:

$$dW = |\psi|^2 dV$$

$$|\psi|^2 = dW/dV$$

Квадрат модуля волновой функции: имеет смысл плотности вероятности, то есть определяет вероятность нахождения частицы в единичном объеме в окрестности точки с координатами $|\psi|^2$.

То есть физический смысл имеет не сама функция, а квадрат её модуля, которым задаётся интенсивность волн де-Бройля.

Вероятность найти частицу в момент времени t в конечном объеме V равна:

$$W = \int_V dW = \int_V |\psi|^2 dV$$

Так как $|\psi|^2 dV$ определяется как вероятность, необходимо волновую функцию нормировать так. Что бы вероятность достоверного события обращалась в единицу, если за объем принять бесконечный объем всего пространства. Это означает, что при данной условии частица находится где то в пространстве.

$$\int |\psi|^2 dV = 1$$

Значит, **условие нормировки вероятностей**, где данный интеграл вычисляется по всему бесконечному пространству, то есть координатам от $-\infty$ до $+\infty$.

Таким образом данное условие говорит об

Что бы волновая функция являлась объективной характеристикой состояния микрочастицы, она должна удовлетворять ряду ограничивающих условий:

- Быть конечной (не больше единицы)
- Быть однозначной (вероятность не может быть неоднозначной величиной)
- Быть непрерывной (вероятность не может изменяться скачком)

Волновая функция удовлетворяет принципу суперпозиции: если система может находиться в различных состояниях, описываемых волновыми функциями $\psi_1, \psi_2, \psi_3, \dots, \psi_n$, то она может так же находиться в состоянии описываемым линейной комбинацией этих функций:

C_n ($n = 1, 2, 3, \dots$) произвольные комплексные числа

Сложение волновых функций (амплитуд вероятностей), а не вероятностей (определяемых квадратами модулей волновых функций) принципиально отличают кванто-вую теорию от классической статистической теории, в которой для независимых событий справедлива теорема сложения вероятностей.

Волновая функция, являясь основной характеристикой состояния микрообъектов, позволяет в квантовой механике вычислять средние значения физических величин, характеризующих данный микрообъект. Например, среднее расстояние $\langle r \rangle$ электрона от ядра атома определяют по формуле:

$$\langle r \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} r |\psi|^2 dV$$

УРАВНЕНИЕ ШРЕДИНГЕРА

Уравнением движения в квантовой механике, описывающим движение микрочастиц в различных силовых полях, должно быть уравнение, из которого бы вытекали наблюдаемые на опыте волновые свойства частиц. Основное уравнение должно быть уравнением относительно волновой функции $|\psi|^2$, так как именно она (а точнее её квадрат $|\psi|^2$). Определяет вероятность пребывания частицы в момент времени t в объеме dV с координатами x, y, z и z есть в области с координатами x, y, z и z . так как искомое уравнение должно учитывать волновые свойства частиц, то оно должно быть волновым уравнением.

Основное уравнение нерелятивистской механики сформулировано в 1926 г. Э. Шредингером. Оно не выводится, а постулируется

ОБЩЕЕ УРАВНЕНИЕ ШРЕДИНГЕРА (УРАВНЕНИЕ ШРЕДИНГЕРА ЗАВИСЯЩЕЕ ОТ ВРЕМЕНИ)

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

Где:

$\hbar = \frac{h}{2\pi}$ — постоянная Планка
 m — масса частицы

Δ — оператор Лапласа $\Delta \psi = \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2}$

$U(x, y, z, t)$ — потенциальная энергия частицы в силовом поле в котором совершается движение

$\psi(x, y, z, t)$ — искомая волновая функция частицы

Уравнение Шредингера справедливо для любой частицы (со спином (собственным неуничтожимым механичес-ким моментом импульса, не связанным с движением частицы в пространстве)равным 0) движущейся с ма-лой (по сравнению со скоростью c (с света) скоростью Оно дополняется условиями накладываемыми на вол-новую функцию:

1. Волновая функция должна быть конечной, однознач-ной и непрерывной.
2. Производные $\frac{\partial \psi}{\partial x}$, $\frac{\partial \psi}{\partial y}$, $\frac{\partial \psi}{\partial z}$ должны быть непреры-вны.
3. Функция $|\psi|^2$ должна быть интегрируема.

УПРОЩЕННОЕ УРАВНЕНИЕ ШРЕДИНГЕРА (УРАВНЕНИЕ ШРЕДИНГЕРА ДЛЯ СТАЦИОНАРНЫХ СОСТОЯНИЙ)

Для многих физических явлений уравнение Шредингера можно упростить, исключив из него зависимость от времени, иными словами найдя уравнение Шредингера для **стационарных состояний** – состояний с фиксированными значениями энергии.

Это возможно, если силовое поле $U(x, y, z)$ (в котором частица движется стационарно, то есть ψ – не зависит явно от времени и имеет смысл потенциальной энергии. В этом случае уравнение Шредингера может быть представлено в виде преобразования двух функций, одна из которых ост

только времени, причем зависимость от времени
выражается как:

$$e^{-i\omega t} = e^{-i\left(\frac{E}{\hbar}\right)t}$$

Так что:

$$\psi(x, y, z, t) = \psi(x, y, z) e^{-i\left(\frac{E}{\hbar}\right)t}$$

E — полная энергия частицы, постоянная в случае стационарного поля.

