

Сделал Смирнов Олег гр. Э7-41 2016г

Тепловое излучение. Интегральные и спектральные характеристики излучения. Закон Кирхгофа. Закон смещения Вина. Закон Стефана-Больцмана.....	2
Дискретный характер испускания и поглощения электромагнитного теплового излучения веществом. Формула Планка для равновесного теплового излучения	4
Фотоэффект, его законы. Уравнение Эйнштейна для фотоэффекта. Дуализм волновых и корпускулярных свойств излучения.	5
Эффект Комптона.....	6
Опыты по рассеянию альфа-частиц, формула Резерфорда. Ядерная модель атома. Постулаты Бора.	7
Корпускулярно - волновой дуализм материи. Гипотеза де Бройля. Опыты по дифракции микрочастиц.	10
Опыты по дифракции микрочастиц.....	11
Волны де Бройля. Границы применимости квантовой механики.	13
Волновая функция, её статистический смысл и условия, которым она должна удовлетворять. Принцип суперпозиции в квантовой механике. Вектор плотности потока вероятности.	14
Уравнение Шредингера, его свойства:	16
Частица в одномерной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками. Квантование энергии. Плотность вероятности для различных энергетических уровней.....	17
Частица в трёхмерном потенциальном ящике. Энергетический спектр частицы. Понятие о вырождении состояний.	19
Движение микрочастицы в области одномерного потенциального порога.	21
Уравнение Шредингера для гармонического осциллятора, анализ его решений.....	26
Представление физических величин операторами. Собственные функции и собственные значения операторов. Вычисление средних значений физических величин.....	27
Основные операторы физических величин:	28
Операторы импульса и момента импульса. Их собственные значения и собственные функции.	29
Коммутирующие операторы. Условия возможности одновременного измерения разных механических величин. Соотношение неопределённости Гейзенберга.	30
Механический и магнитный моменты атома. Опыт Штерна и Герлаха.	32
Опыт Штерна и Герлаха.	32
Орбитальный, спиновый и полный механический и магнитный моменты электрона.....	33
Эффект Зеемана:	35

Тепловое излучение. Интегральные и спектральные характеристики излучения. Закон Кирхгофа. Закон смещения Вина. Закон Стефана-Больцмана.

Тепловым излучением (ТИ) называется излучение ЭМВ веществом за счет его внутренней энергии.

Нетепловое излучение (за счет внешней энергии) называется люминесценцией.

Характеристики излучения:

Интегральные: (количественные)

- a) Энергия излучения W
- b) Поток излучения (мощность) $\Phi_T = \frac{dW}{dt}$, Вт – энергия излучения, переносимая через элементарную поверхность за время dt
- c) Энергетическая светимость $R_T = \frac{d\Phi}{dS}$ – отношение потока через элементарную поверхность к ее площади, $\frac{\text{Вт}}{\text{м}^2}$

Спектральные: (описывающие распределение по длинам волн, частотам)

- a) Спектральная плотность энергетической светимости (испускательная способность):
 $r_{\lambda,T} = \frac{d\Phi}{dS d\lambda}$, $\frac{\text{Вт}}{\text{м}^3}$ – энергетическая светимость излучения в интервале $[\lambda - d\lambda; \lambda + d\lambda]$

$$R_T = \int_0^{\infty} r_{\lambda,T} d\lambda$$

- b) Поток излучения с площади S в интервале длин волн $[\lambda_1; \lambda_2]$

$$\Phi_{\lambda,T} = \int_S \int_{\lambda_1}^{\lambda_2} r_{\lambda,T} d\lambda dS$$

$$\lambda = \frac{2\pi c}{\omega}; d\omega = \frac{2\pi c}{\lambda^2} d\lambda; r_{\lambda,T} = \frac{2\pi c}{\lambda^2} r_{\omega,T}$$

Поглощательная способность тела: (в интервале $[\omega - d\omega; \omega + d\omega]$) $a_{\omega,T} = \frac{\varphi_{\omega,T}}{\varphi_{\omega,T}} < 1$,
 ($\varphi_{\omega,T}$ – поглощенный поток)

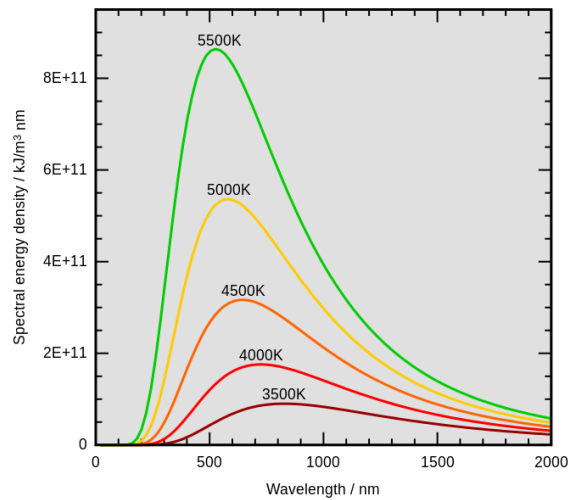
Абсолютно черное тело: $a_{\omega,T}^* = 1$

Закон Кирхгофа: $\frac{r_{\omega,T}}{a_{\omega,T}} = r_{\omega,T}^* = f(\omega, T)$, отношение излучательной способности любого тела к его поглотительной способности одинаково для всех тел при данной температуре для данной частоты и не зависит от их формы и химической природы.

Закон смещения Вина: $f(\omega, T) = \omega^3 F\left(\frac{\omega}{T}\right)$,
 $\left(F\left(\frac{\omega}{T}\right) = F\left(\frac{2\pi c}{\lambda T}\right)\right)$ из чего следует
 $\lambda_{max} T = const = b$

λ_{max} – длина волны которой соответствует максимум отношения испускательной и поглотительной способностей при данной температуре.

$b = 2,9 \cdot 10^{-3}$ мК, постоянная Вина



Закон Стефана-Больцмана: $R_T^* = \sigma T^4$, $\sigma = 5,67 \cdot 10^{-8} \frac{\text{Вт}}{\text{м}^2 \text{К}^4}$ постоянная Стефана-Больцмана.

Для неабсолютно черного: $R_T = \gamma \sigma T^4$, $\gamma = \gamma(T) < 1$

$u_T = \int_0^\infty u_{\omega,T} d\omega$ – объемная плотность энергии равновесного теплового излучения.

