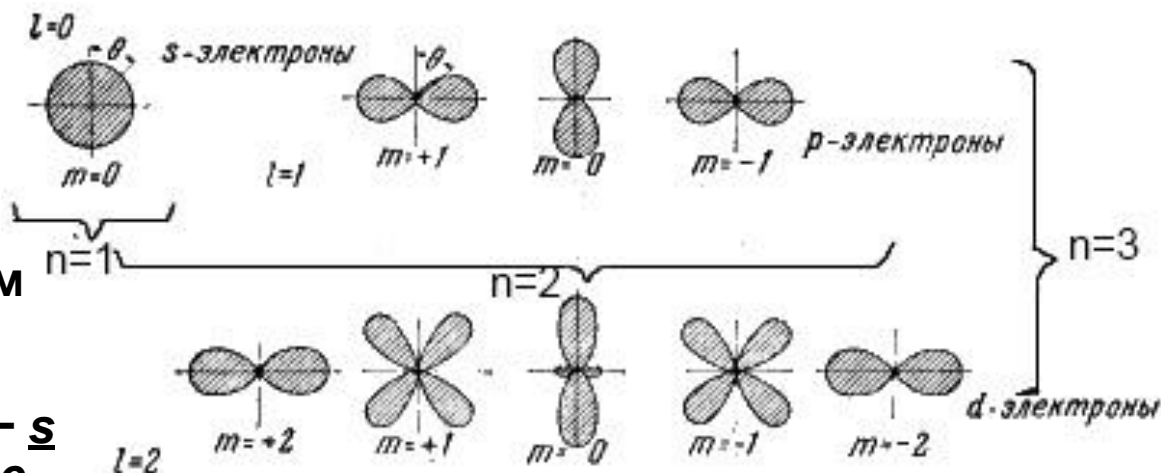


Лекция № 8 (16.05.12г.)
Тема «Основы атомной физики.
Основы квантовой механики»

- 7) Кратность вырождения уровней энергии (продолжение).
- 8) Спин электрона. опыты *Штерна и Герлаха*.
Спиновое квантовое число.
- 9) Эксперименты, связанные с квантовой механикой:
Дж. Томсона, дифракция электронного пучка на двух щелях.
- 10) Соотношения неопределенностей Гейзенберга.
- 11) Квантовые статистические распределения микрочастиц: функции распределения *Ферми-Дирака* и *Бозе-Эйнштейна*.
- 12) Принцип *Паули*.
- 13) Строение многоэлектронных атомов. Периодический закон *Менделеева*.

7) Кратность вырождения уровней энергии

Полярные диаграммы плотностей вероятности для s -, p -, d - и f -электронов

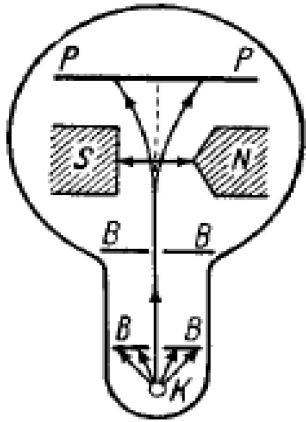


Состояние электрона, характеризующееся квантовым числом $l = 0$, называется s -состоянием ($1s, 2s, \dots, ns, \dots$), электрон в этом состоянии — s -электрон, $l = 1$ — p -состояние, $l = 2$ — d -состояние и т.д.

- Электрон при движении "размазан" по всему объему, образуя электронное облако, плотность (густота) которого характеризует вероятность нахождения электрона в различных точках объема атома. Квантовые числа n и l характеризуют размер и форму электронного облака, а квантовое число m характеризует ориентацию электронного облака в пространстве. Каждой комбинации l и m соответствует определенное распределение вероятности $f = |\Psi|^2$ обнаружения электрона в различных точках пространства («электронное облако»).
- Уровень энергии - g -кратно вырожденный, если система в различных квантовых состояниях с Ψ_{nlm} имеет одинаковую энергию E_n .