В более общей форме уравнение имеет вид:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} e^{-i\left(\frac{E}{\hbar}\right)t} \Delta \psi + U \psi e^{-i\left(\frac{E}{\hbar}\right)t} = i\hbar (-iE\hbar) \psi e^{-i\left(\frac{E}{\hbar}\right)t}$$

После проведения ряда преобразований уравнение
будет иметь вид:

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

ДВИЖЕНИЕ СВОБОДНОЙ ЧАСТИЦЫ

При движении свободной частицы $U(x) = 0$ её полная энергия совпадает с кинетической. Для свободной частицы движущейся вдоль оси x уравнение Шредингера для стационарных состояний будет иметь вид:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E \psi = 0$$

Частным решением этого уравнения является

функция:

$$\psi(x) = A e^{ikx}$$

$$A = \text{const} \quad k = \text{const}$$

$$E = \hbar^2 k^2 / 2m$$

Где $\psi(x) = A e^{ikx} \pm A e^{-ikx}$ с собственным значением энергии.

Функция $\omega = E/\hbar$ $k = p_x/\hbar$ представляет собой плоскую монохроматическую волну де-Бройля (здесь ω и k).

Зависимость энергии от импульса $E = \hbar^2 k^2 / 2m = p_x^2 / 2m$ обычная для нерелятивистских частиц, значит энергия свободной частицы может принимать любые значения и её энергетический спектр является непрерывным. Таким образом свободная квантовая частица описывается плоской монохроматической волной де-Бройля. Этому соответствует не зависящая от времени плотность вероятности обнаружения частицы в данной точке пространства.

$$|\psi|^2 = |A|^2$$

Значит все положения свободной частицы в пространстве считаются равновероятными.

ЧАСТИЦА В ОДНОМЕРНОЙ
ПРЯМОУГОЛЬНОЙ
«ПОТЕНЦИАЛЬНОЙ ЯМЕ» С
БЕСКОНЕЧНО ВЫСОКИМИ
СТЕНКАМИ

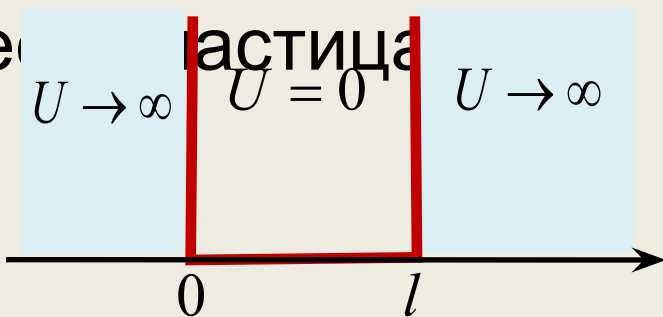
Уравнение Шредингера $\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi + U(x, y, z, t) \psi = i \hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}$

характеризующее микрочастицы может быть применено к частице в одномерной «потенциальной яме» с бесконечно высокими стенками. Такая «яма» описывается

потенциальной энергией вида (частица

двигается вдоль оси x):

$$U(x) = \begin{cases} \infty & x < 0 \\ 0 & 0 \leq x \leq l \\ \infty & x > l \end{cases}$$



l

Где l – ширина ямы, а энергия отсчитывается от её дна.

Уравнение Шредингера для стационарных состояний в случае одномерной задачи записывается в виде:

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

По условию задачи (бесконечно высокие стенки) частица не проникает за пределы ямы, и вероятность её обнаружения (а значит и волновая функция) за пределами ямы равна нулю. На границах ямы (при $x=0$ и $x=l$) непрерывная волновая функция тоже должна обращаться в нуль, а значит граничные условия в этом случае имеют вид $\psi(0) = \psi(l) = 0$ $0 \leq x \leq l$

В пределах ямы уравнение Шредингера

сводится к уравнению:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E \psi = 0$$
 или иначе

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + k^2 \psi = 0$$

Где $k^2 = 2mE/\hbar^2$

Общее решение данного дифференциального уравнения:

$$\psi(x) = A \sin kx + B \cos kx$$

$$\psi(0) = 0 \quad B = 0 \quad \psi(x) = A \sin kx$$

Так как $\psi(l) = A \sin kl = 0$, а значит $kl = n\pi$

Условие $n = 1, 2, 3, \dots$ выполняется только при $n \in \mathbb{N}$ где n – целое число, то есть необходимо что бы выполнялось равенство $kl = n\pi$, а значит:

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

Стационарное уравнение Шредингера описывающее движение частицы в «потенциальной яме», с бесконечно высокими «стенками» E_n удовлетворяется только при собственных значениях энергии $n = 1, 2, 3, \dots$ зависящих от целого числа

Энергия E_n частицы в «потенциальной» яме с бесконечно высокими «стенками» принимает лишь определённые дискретные значения или **квантуется**. Квантованные значения энергии называются **уровнями энергии**, а число определяющее энергетические уровни частицы, называется **главным квантовым числом**.