$u_{\omega,T}$ – спектральная объемная плотность энергии равновесного ТИ.

$dn_\omega = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3} d\omega$ – объемная плотность узлов стоячих волн.

$$u_T = \int_0^\infty u_{\omega,T} d\omega = KT \int_0^\infty dn_\omega$$

Формула Рэлея-Джинса:

$$u_{\omega,T} = KT \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3}$$

Дискретный характер испускания и поглощения электромагнитного теплового излучения веществом. Формула Планка для равновесного теплового излучения

Дискретный характер испускания и поглощения электромагнитного теплового излучения веществом. (Гипотеза Планка): ТИ излучается и поглощается порциями, энергия которых пропорциональна частоте: $\varepsilon = \hbar \omega$ ($\hbar = 1,055 * 10^{-34}$ Дж * с)

Формула Планка для равновесного ТИ:

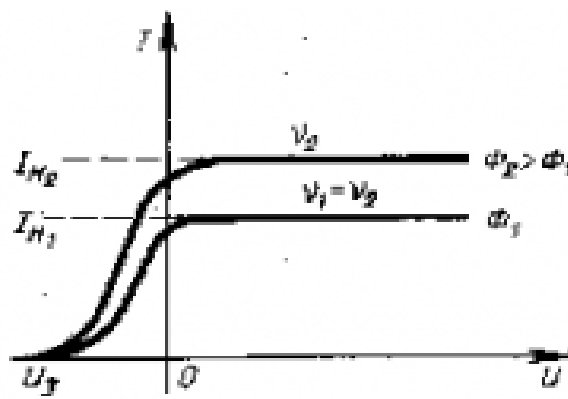
$$r^*_{\omega,T} = \frac{\hbar \omega^3}{4\pi^2 c^2} * \frac{1}{\exp\left[\frac{\hbar \omega}{kT}\right] - 1}$$

$$u_{\omega,T} = \frac{\hbar \omega^3}{\pi^2 c^3} * \frac{1}{\exp\left[\frac{\hbar \omega}{kT}\right] - 1}$$

Фотоэффект, его законы. Уравнение Эйнштейна для фотоэффекта. Дуализм волновых и корпускулярных свойств излучения.

Фотоэффектом называются различные процессы поглощения фотона квантовой системой. Фотоэффект может быть внешним (эмиссия электронов с поверхности металла), внутренним (образование в полупроводнике пары электрон-дырка, что повышает концентрацию носителей тока, следовательно, общую электропроводность, при поглощении фотона), также к фотоэффекту относится фотоионизация – ионизация атома при поглощении фотона.

На установке для исследования внешнего фотоэффекта током насыщения называют максимальный ток, достигаемый, когда все эмиссированные электроны попадают с катода на анод, запирающим напряжением – напряжение, при котором пропадает фотоэффект.



Законы фотоэффекта:

- Ток насыщения пропорционален потоку падающего излучения.
- $T_{max} = eU_{зп}$ не зависит от интенсивности излучения, но зависит от материала фотокатода, и линейно зависит от частоты падающего света (линейно возрастает с увеличением частоты).
- Для каждого материала фотокатода существует красная граница фотоэффекта – такая длина волны, что при увеличении длины волны падающего света больше красной границы фотоэффект прекращается.

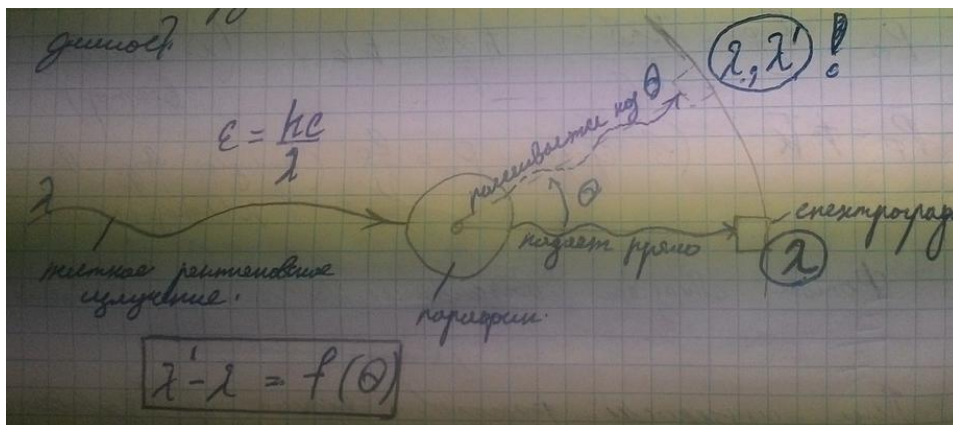
Работа выхода: с точки зрения квантовой физики электроны в металле находятся в потенциальной яме. Энергия электрона внутри ямы принимает дискретные значения, наибольшее из которых называется энергией Ферми. Работой выхода из металла называется энергия, которую нужно придать электрону Ферми для вылета из потенциальной ямы металла (при условии, что электрон не теряет энергию на взаимодействие с другими электронами и дефектами кристаллической решетки)

Уравнение Эйнштейна:

$$T_{max} = \hbar\omega - A_{\text{вых}}$$

Дуализм волновых и корпускулярных свойств излучения: ТИ является как потоком единичных неделимых частиц, так и волнами, способными к дифракции, интерференции и поляризации.

Эффект Комптона.



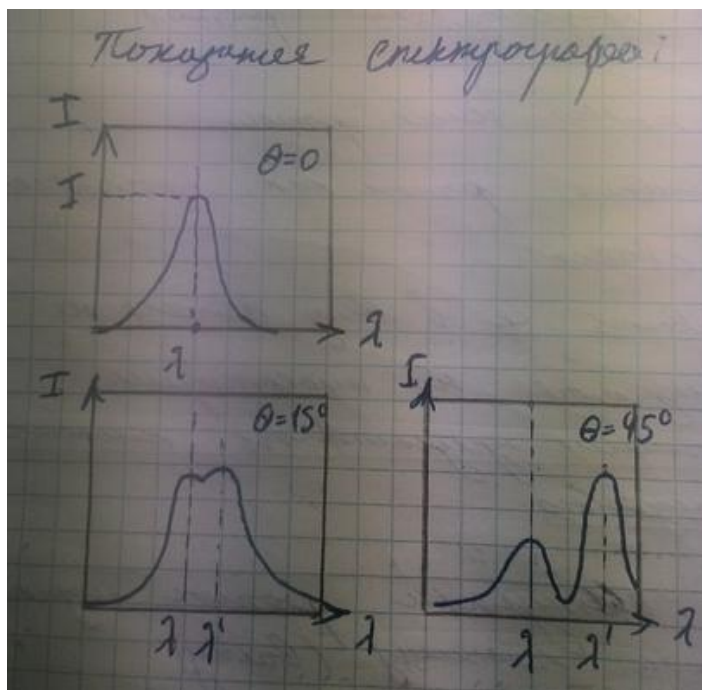
Комптон обнаружил, что в рассеянном монохроматическом излучении можно обнаружить излучение с длиной волны большей, чем основная.