Кратность вырождения g_n =
$$\sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = 1+3+5+\dots+(2n-1) = \frac{1+2n-1}{2} \cdot n = n^2$$

8) Спин электрона. опыты Штерна и Герлаха. Спиновое квантовое число



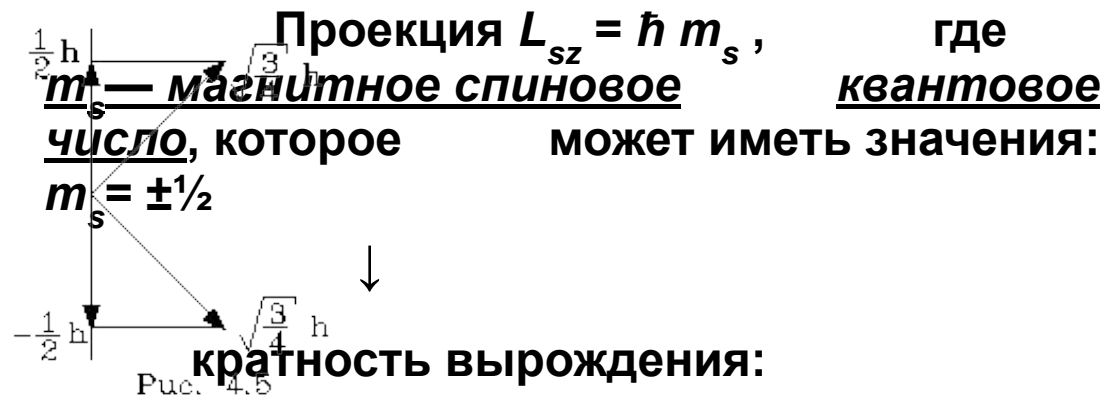
- Электрон обладает *собственным неуничтожимым механическим моментом импульса*, не связанным с движением электрона в пространстве, — спином.
- Спин электрона (и всех других микрочастиц) — внутреннее неотъемлемое квантовое свойство микрочастицы.

Спин обнаружен при прохождении узкого пучка атомов водорода, находящихся в s -состоянии ($l = 0$) через сильное неоднородное магнитное поле.

$L_0 = \hbar \sqrt{l(l+1)} = 0$ → магнитное поле не должно влиять на движение атомов. Но пучок атомов *расщеплялся на два*, → обнаружено пространственное квантование механического момента L , не связанного с орбитальным движением электрона. → *Это – квантование спина.*

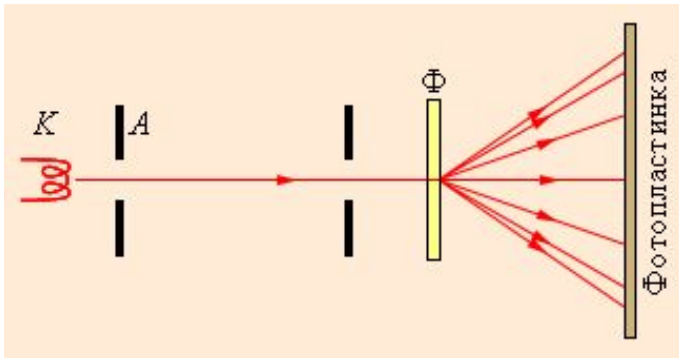
- $P m_{sz} = g_s L_{sz}$, $L_{sz} = \pm \hbar/2$, $g_s = e/m$
- Спин L_s квантуется по закону: $L_s = \hbar \sqrt{s(s+1)}$ где s - спиновое квантовое число

Из опыта → $2S + 1 = 2$ → $S = 1/2$ → $L_{sz} = \sqrt{3/4} \cdot \hbar$

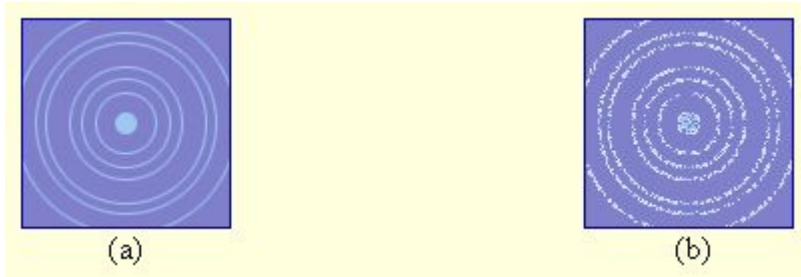


$$g_n = 2 n^2$$

9) Эксперименты, связанные с квантовой механикой: Дж. Томсона



Упрощенная схема опытов Дж. Томсона: К – накаливаемый катод, А – анод, Φ – фольга из золота



Картина дифракции электронов на образце при длительной экспозиции (а) и при короткой экспозиции (б).

- Опыты - подтверждение гипотезы де Бройля: так же как свету присущи одновременно свойства частицы (корпускулы) и волны (двойственная корпускулярно-волновая природа света), так и электроны и любые другие частицы материи наряду с корпускулярными обладают волновыми свойствами.