Микрочастица в «потенциальной яме» с бесконечно высокими «стенками» может находиться только на определённом энергетическом уровне n , или, иначе говоря, частица **находится в квантовом состоянии**.

Подставив в уравнение волновой функции $\psi(x)$, значение найдем собственные функции:

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

Постоянную интегрирования A найдём из условия нормировки:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi|^2 dV = 1$$

То есть:

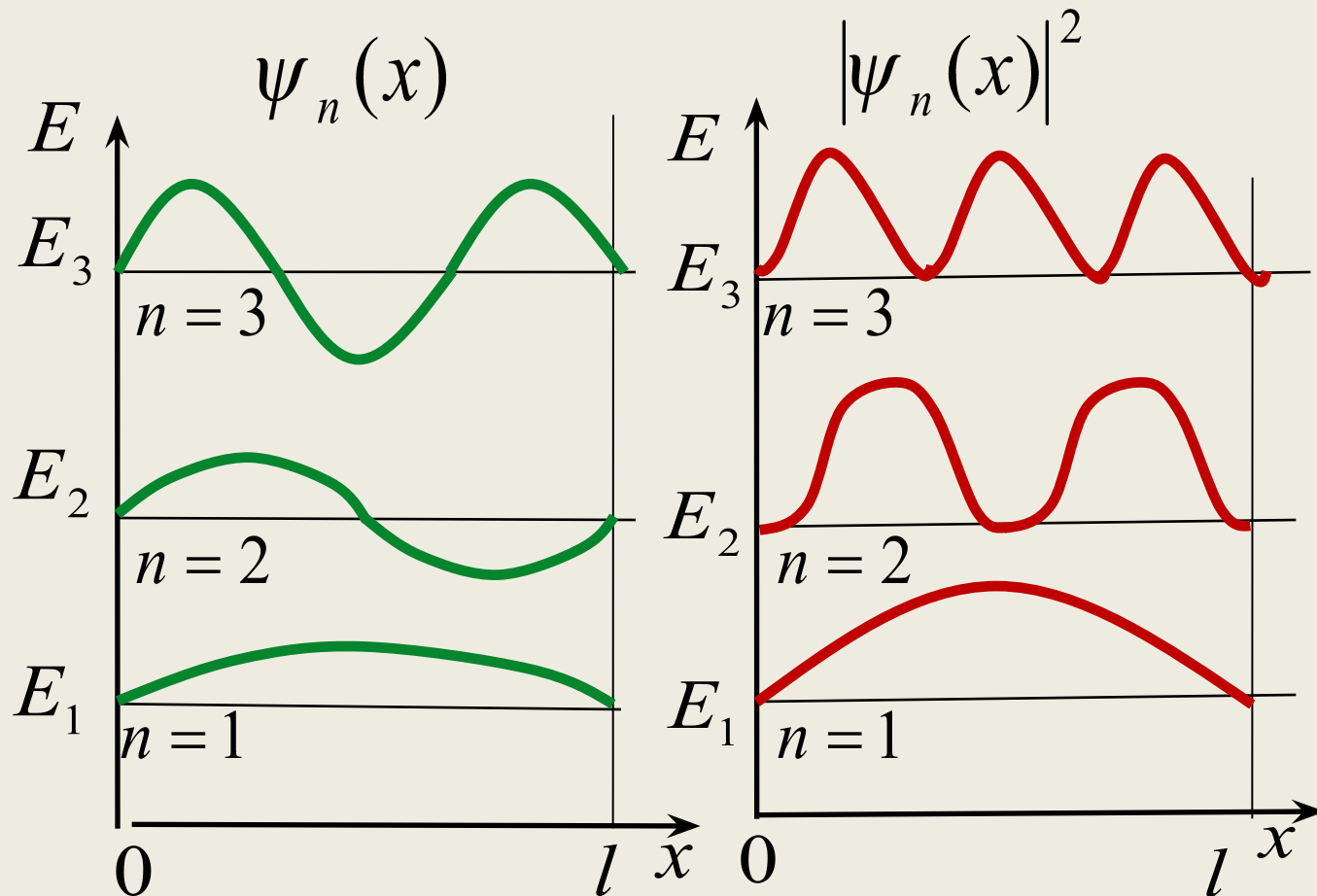
$$A^2 \int_{-\infty}^{\infty} \sin^2 \frac{n\pi}{l} x dx = 1$$

Проинтегрировав получим $A = \sqrt{\frac{2}{l}}$, а собственные функции будут иметь вид:

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

Графики собственных функций соответствующие уровням энергии E_1, E_2, E_3 приведены на рисунке (зелёные графики), так же показана плотность вероятности обнаружения частицы на различных расстояниях от «отверстия», равная $|\psi_n(x)|^2$.

Из рисунка следует, что в квантовом состоянии с номером n частица не может находиться по-середине «ямы», но



часто может быть в левой и правой частях. Такое поведение показывает, что представления о траекториях частицы в квантовой механике несостоятельны.