Эффект Комптона объясняется упругим рассеиванием фотонов на свободных электронах вещества.

Часть импульса фотон передает электрону, от чего уменьшается энергия фотона и увеличивается его длина волны.

Определим зависимость

$\lambda' - \lambda = f(\theta)$, записав уравнения законов сохранения энергии и импульса для системы из электрона и фотона, а также релятивистского инварианта для электрона (k – волновой вектор электрона, $k = \frac{2\pi}{\lambda}$)



$$\begin{cases} \hbar\omega + mc^2 = E_{\text{эл}} + \hbar\omega' \\ \hbar\vec{k}_\phi = \hbar\vec{k}'_\phi + \vec{P}_e \\ E_{\text{эл}}^2 - P_e^2 c^2 = m^2 c^4 \end{cases}$$

Решив данную систему, получим: $\lambda' - \lambda = \frac{2\pi\hbar}{mc} (1 - \cos\theta) = \lambda_c (1 - \cos\theta)$

$\lambda_c = 2,43 \cdot 10^{-12} \text{ м}$ - длина волны Комптона для электрона.

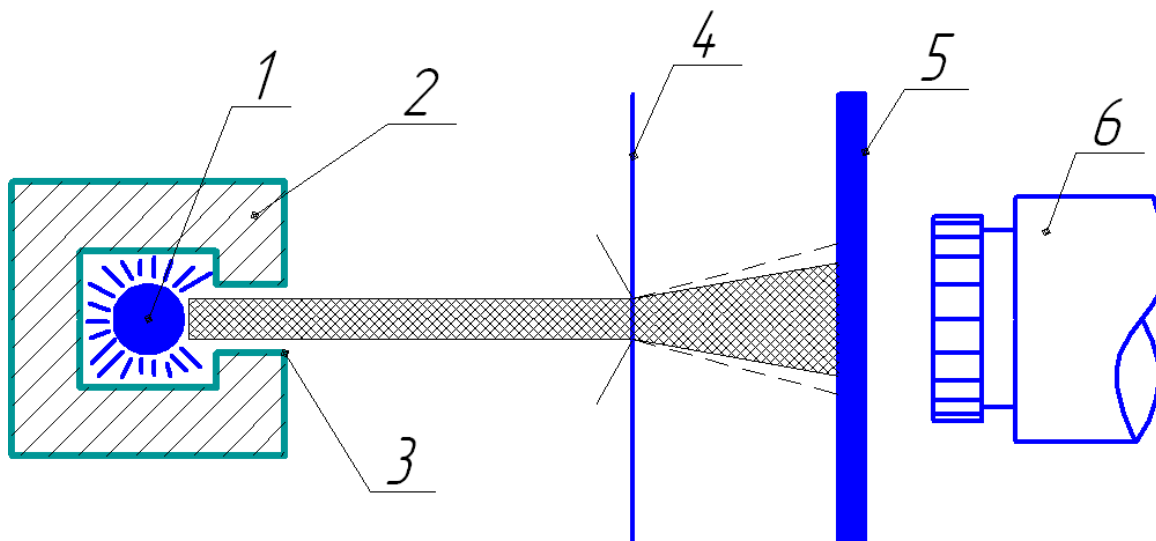
Мы не наблюдаем комптоновского рассеяния на ядрах, поскольку из-за их большой массы величина комптоновской длины волны для ядер слишком мала. Эффект комптоновского рассеивания на электронах мы наблюдаем только в рентгеновском излучении, потому что длина рентгеновского излучения сопоставима с длиной волны Комптона.

Опыты по рассеянию альфа-частиц, формула Резерфорда. Ядерная модель атома. Постулаты Бора.

Опыты по рассеянию альфа-частиц: Эрнест Резерфорд (1871 – 1937) проводил опыты по изучению прохождения альфа-частиц через тонкие металлические пластины золота и платины.

Альфа-частица – это полностью ионизированный атом гелия. Масса альфа-частицы примерно в 8000 раз больше массы электрона. Положительный заряд равен по модулю удвоенному заряду электрона $2e$. Скорость альфа-частицы составляет $1/15$ скорости света или $2 \cdot 10^7$ м/с.

Альфа-частицы испускались радиоактивным источником 1, помещённым внутри свинцового цилиндра 2 с узким каналом 3. Узкий пучок альфа-частиц из канала падал на фольгу 4 из исследуемого материала, перпендикулярно к поверхности фольги. Из свинцового цилиндра альфа-частицы проходили только через канал, а остальные поглощались свинцом. Прошедшие сквозь фольгу и рассеянные ею альфа-частицы попадали на полупрозрачный экран 5, который был покрыт люминесцирующим веществом (сульфатом цинка). Это вещество было способно светиться при ударе об него альфа-частицы. Столкновение каждой частицы с экраном сопровождалось вспышкой света. За экраном находился микроскоп 6. Чтобы не происходило дополнительного рассеяния альфа-частиц в воздухе, весь прибор размещался в сосуде с достаточным вакуумом.

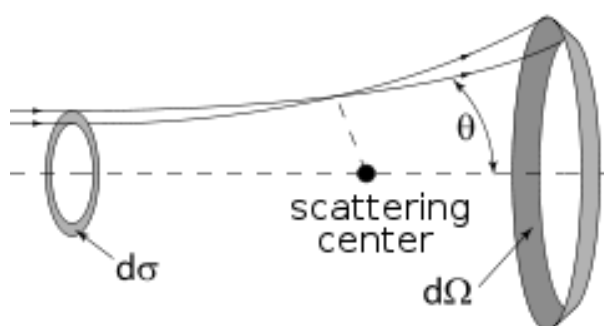


Наблюдаемая на экране картина позволила заключить, что большинство альфа-частиц проходит сквозь золотую фольгу без заметного изменения направления их движения. Однако некоторые частицы отклонялись на большие углы от первоначального направления альфа-частиц (порядка $135^\circ \dots 150^\circ$) и даже отбрасывались назад. Исследования показали, что при прохождении альфа-частиц сквозь фольгу примерно на каждые 10000 падающих частиц только одна отклоняется на угол более 10° от первоначального направления движения.