- Фазовая скорость волн де Бройля:

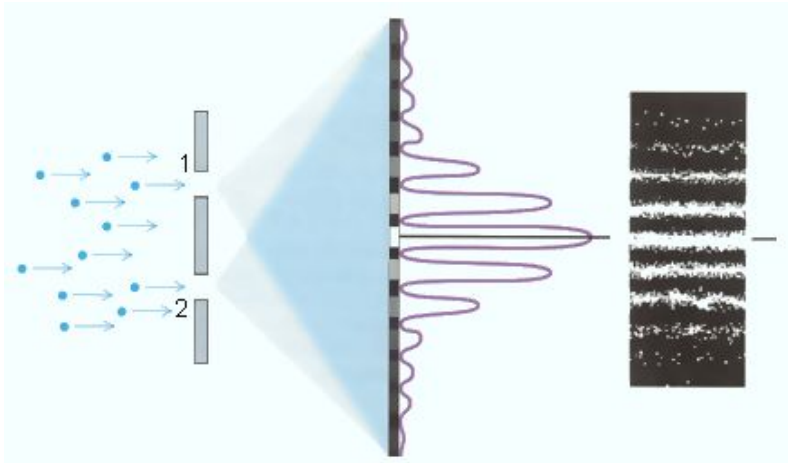
$$v_{\text{фаз}} = \frac{\omega}{k} = \frac{\hbar\omega}{\hbar k} = \frac{E}{p} = \frac{mc^2}{mv} = \frac{c^2}{v}$$

- Групповая скорость волн де Бройля (для свободной частицы):

$$u = \frac{dE}{dp} = \frac{pc^2}{\sqrt{m^2c^4 + p^2c^2}} = \frac{pc^2}{E} = \frac{mvc^2}{mc^2} = v$$

- Групповая скорость волн де Бройля равна скорости частицы или - волны де Бройля перемещаются вместе с частицей.

9) Эксперименты, связанные с квантовой механикой: *дифракция электронного пучка на двух щелях*



Если в опыте закрыть одну из щелей, то интерференционные полосы исчезнут, и фотопластинка регистрирует распределение электронов, протифрагировавших на одной щели (рис.). В этом случае все электроны, долетающие до фотопластинки, проходят через единственную открытую щель. Если же открыты обе щели, то появляются интерференционные полосы.

Вопрос: через какую из щелей пролетает тот или иной электрон?

Ответ: электрон пролетает через обе щели!!!

- Дебройлевская волна каждого отдельного электрона проходит одновременно через оба отверстия, в результате чего и возникает интерференция. *Поток электронов дает интерференцию, т. е. электрон, как и фотон, интерферирует сам с собой.*

Объяснить наблюдаемое распределение интенсивности можно с помощью принципа суперпозиции для волновой функции: если, квантовая система (электрон) может находиться в состояниях, описываемых волновыми функциями Ψ_1 и Ψ_2 , то она может также находиться и в состоянии $\Psi = c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2$

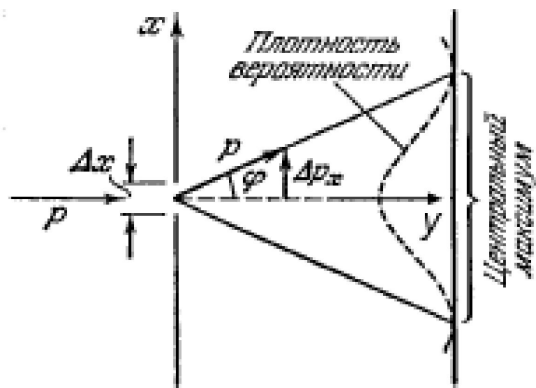
Сложение волновых функций (амплитуд вероятностей), а не вероятностей (определяемых квадратами модулей волновых функций) принципиально отличает квантовую теорию от классической статистической теории

10) Соотношения неопределенностей Гейзенберга

- Двойственная корпускулярно-волновая природа микрочастиц определяет еще одно свойство микрообъектов — **соотношение неопределенностей Гейзенберга**:
- Микрочастица не может иметь одновременно определенную координату (x, y, z) и определенную соответствующую проекцию импульса (p_x, p_y, p_z), причем неопределенности этих величин удовлетворяют соотношениям

$\Delta x \Delta p_x \geq h$, $\Delta y \Delta p_y \geq h$, $\Delta z \Delta p_z \geq h$ (произведение неопределенностей координаты и соответствующей ей проекции импульса не может быть меньше величины порядка h)

- + соотношение для неопределенности энергии ΔE некоторого состояния системы и промежутка времени Δt , в течение которого это состояние существует: $\Delta E \Delta t \geq h$ (система, имеющая среднее время жизни Δt , не может быть охарактеризована определенным значением энергии).