Энергетический интервал между соседними уровнями:

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

$$l = 10^{-10} \text{ м}$$

$$\Delta E_n \approx 10^{-35} \cdot n \text{ Дж} \approx 10^{-16} \cdot n \text{ эВ}$$

Для электрона, при размере «ямы» (для свободных электронов в металле)

, то есть энергетические уровни расположены столь тесно, что спектр практически можно считать непрерывным, если же размеры «ямы» сопоставимы с атомными то, для электрона, то есть получается

В «потенциальной яме» с бесконечно высокими «стенками» приводит к квантованным значениям энергии, в то время как классическая механика никаких ограничений на энергию этой частицы не накладывает.

Частица в «потенциальной яме» не может иметь энергию меньшую чем $\frac{\pi^2 \hbar^2}{2ml^2}$, это не случайно и зависит от сложения неопределённостей.

Неопределённость координаты частицы в «яме» равна $\Delta x = l$. Тогда импульс не может (по соотношению неопределённостей $\Delta x \Delta p \geq \hbar/2$) иметь точное, в данном случае нулевое значение. Неопределённость импульса $\Delta p_{\text{min}} \approx (\Delta p)_{\text{min}} \approx \hbar/l$ разбросу значений импульса соответствует кинетическая энергия $E_{\text{min}} \approx \frac{\hbar^2}{2ml^2}$. Все остальные уровни имеют энергии превосходящие

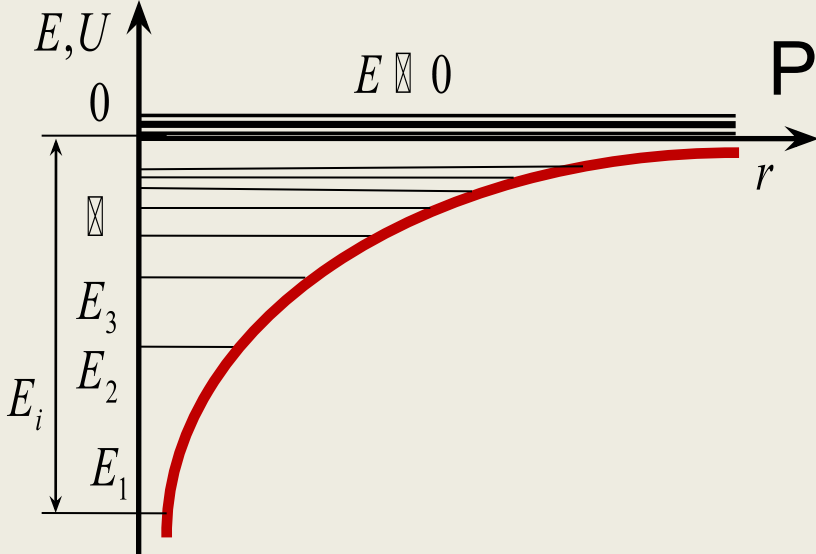
При больших квантовых числах $\Delta E_n / E_n \approx 2/n \ll 1$, то есть соседние уровни расположены тесно: тем теснее, чем больше n . Если n очень велико, то можно говорить о практически непрерывной последовательности уровней и характерная особенность квантовых процессов – дискретность, сглаживается это частный случай ПРИНЦИПА СООТВЕТСТВИЯ БОРА, по которому: законы квантовой механики должны, при больших значениях квантовых чисел переходить в законы классической механики.

ОБЩАЯ ТРАКТОВКА ЗАКОНА СООТВЕТСТВИЯ БОРА:

Всякая новая теория, более общая, являющаяся развитием классической, не отвергает её полностью, а включает в себя классическую

ЭЛЕМЕНТЫ СОВРЕМЕННОЙ
ФИЗИКИ АТОМОВ И
МОЛЕКУЛ

АТОМ ВОДОРОДА В КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ



Решение задачи об

энергетических уровнях
электрона для атома
водорода (а так же водородо-
подобных систем),
сводится к задаче о

Потенциальная энергия взаимодействия электрона с
движением электрона в
ядром, обладающим зарядом Ze (для водорода
кулоновском поле ядра):

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

r

Где r – расстояние между электроном и ядром.

Функция $U(r)$ графически изображена на графике
красной кривой. $U(r)$ неограниченно убывающая
(возрастающая по модулю), с уменьшением

Состояние электрона в атоме водорода описывается волновой функцией удовлетворяющему стационарному уравнению Шредингера:

$$\Delta\psi + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E + \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) \psi = 0$$