Тот факт, что многие альфа-частицы проходили сквозь фольгу, не отклоняясь от своего направления движения, говорит о том, что атом не является сплошным образованием. Так как масса альфа-частицы почти в 8000 раз превосходит массу электрона, то электроны, входящие в состав атомов фольги, не могут заметно изменить траекторию альфа-частиц. Рассеяние альфа-частиц может вызывать положительно заряженная частица атома — атомное ядро.

Формула Резерфорда

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{Z_1 Z_2 e^2}{2mv^2} \right)^2 \frac{1}{\sin^4 \frac{\theta}{2}}$$



(частицы, проходящие через правое кольцо, попадают в левое кольцо)

Z_1 и Z_2 — заряды налетающей частицы и мишени, m , v — масса и скорость налетающей частицы, θ — двумерный угол рассеяния, e — элементарный заряд,

$d\theta$ — дифференциальное сечение, $d\Omega$ — телесный угол.

Ядерная модель атома

Резерфорд на основании результатов эксперимента по рассеянию α -частиц на атомах металлической фольги обосновал планетарную модель строения атома. Согласно этой модели, атом состоит из тяжёлого положительно заряженного ядра очень малых размеров ($\sim 10^{-15}$ м), вокруг которого по некоторым орбитам движутся электроны. Радиусы этих орбит имеют размеры $\sim 10^{-10}$ м. Наличие у электрона заряда делает планетарную модель противоречивой с точки зрения классической физики, т.к. вращающийся вокруг ядра электрон, как и любая ускоренно движущаяся заряженная частица, должен излучать электромагнитные волны. Спектр такого излучения должен быть непрерывным. В опытах наблюдается линейчатый спектр излучения атомов. Кроме того, непрерывное излучение уменьшает энергию электрона, и он из-за уменьшения орбиты обязан был бы упасть на ядро.

Постулаты Нильса Бора (водородоподобных атомов)

Нильс Бор «спас» планетарную модель для атома водорода, сформулировав три постулата:

1. В атоме существуют стационарные состояния, в которых излучение отсутствует. Этим состояниям соответствуют стационарные орбиты, движение электронов по которым не сопровождается излучением ЭМВ.
2. Электрон на стационарной орбите имеет дискретные значения орбитального момента импульса: $mvr = n\hbar$, $n = 1, 2, 3 \dots$
3. При переходе 1 электрона с одной орбиты на другую выделяется/поглощается 1 фотон энергии $\hbar\omega = \Delta E$

$$\begin{cases} mvr = n\hbar \\ ma = Fe \end{cases} \Rightarrow \begin{aligned} v &= \frac{n\hbar}{mr} \\ \frac{mv^2}{r} &= \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \end{aligned} \Rightarrow r = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2 n^2}{Zme^2} \Big|_{\substack{Z=1 \\ n=1}} = 0,529\text{\AA} - \text{боровский радиус}$$

$$E = q\varphi = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} + \frac{Ze^2}{8\pi\epsilon_0 r} = -\frac{Ze^2}{8\pi\epsilon_0 r} = -\frac{Z^2 me^4}{32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2} \frac{1}{n^2}$$

Корпускулярно - волновой дуализм материи. Гипотеза де Бройля. Опыты по дифракции микрочастиц.

Де Бройль предположил, что любая частица вещества обладает волновыми свойствами при движении.

Частота волны де Бройля: $\omega_B = E/\hbar$

Длина волны де Бройля: $\lambda_B = 2\pi\hbar/p$

$$\begin{cases} E^2 - P^2 c^2 = m_0^2 c^4 \\ mc^2 = E_k + m_0 c^2 \end{cases} \Rightarrow p = \sqrt{2m_0 E_k} \sqrt{1 + \frac{E_k}{2m_0 c^2}}$$

$$\lambda_B = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2m_0 E_k} \sqrt{1 + \frac{E_k}{2m_0 c^2}}}$$

Для нерелятивистских частиц: $p = \sqrt{2m_0 E_k}$, $\lambda_B = 2\pi\hbar/\sqrt{2m_0 E_k}$

Электрон ($E_k = eU$) становится релятивистским при ускоряющей разности потенциалов более 10 кВ, для нерелятивистского электрона длина волны де Бройля порядка ангстрема, что заставляет его проявлять волновые свойства в кристаллах.

Опыты по дифракции микрочастиц.

Опыт Дэвиссона-Джермера (1927 г.) – дифракция пучка электронов, выстреливаемого электронной пушкой, при отражении от монокристалла никеля.

Детектор показывал зависимость интенсивности рассеянного пучка электронов от угла рассеяния. Результаты опыта были идентичны результатам опыта по дифракции рентгеновских лучей, была получена формула идентичная условию Вульфа-Брэггов ($2d\sin\theta$ – разность хода) – условие максимума:

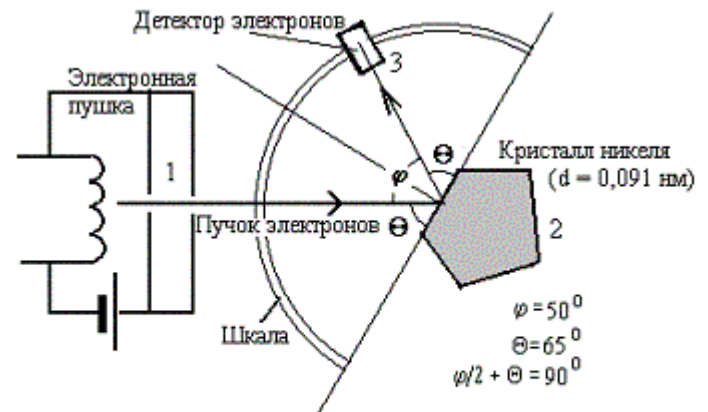
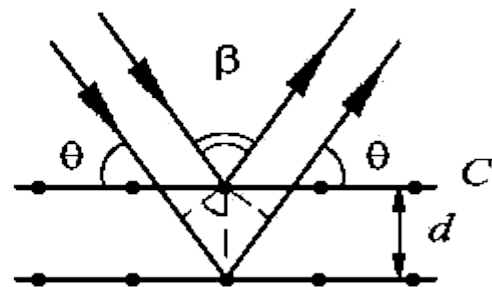
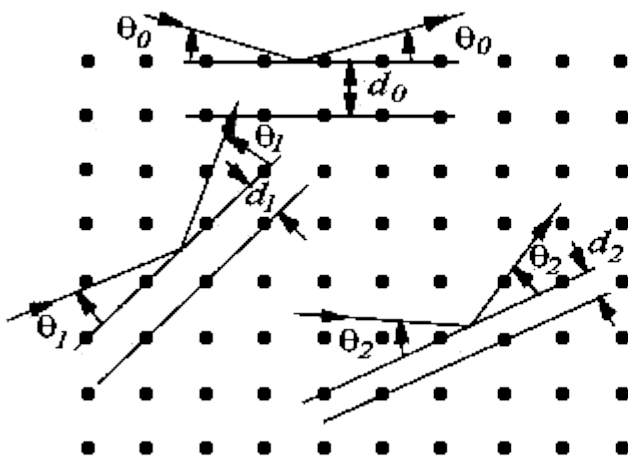


Рис. 2

$$2d\sin\theta = n\lambda_B, n = 1, 2, 3 \dots$$



Опыт Томсона-Тартаковского

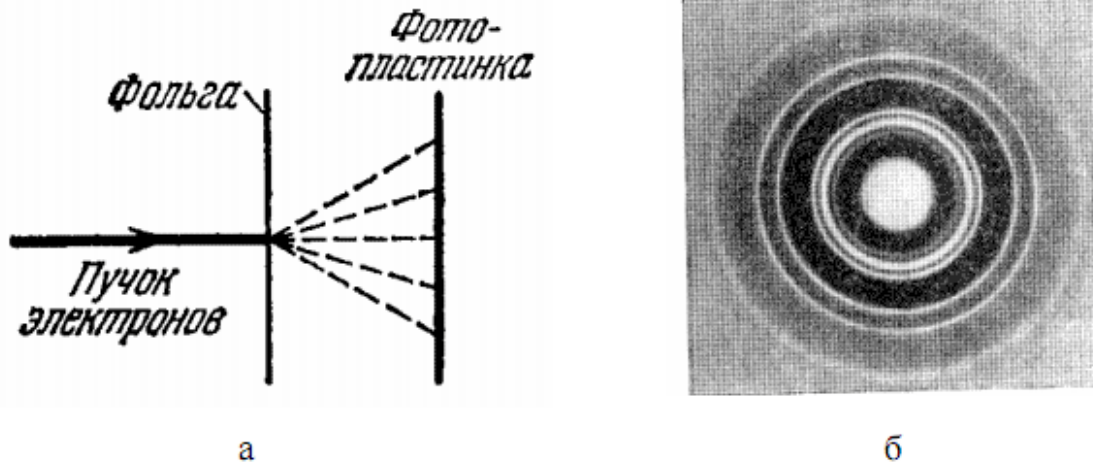


Рис. 17.4

Для наблюдения дифракции электронов Томсон и Тартаковский пропускали пучок электронов через металлическую поликристаллическую пластину, рассеянные на хаотически расположенных кристаллах электроны давали на фотографической пластинке систему интерференционных колец. Чтобы объяснить, что система интерференционных колец порождается не рассеянными электронами, а вторичным рентгеновским излучением, на пути рассеянных электронов между металлической пластинкой и фотопластинкой создавалось дополнительное магнитное поле, искажающее интерференционную картину.

Показатель преломления: пучок электронов преломляется при прохождении через металл, это объясняется тем, что внутри металла полная энергия электрона увеличивается на величину $e\varphi_0 = A_{\text{вых}}$ (в металле есть внутренний усредненный потенциал). Из-за увеличения энергии, в металле уменьшается длина волны де Бройля, соответственно уменьшается фазовая скорость $v_\phi = c^2/v$

$$n = \frac{v_{\phi \text{ вак}}}{v_{\phi \text{ мет}}} = \frac{v_{\text{мет}}}{v_{\text{вак}}} = \sqrt{1 + \frac{A_{\text{вых}}}{E_k}} = \sqrt{1 + \frac{\varphi_0}{U}}$$

Волны де Бройля. Границы применимости квантовой механики.

Движущейся частице ставится в соответствии волна де Бройля:

$$\Psi = A \exp \left[-\frac{i}{\hbar} (Et - Px) \right]$$

$Et - Px$ – фаза этой волны.

Фазовая скорость: $v_{\phi} = \dot{x}$, $d(Et - Px)/dt = 0 \Rightarrow v_{\phi} = E/p = c^2/v$

Обнаружить волновые свойства макрообъектов невозможно, по причине того, что волна де Бройля пылинки будет меньше характерного размера любой периодической структуры, на которой можно было бы выявить ее волновые свойства.

Соответственно, волновые свойства микрочастиц проявляются на расстояниях порядка волны де Бройля для данной частицы.

Классическая механика, хорошо описывающая системы макроскопических масштабов, не способна описать все явления на уровне молекул, атомов, электронов и фотонов.

Квантовая механика адекватно описывает основные свойства и поведение атомов, ионов, молекул, конденсированных сред, и других систем с электронно-ядерным строением.

Квантовая механика также способна описывать поведение электронов, фотонов, а также других элементарных частиц, однако более точное релятивистски инвариантное описание превращений элементарных частиц строится в рамках квантовой теории поля.

Эксперименты подтверждают результаты, полученные с помощью квантовой механики.

Волновая функция, её статистический смысл и условия, которым она должна удовлетворять. Принцип суперпозиции в квантовой механике. Вектор плотности потока вероятности.

Волновой функцией называется комплекснозначная функция, используемая в квантовой механике для описания квантового состояния системы.