Соотношение неопределенностей проявляется в дифракции частиц. До прохождения частицы через щель $p_x = 0 \rightarrow \Delta p_x = 0$, а координата x - полностью неопределенная. В момент прохождения частицы через щель неопределенность координаты x частицы = ширине щели Δx . Частицы будут двигаться в пределах 2φ (из-за дифракции), где φ — угол, соответствующий 1-му дифракционному минимуму. $\rightarrow \Delta p_x = p = h$. С учетом $\Delta x \sin \varphi = \lambda \rightarrow \Delta x \Delta p_x = h \rightarrow \Delta x \Delta p_x \geq h$ (т.к. часть частиц попадает за пределы 1-го дифракционного максимума).

11) Квантовые статистические распределения микрочастиц: функции распределения Ферми-Дирака и Бозе-Эйнштейна

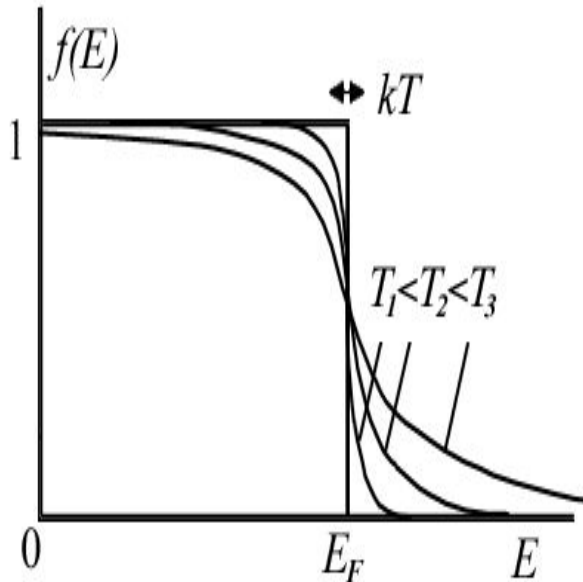


График
функции заполнения
состояний
электронами Ферми-
газа при различных
температурах
($f(E)$ - вероятность
заполнения, E_F -
энергия Ферми)

Функция распределения Ферми-Дирака –
распределение частиц на энергетических
уровнях (напр., электронов в твердом теле):

$$n = \frac{1}{e^{\frac{E-F}{kT}} + 1}$$

где F – энергия Ферми,
 n – число частиц на
уровне E

Функция распределения Бозе-Эйнштейна –
распределение частиц на энергетических
уровнях (напр., фоонов (квантов энергии
колебаний осциллятора))

$$n = \frac{1}{e^{\frac{E-F}{kT}} - 1}$$

Напр., в квантовой теории теплоемкости кристаллов
кристалл рассматривается как набор независимых
осцилляторов с индивидуальными собственными
частотами ω_j .

Тогда из распределения Бозе-Эйнштейна →
среднее число квантов энергии, "запасенных" в
осцилляторе $\langle n \rangle = 1 / (\exp(\hbar\omega / kT) - 1)$

12) Принцип Паули

- **Частицы, имеющие одинаковые физические свойства (массу, электрический заряд, спин и т.д.) - тождественные.**
- **Принцип неразличимости тождественных частиц: тождественные частицы экспериментально различить невозможно (т.к. понятие траектории лишено смысла, то частицы полностью теряют свою индивидуальность и становятся неразличимыми).**
- **Математическая запись принципа неразличимости:**

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

- **Если $\psi(x_1, x_2) = \psi(x_2, x_1)$ (волновая функция системы при перемене частиц местами не меняет знака), то функция называется симметричной. Если $\psi(x_1, x_2) = -\psi(x_2, x_1)$, то функция - антисимметричная.**
- **Частицы с полуцелым спином (напр., электроны, протоны, нейтроны) описываются антисимметричными волновыми функциями и подчиняются статистике Ферми–Дирака: частицы называются фермионами.**
- **Частицы с нулевым или целочисленным спином (напр., π - мезоны, фотоны, фононы) описываются симметричными волновыми функциями и подчиняются статистике Бозе–Эйнштейна: частицы называются бозонами.**

12) Принцип Паули

- **Первая формулировка принципа Паули:** Системы электронов (фермионов) встречаются в природе только в состояниях, описываемых антисимметричными волновыми функциями. →

2 одинаковых электрона (фермиона), входящих в одну систему, не могут находиться в одинаковых состояниях (иначе при перестановке волновая функция была бы четной).