Где:

m — масса электрона

E — полная энергия электрона в атоме

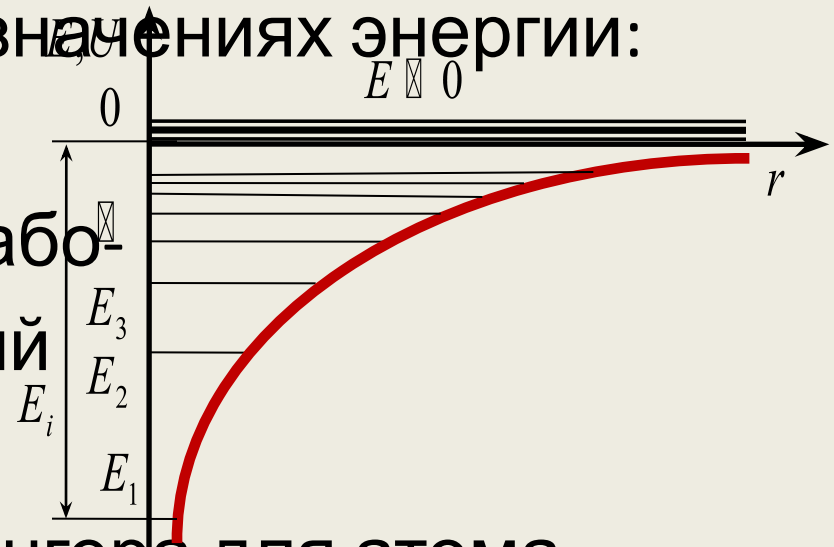
Так как поле, в котором движется электрон, является центральным симметричным, то для решения данного уравнения используют сферическую систему координат (r, θ, ϕ) . Не вдаваясь в математическое решение этой задачи, ограничимся рассмотрением важнейших результатов, которые из него следуют, выявив его физический смысл.

1.ЭНЕРГИЯ

Подобные уравнения имеют решения удовлетворяющие требованиям однозначности, конечности и непрерывности волновой функции только при собственных значениях энергии:

$$E_n = -\frac{1}{n^2} \frac{Z^2 m e^4}{8 h^2 \epsilon_0^2} \quad (n = 1, 2, 3, \dots)$$

То есть для дискретного набора отрицательных значений энергии.



Решение уравнения Шредингера для атома водорода приводит к появлению дискретных энергетических уровней (E_1, E_2, E_3 и т.д.). Самый нижний уровень E_1 отвечающий минимально возможной энергии – **ОСНОВ-НОЙ**, остальные ($E_n > E_1, n = 2, 3, \dots$) **ВОЗБУЖДЕННЫЕ**.

При $E < 0$ движение электрона является связанным – он находится внутри гиперболической «потенциальной ямы». По мере роста главного квантового числа n энергетические уровни располагаются ближе к $n = \infty \Rightarrow E = 0$ и при $E \rightarrow 0$ движение электрона является свободным, область непрерывного спектра (заштрихована) соответствует ионизированному атому.

Энергия ионизации атома водорода $E_i = E_1 = 13,6 \text{ эВ} = 21,68 \cdot 10^{-19} \text{ Дж}$

$$E_n = -\frac{me^4}{8h^2 \epsilon_0^2}$$

Выражение для E_n совпадает с формулой полученной Бором для энергии атома водорода. Однако, если Бору пришлось вводить дополнительные гипотезы (постулаты), то в квантовой механике дискретные значения энергии,

2. КВАНТОВЫЕ ЧИСЛА

В квантовой механике указывалось, что уравнению Шредингера удовлетворяют собственные функции определяемые тремя **квантовыми числами**: n
главным, орбитальным и магнитным.

- **Главное квантовое число** n – определяет энергетические уровни электрона в атоме и может принимать любые целочисленные значения $(n=1, 2, 3, \dots)$.

Из решения уравнения Шредингера вытекает момент импульса (механический орбитальный момент) электрона квантуется, то есть не может быть произвольным, а принимает дискретные значения:

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

- **Орбитальное квантовое число l** – определяет момент импульса электрона в атоме, при заданном значении l принимает значения $0, 1, 2, \dots, n-1$ то есть всего n значений.
- **Магнитное квантовое число m_l** – определяет проекцию момента импульса электрона на заданное направление, причем вектор момента импульса электрона в атоме может иметь в пространстве ориентаций. При заданном значении l , может принимать значения $-l, -(l-1), \dots, 0, \dots, (l-1), l$ то есть $2l+1$ значений.

Наличие должно привести в магнитном поле к $2l+1$ расщеплению уровня с главным квантовым числом n на подуровней. Соответственно в спектре атома должно наблюдаться расщепление спектральных линий (эффект Зеемана)

Хотя энергия электрона и зависит только от главного квантового числа n , но каждому собственному значению E_n (кроме E_1) соответствуют несколько собственных функций, отличающихся значениями m_l и m_s . Значит, атом может иметь одно и то же значение энергии находясь в нескольких различных состояниях.

Так при данном орбитальное квантовое число l может изменяться от 0 до l , и каждому значению l соответствует $2l + 1$ различных состояний, то число различных состояний, соответствующих данному l равно $\sum_{m_l=0}^{2l+1} 1 = 2l + 1$

Квантовые числа и их значения являются следствием решений уравнения Шредингера и условий однозначности, непрерывности и конечности налагаемых на волновую функцию. Кроме того, так как при движении электрона в атоме существенны волновые свойства электрона, квантовая механика отказывается от классического представления о электронных орбитах. Согласно квантовой механике каждому энергетическому состоянию соответствует волновая функция, квадрат модуля которой определяет вероятность обнаружения электрона в единице объема.