Волновая функция не имеет физического смысла, это «нечто комплексное» в пространстве. Физический смысл имеет квадрат волновой функции – это вероятность обнаружить систему в положении, описываемом координатами x_i в момент времени t .

$$\omega = |\Psi(x, y, z, t)|^2 = \Psi\bar{\Psi} = \frac{dP}{dV}$$

ω – плотность вероятности

Вероятность P обнаружить частицу в объеме V :

$$P = \int_V \Psi\bar{\Psi} dV$$

Условие нормировки волновой функции (вытекает из вероятностного смысла волновой функции):

$$\int_{\infty} \Psi\bar{\Psi} dV = 1$$

Условие нормировки выполняется не во всех задачах квантовой механики, например, интеграл будет расходиться в случае, если частица удаляется в бесконечность.

В нашем курсе мы имеем дело только с ортонормированными системами функций:

Система Ψ_n, Ψ_m называется ортонормированной, если:

$$\int_V \Psi_n \bar{\Psi}_m dV = \delta_{nm} = \begin{cases} 1, n = m \\ 0 \text{ otherwise} \end{cases}$$

δ_{nm} – коэффициент Кронегера.

Условия регулярности волновой функции (обязательны для всех волновых функций):

1. Условие конечности: $|\Psi|^2$ принимает только конечные значения (для нормированной функции $|\Psi|^2 \rightarrow 0$)
2. Условие однозначности: $\Psi(x, y, z, t)$ – однозначная функция координат и времени.
3. Условия непрерывности и гладкости – волновая функция в любой момент времени должна быть непрерывной функцией координат, ее частные производные по координатам также непрерывны (*они могут терпеть разрыв только в случае, если силовая функция в данной точке терпит бесконечный разрыв*)

Принцип суперпозиции в квантовой механике: следствие волновых свойств, линейности уравнения Шредингера.

Суперпозиция состояний квантовомеханической системы (частицы) также является ее состоянием.

Если частица может находиться в состояниях Ψ_1, Ψ_2 , то существует состояние

$$\Psi = A\Psi_1 + B\Psi_2$$

При измерении состояния мы редуцируем волновую функцию: состояние суперпозиции, где она неопределена, сводится к определенному состоянию Ψ_1 или Ψ_2

Коэффициенты в разложении $\Psi = \sum C_m \Psi_m$ можно найти по формуле:

$$C_m = \int_V \Psi \overline{\Psi_m} dV$$

(из нормировки)

Вектор плотности потока вероятности:

Введем вектор плотности потока вероятности, определяющий, с какой скоростью из данной области «вытекает» или «втекает» вероятность обнаружить частицу.

Интегральная форма: $\oint \bar{j} dS = -\frac{dP}{dt} = -\frac{d}{dt} \int |\Psi|^2 dV$

Дифференциальная форма: $\nabla \bar{j} + \frac{\partial \Psi}{\partial t} = 0$

Этот вектор можно также интерпретировать как количество частиц, проходящих через данную площадь в направлении нормали к ней за единицу времени.

$$\bar{j} = \frac{i\hbar}{2m} (\Psi \text{grad} \bar{\Psi} - \bar{\Psi} \text{grad} \Psi)$$

Уравнение Шредингера, его свойства:

Уравнение Шредингера позволяет в любой момент времени определить волновую функцию частицы массой m в силовом поле U . Уравнение Шредингера ниоткуда не выводится, оно фактически описывает, как устроен материальный мир.

$$\hat{H}\Psi = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}$$

Стационарные состояния, их временная зависимость.

Если силовая функция не зависит от времени, ее поле называется стационарным.

Если частица движется в стационарном поле, существует состояние, в котором ее энергия определена. Это состояние называется стационарным. Также в стационарном состоянии определены все измеряемые физические величины.

Полная энергия частицы в стационарном поле является постоянной величиной.

Волновую функцию в стационарном поле можно представить в виде $\Psi = \psi \exp \left[-\frac{i}{\hbar} Et \right]$ - **временная зависимость.**

Уравнение Шредингера для стационарного состояния:

$$\hat{H}\psi = E\psi$$

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

Свойства уравнения Шредингера – регулярность волновой функции, статистическая интерпретация.

Частица в одномерной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками. Квантование энергии. Плотность вероятности для различных энергетических уровней.

Частица в одномерной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками.

$$U(x) = \begin{cases} 0, & 0 < x < a \\ \infty & \text{otherwise} \end{cases}$$

Волновая функция:

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

Решение имеет вид $\psi = A \sin kx + B \cos kx$

Из граничных условий: $\psi(0) = 0 \Rightarrow B = 0$; $\psi(a) = 0 \Rightarrow ka = \pi n, n = 1, 2, 3 \dots$

$$ka = \pi n \Rightarrow \frac{\pi^2 n^2}{a^2} = \frac{2m}{\hbar^2} E$$

Получили **Квантование энергии**:

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

$$\Delta E_n = E_{n+1} - E_n \sim n \Rightarrow \frac{\Delta E_n}{E_n} \sim \frac{1}{n}$$

Дискретность энергии убывает при увеличении номера уровня.

Энергия частицы в яме не равна нулю – это согласуется с принципом Гейзенберга.

Плотность вероятности для различных энергетических уровней – найдем коэффициент A из условия нормировки: $\int_0^a A^2 \sin^2 \pi nx/a dx = A^2 a/2 = 1$

Получили волновую функцию $\psi_n = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \pi nx/a$

С математической точки зрения задача о частице в одномерной потенциальной яме аналогична задаче о колебании жестко закрепленной струны: в яму должно «укладываться» (из граничных условий) целое число полуволен де Бройля: $a = \frac{n\lambda_B}{2}$

Плотность вероятности для различных энергетических уровней:

$$|\psi_n|^2 = \frac{2}{a} \sin^2 \pi nx/a$$

Вероятность обнаружить частицу внутри некоторого интервала:

$$P = \int_1^2 |\psi_n|^2 dx$$

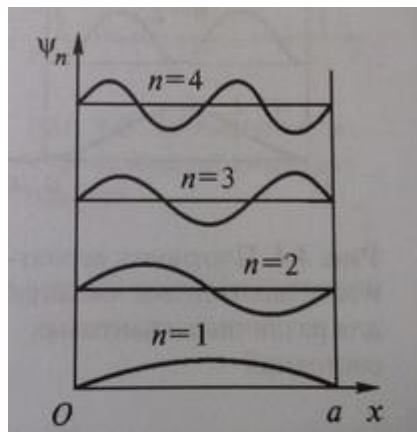


Рис. 4.3. Волновые функции частицы в потенциальной яме с непроницаемыми стенками

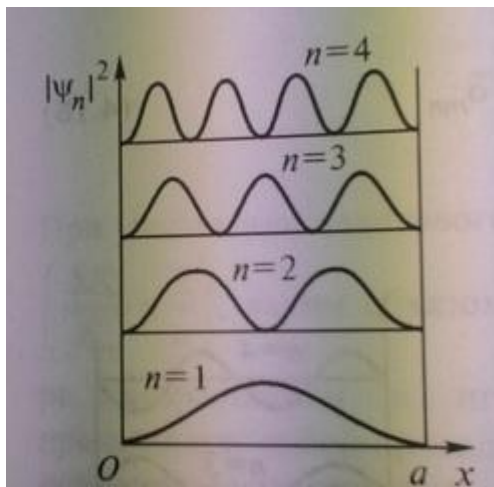


Рис. 4.4. Плотность вероятности нахождения частицы для различных квантовых состояний