- **Вторая формулировка принципа Паули:** В одном и том же атоме не может быть более одного электрона с одинаковым набором четырех квантовых чисел n, l, m, m_s

Общая волновая функция двухэлектронной системы $\Psi(x_1, x_2)$

с учетом принципа тождественности и получения антисимметричной функции:

$$\Psi(x_1, x_2) = \Psi^+(x_1) \cdot \Psi^{++}(x_2) - \Psi^{++}(x_1) \cdot \Psi^+(x_2)$$

вывод

если допустить, что электроны находятся в одинаковых состояниях

$\Psi^+(x) = \Psi^{++}(x)$ то функция тождественно обращается в нуль, что

не может быть → два электрона системы (или любое количество электронов системы) не могут находиться в одинаковых состояниях: принцип запрета Паули.

Бозоны не подчиняются принципу Паули.

Т.к. фермионы описываются антисимметричными волновыми функциями

→ фермионы имеют полуцелый спин ($\hbar/2$). Бозоны либо не имеют

вообще спина, либо имеют целый спин ($N\hbar$). Напр., фотон имеет $s = \hbar$.

13) Строение многоэлектронных атомов

- 3 принципа строения атомов:

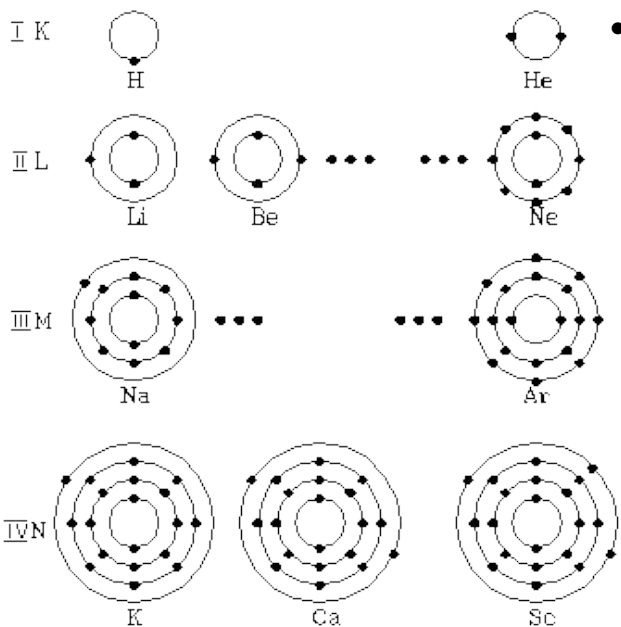
- Принцип дискретности энергетических уровней атомов;
- Принцип запрета Паули;
- Принцип минимума энергии.

Состояние с минимальной энергией называется *основным состоянием атома*.

Модель: сложный атом состоит из совокупности атомов водорода, ядра которых совмещены в одну точку (чтобы не учитывать искажения расположение энергетических уровней из-за взаимодействия между собой электронов в электронных оболочках атомов).

- Если проходить атомы в порядке возрастания у них числа электронов и учесть принцип запрета Паули, согласно которому в каждом квантовом состоянии может находиться лишь один электрон, то каждому значению n может соответствовать лишь $2n^2$ электронов. **Что это значит? Это значит, что сложные атомы имеют слоистое (оболочечное) строение:**
- Совокупность электронов в многоэлектронном атоме, имеющих одно и тоже главное квантовое число n , называется *электронной оболочкой*.

13) Строение многоэлектронных атомов. Периодический закон Менделеева



• Максимальное число электронов, находящихся в состояниях, определяемых главным квантовым

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

Каждому значению n по мере его возрастания будет соответствовать слой из $2n^2$ электронов.

В каждой из оболочек электроны распределяются по *подоболочкам*, соответствующим данному l . Т.к. l принимает значение от 0 до $n-1$, то *число подоболочек равно порядковому номеру n оболочки*.

Количество электронов в подоболочке определяется квантовыми числами m и m_s : *максимальное число электронов в подоболочке с данным l равно $2(2l+1)$.*

Самый нижний слой ($n = 1$) называют *K - слоем (или K - оболочкой)*, слой при $n = 2$ называют *L - слоем (или L - оболочкой)* и т.д.

Главное квантовое число	1		2			3			4				5				
Символ оболочки	K		L			M			N				O				
Максимальное число электронов в оболочке	2		8			18			32				50				
Орбитальное квантовое число l	0	0	1	0	1	2	0	1	2	3	0	1	2	3	4		
Символ подоболочки	$1s$	$2s$	$2p$	$3s$	$3p$	$3d$	$4s$	$4p$	$4d$	$4f$	$5s$	$5p$	$5d$	$5f$	$5g$		
Максимальное число электронов в подоболочке	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	14	18		

**СПАСИБО
ЗА ВНИМАНИЕ**

УЧИМСЯ ВМЕСТЕ!