Вероятность обнаружения электрона в различных частях атома различна. Электрон при своем движении как бы «размазан» по всему объему

ятность нахождения электрона в различных точках объёма атома. Квантовые числа и характеризуют размер и форму электронного облака, а квантовое число характеризует ориентацию электронного облака в пространстве.

m_l

В атомной физике, по аналогии со спектроскопией, состояние электрона, характеризующееся квантовыми числами называют **s**-состоянием (электрон в этом состоянии называется **s**-электрон). При **p**-состоянии при **d**-состоянии, при **f**-состоянии, и т.д.

Значение главного квантового числа указывается перед условным обозначением орбитального квантового числа. Например, электроны в состояниях $l = 0$ и обозначаются соответствующими символами $2s$ и $3p$.

3. СПЕКТР

Квантовые числа n, l, m_l позволяют более полно описать спектр испускания (поглощения) атома водорода полученный в теории Бора.

В квантовой механике вводятся правила отбора, ограничивающие число возможных переходов в атоме, связанных с испусканием и поглощением света. Теоретически доказано, что для дипольного излучения электрона движущегося в центрально-симметричном поле ядра могут осуществляться только такие переходы для которых:

1. Изменение орбитального квантового числа l удовлетворяет условию $\Delta l = +1$.
2. Изменение магнитного квантового числа m_l удовлетворяет условию $\Delta m_l = 0, \pm 1$.

Для серии Лаймана соответствуют переходы:

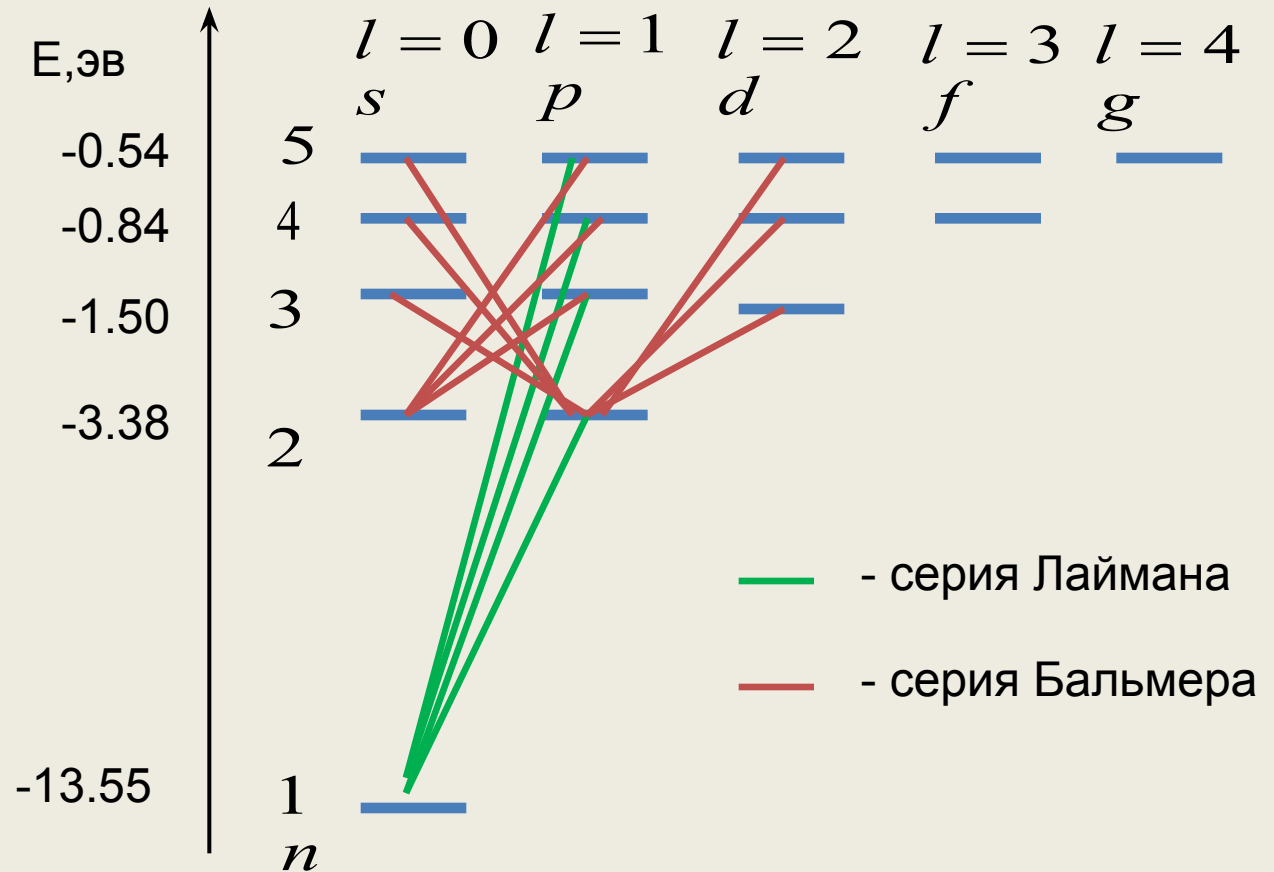
$$np \rightarrow 1s \quad (n=2,3,\dots)$$

Для серии Бальмера соответствуют переходы:

$$np \rightarrow 2s$$

$$ns \rightarrow 2p \quad (n=3,4,\dots)$$

$$nd \rightarrow 2p$$



Переход электронов из основного состояния в возбужденное обусловлен увеличением энергии атома и может проходить только при сообщении атому энергии извне, например за счет поглощения атомом фотона. Так как поглощающий атом находится обычно в возбужденном состоянии, то спектр атома водорода должен состоять из линий соответствующих переходам $1s \rightarrow np$ ($n=2, 3, \dots$), что находится в полном согласии с опытом.