Частица в трёхмерном потенциальном ящике. Энергетический спектр частицы. Понятие о вырождении состояний.

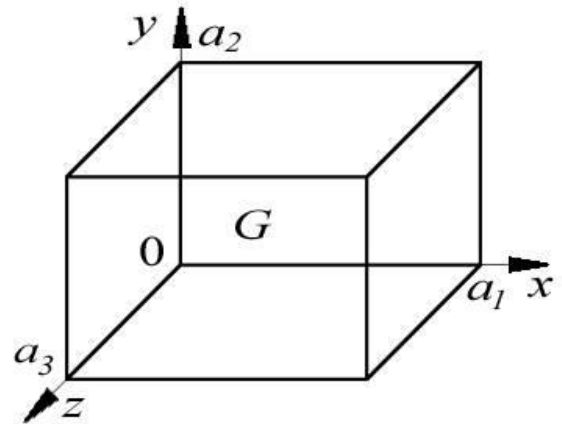
$$U(x, y, z) = \begin{cases} 0, & u(x, y, z) \in G \\ \infty & \text{otherwise} \end{cases}$$

Решение будем искать в виде

$$\psi(x, y, z) = \psi(x)\psi(y)\psi(z)$$

Получим три одномерных уравнения (аналогично случаю с одномерной ямой)

$$\frac{\partial^2 \psi(x_i)}{\partial x_i^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E_i \psi = 0$$



Решения которых, с учетом граничных условий:

$$\psi_n(x_i) = \sqrt{\frac{2}{a_i}} \sin \pi n x_i / a_i$$

Отсюда, волновая функция частицы в трехмерном потенциальном ящике:

$$\psi_n(x, y, z) = \prod \psi_n(x_i) = \sqrt{\frac{8}{a_1 a_2 a_3}} \sin \pi n x / a_1 \sin \pi n y / a_2 \sin \pi n z / a_3$$

Энергетический спектр: $E = \sum E_i$

$$E_{n_i} = \frac{\pi^2 \hbar^2 n_i^2}{2m a_i^2}$$

$$E = E(n_1, n_2, n_3) = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m} \left(\frac{n_1^2}{a_1^2} + \frac{n_2^2}{a_2^2} + \frac{n_3^2}{a_3^2} \right), n_i = 1, 2, 3 \dots$$

Энергия частицы в трехмерном потенциальном ящике зависит от трех квантовых чисел.

Понятие о вырожденности состояний: уровни энергии, когда одному значению энергии соответствуют несколько различных состояний называются вырожденными. Кратность вырождения – количество этих состояний. Для кубической ямы уровень не вырожден, когда $n_1 = n_2 = n_3$, вырожден 3 порядка, когда $n_1 = n_2 \neq n_3$, вырожден 6 порядка, когда $n_1 \neq n_2 \neq n_3$

Номер уровня	Квантовые числа (n_1, n_2, n_3)	$\sum_{i=1}^3 n_i^2$
1	(1, 1, 1)	3
2	(1, 1, 2), (1, 2, 1), (2, 1, 1)	6
3	(1, 2, 2), (2, 1, 2), (2, 2, 1)	9
4	(1, 1, 3), (1, 3, 1), (3, 1, 1)	11
5	(2, 2, 2)	12
6	(1, 2, 3), (1, 3, 2), (2, 1, 3), (2, 3, 1), (3, 1, 2), (3, 2, 1)	14

Как следует из таблицы, 6-му энергетическому уровню соответствует сумма квадратов квантовых чисел, равная четырнадцатью.

$$E_6 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_0 a^2} 14 = 7 \frac{\pi^2 \hbar^2}{m_0 a^2}.$$

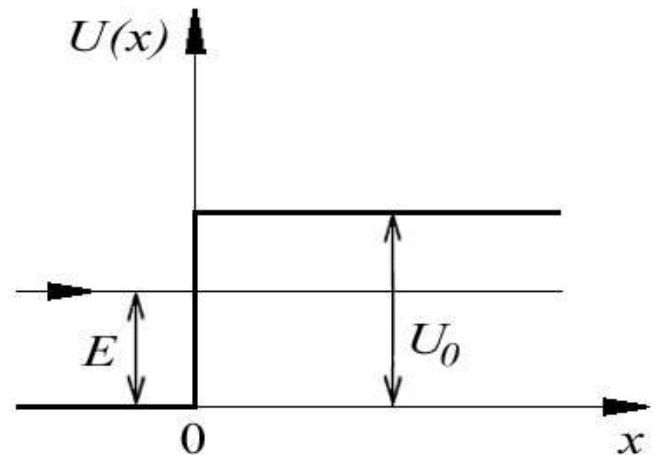
Движение микрочастицы в области одномерного потенциального порога.