Возможны иногда и слабые «запрещенные» линии. Например переход при $1s \rightarrow 2s$, но их вероятность ничтожна по сравнению с правильными.

СПИН ЭЛЕКТРОНА
СПИНОВОЕ КВАНТОВОЕ
ЧИСЛО

Опыты показали, что узкий пучок атомов водорода, заведомо находящихся в s -состоянии, в неоднородном магнитном поле расщепляется на два пучка. В этом состоянии момент импульса электрона равен нулю. Магнитный момент атома, связанный с орбитальным движением электрона пропорционален механическому моменту, поэтому он равен нулю, и магнитное поле не должно оказывать влияние на движение атомов водорода в основном состоянии, то есть расщепления быть не должно.

\bar{L}_e

– орбитальный механический момент электрона

Однако в дальнейшем, при применении спектральных приборов с большей

обнаруживают тонкую структуру (являются дуплетами) даже в отсутствие магнитного поля.

Для объяснения тонкой структуры спектральных линий было предположено что:

Электрон обладает собственным **неуничтожимым** механическим моментом импульса , **не связанным с движением** электрона в пространстве – **СПИНОМ**.

СПИН электрона (или другой микрочастицы) – квантовая величина, **у неё НЕТ классического аналога**, это внут-реннее неотъемлимое свойство электрона, подобное его заряду и массе.

Если электрону приписывается собственный механический момент импульса (спин) \vec{p}_s , то ему соответствует собственный магнитный момент \vec{p}_{ms}

По общим выводам квантовой механики спин квантуется по закону:

$$L_s = \hbar \sqrt{s(s+1)}$$

Где:

s – спиновое квантовое число

По аналогии с орбитальным моментом импульса, проекция может принимать значений. Так как в опытах Штерна и Герлаха наблюдались только две ориентации, то

Проекция спина на направление внешнего магнитного поля, являясь квантовой величиной, определяется выражением

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

Где: m_s – магнитное спиновое число. Которое может иметь только 2 значения:

Таким образом микрочастицы необходимо охарактеризовать дополнительной внутренней степенью свободы. И для полного описания состояния электрона в атоме наряду с главным, орбитальным и магнитным квантовыми числами необходимо задавать ещё и **маг-нитное спиновое квантовое число**.

ПРИНЦИП
НЕРАЗЛИЧИМОСТИ
ТОЖДЕСТВЕННЫХ ЧАСТИЦ

Если перейти от рассмотрения одной микрочастицы (электрона) к многоэлектронным системам, то проявляются особые свойства **НЕ ИМЕЮЩИЕ АНАЛОГОВ** в классической физике. Пусть квантово-механическая система состоит из одинаковых частиц, (например электронов), имеющих одинаковые характеристики (спин, массу, электрический заряд и другие внутренние характеристики (например квантовые числа)). Такие частицы называются **тождественными**.

Существует фундаментальный механизм квантовой механики – **ПРИНЦИП НЕРАЗЛИЧИМОСТИ ТОЖДЕСТВЕННЫХ ЧАСТИЦ**: невозможно экспериментально различить тождественные частицы.

В классической механике даже одинаковые частицы можно различить, например по положению в пространстве или импульсам, можно проследить за траекторией каждой частицы, и классическая механика систем состоящих из одинаковых частиц не отличается от механики систем состоящих из различных частиц.

В квантовой механике из соотношения неопределенностей вытекает, что для микрочастиц вообще неприменимо понятие траектории; состояние микрочастицы описывается волновой функцией, позволяющей определить лишь вероятность нахождения микрочастицы в той или иной точке пространства. Если же волновые функции двух тождественных частиц в пространстве перекрываются, то можно

ных частиц. Таким образом в квантовой механике тождественные частицы полностью теряют свою индивидуальность и становятся неразличимыми.

Принцип неразличимости вводится в квантовую механику как новый принцип являющийся фундаментальным.

Принцип неразличимости можно записать в виде:

$$|\psi(x_1, x_2)|^2 = |\psi(x_2, x_1)|^2$$

x_1 x_2

– совокупность пространственных и спиновых координат первой и

второй частиц.

$$\psi(x_1, x_2) = \pm \psi(x_2, x_1)$$

Принцип неразличимости тождественных частиц ведёт к определённому свойству симметрии волновой функции. Если при перемене частиц местами волновая функция не меняет знака, то она

Симметрия или антисимметрия определяется спином час-тиц. Частицы с полуцелым спином (электроны, протоны, нейтроны) описываются антисимметричными волновы-ми функциями и подчиняются статистике Ферми-Дирака. Эти частицы называются **фермионами**.

Частицы с нулевым или целочисленным спином (фотоны, π-мезоны) описываются симметричными волновыми функциями и подчиняются статистике Бозе-Эйнштейна, они называются **бозонами**.

Сложные частицы (например атомные ядра), состоящие из нечетного числа фермионов, являются фермионами (сум-марный спин полуцелый), а из четного числа – бозонами (суммарный спин – целый).

Зависимость характера симметрии волновых функций

ПРИНЦИП ПАУЛИ.
РАСПРЕДЕЛЕНИЕ
ЭЛЕКТРОНОВ В АТОМЕ ПО
СОСТОЯНИЯМ

Если тождественные частицы имеют одинаковые квантовые числа, то их волновая функция симметрична относительно перестановки частиц. Значит, два одинаковых фермиона, входящих в одну систему не могут находиться в одинаковых состояниях, так как для фермионов волновая функция должна быть антисимметрична.

Обобщая опытные данные, Паули сформулировал принцип:

Системы фермионов встречаются в природе только в состояниях описываемых антисимметричными волновыми функциями. (квантово-механическая формулировка принципа Паули).

Существует более простая формулировка принципа Паули:

В системе одинаковых фермионов любые два из них не

Состояние электрона в атоме однозначно определяется набором четырёх квантовых чисел:

- Главного n ($n = 1, 2, 3, \dots$)
- Орбитального l ($l = 0, 1, 2, \dots, n-1$)
- Магнитного m_l ($m_l = -l, \dots, -1, 0, 1, 2, \dots, +l$)
- Магнитного спинового m_s ($m_s = -\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}$)

Распределение электронов в атоме подчиняется принципу Паули: в одном и том же атоме не может быть более одного электрона с одинаковым набором четырёх квантовых чисел n, l, m_l, m_s то есть:

$$Z(n, l, m_l, m_s) = 1 \text{ или } 0$$

$$Z(n, l, m_l, m_s)$$

Где $Z(n, l, m_l, m_s)$ – число электронов находящихся в квантовом состоянии, описываемом набором четырёх квантовых чисел и принцип Паули

электрона, связанные в одном и том же атоме, различаются значениями по крайней мере одного квантового-го числа.

Данному n соответствует n^2 различных состояний, отличающихся значениями l и m_l . Квантовое число s принимает два значения, значит число электронов находящихся в состояниях определяемых данным главным квантовым числом:

$$Z(n) = \sum_{l=0}^{n-1} 2(2l+1) = 2n^2$$

Совокупность электронов в многоэлектронном n атоме, имеющих одно и то же главное квантовое число называют – **электронной оболочкой**.

В каждой из электронных оболочек электроны

ляются по **подоболочкам** соответствующих l
данному l . Так как орбитальное квантовое число
принимает значения от 0 до l , число
подоболочек равно порядко-вому номеру оболочки
. Количество электронов в подоболочке
определяется магнитным и магнитным спиновым
квантовыми числами, максимальное число $2(2l + 1)$
электронов в подоболочке с данным l равно

.

ПЕРИОДИЧЕСКАЯ СИСТЕМА
ЭЛЕМЕНТОВ Д.И.
МЕНДЕЛЕЕВА

Принцип Паули, лежащий в основе систематики заполнения электронных состояний в атомах, позволяет объяснить **ПЕРИОДИЧЕСКУЮ СИСТЕМУ Д. И. МЕНДЕЛЕЕВА (1869)** – фундаментальный закон природы.

Д. И. Менделеев ввёл понятие порядкового номера химического элемента Z , равному числу протонов в ядре и общему числу электронов в электронной оболочке атома. Расположив химические элементы по мере возрастания порядковых номеров, он получил периодичность в изменении химических свойств элементов.

Так как химические и некоторые физические свойства элементов объясняются внешними (валентными) электронами в атомах, то периодичность свойств химических элементов

каждый следующий элемент образован из предыдущего прибавлением к ядру одного протона, и электрона в электронную оболочку. Взаимодействием электронов пренебрегаем. Рассмотрим атомы химических элементов в основном состоянии.

- Для водорода H единственный электрон находится в состоянии $1s$, характеризуемом квантовыми числами: $l=0, m_l=0, m_s=\pm 1/2$ (ориентация спина произвольна).
- Оба электрона атома гелия He находятся в состоянии $1s$, но с антипараллельной организацией спина. Электронная конфигурация записывается как $1s^2$ (2-1s электрона). На гелии заканчивается заполнение K-оболочки, что соответствует завершению I периода Периодической системы

- Третий электрон атома лития Li ($Z=3$), согласно принци-пу Паули уже не может разместиться в целиком запол-ненной K-оболочке и занимает наинищее энергетиче-ское состояние с (L-оболочка), то есть $2s$ состоя-ние. Электронная конфигурация для атома лития $1s^2 2s$. Атомом лития открывается второй период периоди-ческой системы Менделеева. Четвертым электроном бериллия Be ($Z=4$) заканчивается заполнение оболочки $2s$ и так далее...

Таким образом, открытая Менделеевым периодичность в химических свойствах элементов объясняется повто-ряемостью в структуре внешних оболочек у атомов родственных элементов.