Порог задается выражением:

$$U(x) = \begin{cases} 0, & x < 0 \\ U_0, & x > 0 \end{cases}$$

1 – область $U = 0$

2 – область $U = U_0$



Уравнения Шредингера:

$$\begin{cases} \psi_1'' + \frac{2m}{\hbar^2}(E)\psi_1 = \psi_1'' + k_1^2\psi_1 = 0 \\ \psi_2'' + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U_0)\psi_2 = \psi_2'' - k_2^2\psi_2 = 0 \end{cases}$$

а) Высокий порог: решения ищем в виде

$$\begin{cases} \psi_1 = A_1 \exp[ik_1x] + B_1 \exp[-ik_1x] \\ \psi_2 = A_2 \exp[k_2x] + B_2 \exp[-k_2x] \end{cases}$$

Применим граничные условия, условия регулярности, условия нормированности:

- 1) A_1 положим 1 ; $|\psi_2| \xrightarrow{\infty} 0 \Rightarrow A_2 = 0$;
- 2) непрерывность: $\psi_1(0) = \psi_2(0), \psi_1'(0) = \psi_2'(0) \Rightarrow$

$$B_1 = \frac{k_1 - ik_2}{k_1 + ik_2} ; B_2 = B_1 + 1 = \frac{2k_1}{k_1 + ik_2}$$

Получили:

$$\begin{aligned} \psi_1 &= \exp[ik_1x] + \frac{k_1 - ik_2}{k_1 + ik_2} \exp[-ik_1x] , & x < 0 \\ \psi_2 &= \frac{2k_1}{k_1 + ik_2} \exp[-k_2x] , & x > 0 \end{aligned}$$

Первая волновая функция – сумма падающей и отраженной волны, вторая волновая функция – волна, прошедшая вглубь барьера.

Система уравнений имеет решения при любых значениях энергии – спектр энергии частицы непрерывен. Полученная функция ψ_2 также говорит о том, что существует (быстро убывающая при движении вдоль x) вероятность обнаружить частицу за порогом.

Коэффициенты отражения и прохождения:

$$\bar{j} = i\hbar/2m (\Psi \text{grad} \bar{\Psi} - \bar{\Psi} \text{grad} \Psi)$$

Определим $|\bar{j}_{\text{пад}}|, |\bar{j}_{\text{отр}}|, |\bar{j}_{\text{прош}}|$

$$|\bar{j}_{\text{пад}}| = \frac{\hbar k_1}{m}; |\bar{j}_{\text{отр}}| = \frac{\hbar k_1}{m} \left| \frac{k_1 - ik_2}{k_1 + ik_2} \right|^2; |\bar{j}_{\text{прош}}| = 0$$

Отсюда:

$$\text{Коэффициент отражения } R = \frac{|\bar{j}_{\text{отр}}|}{|\bar{j}_{\text{пад}}|} = 1$$

$$\text{Коэффициент прохождения } D = \frac{|\bar{j}_{\text{прош}}|}{|\bar{j}_{\text{пад}}|} = 0$$

б) Низкий порог

Аналогично:

$$\begin{cases} \psi_1'' + \frac{2m}{\hbar^2}(E)\psi_1 = \psi_1'' + k_1^2\psi_1 = 0 \\ \psi_2'' + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U_0)\psi_2 = \psi_2'' + k_2^2\psi_2 = 0 \end{cases}$$

Решение данной системы имеет вид:

$$\begin{cases} \psi_1 = A_1 \exp[ik_1x] + B_1 \exp[-ik_1x] \\ \psi_2 = A_2 \exp[ik_2x] + B_2 \exp[-ik_2x] \end{cases}$$

Применим граничные условия, условия регулярности, условия нормированности:

- 1) A_1 положим 1 ; во второй области нет отраженной волны $\Rightarrow B_2 = 0$;
- 2) непрерывность: $\psi_1(0) = \psi_2(0), \psi_1'(0) = \psi_2'(0) \Rightarrow$

$$B_1 = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}; A_2 = B_1 + 1 = \frac{2k_1}{k_1 + k_2}$$

Получили:

$$\begin{aligned} \psi_1 &= \exp[ik_1x] + \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \exp[-ik_1x], & x < 0 \\ \psi_2 &= \frac{2k_1}{k_1 + k_2} \exp[ik_2x], & x > 0 \end{aligned}$$

Коэффициенты отражения и прохождения:

$$\bar{j} = i\hbar/2m (\Psi \text{grad} \bar{\Psi} - \bar{\Psi} \text{grad} \Psi)$$

Определим $|\bar{j}_{\text{пад}}|, |\bar{j}_{\text{отр}}|, |\bar{j}_{\text{прош}}|$

$$|\bar{j}_{\text{пад}}| = \frac{\hbar k_1}{m}; |\bar{j}_{\text{отр}}| = \frac{\hbar k_1}{m} \left| \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right|^2; |\bar{j}_{\text{прош}}| = \frac{\hbar k_2}{m} \left| \frac{2k_1}{k_1 + k_2} \right|^2$$

Отсюда:

$$\text{Коэффициент отражения } R = \frac{|\bar{j}_{\text{отр}}|}{|\bar{j}_{\text{пад}}|} = \left| \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right|^2 = \left(\frac{1 - \sqrt{1 - \frac{U}{E}}}{1 + \sqrt{1 - \frac{U}{E}}} \right)^2 \neq 0$$

В квантовой физике есть вероятность отражения частицы от низкого потенциального барьера! При этом вероятность отражения не зависит от направления движения частицы.

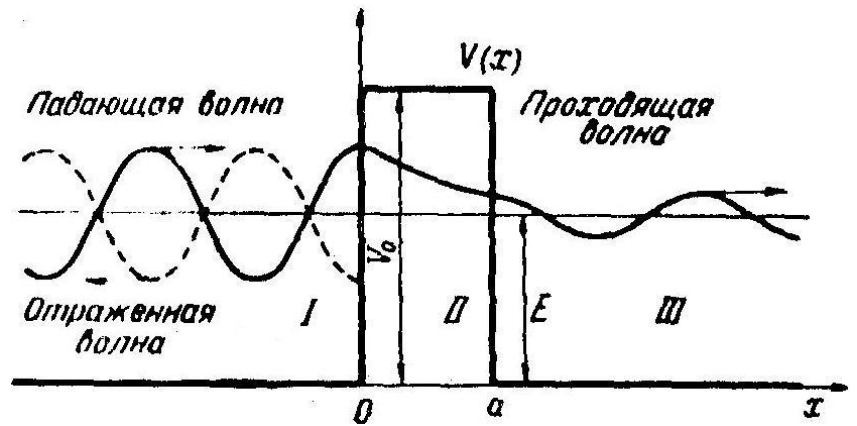
$$\text{Коэффициент прохождения } D = \frac{|\bar{j}_{\text{прош}}|}{|\bar{j}_{\text{пад}}|} = \frac{4k_1 k_2}{(k_1 + k_2)^2} = \frac{4\sqrt{1 - \frac{U}{E}}}{\left(1 + \sqrt{1 - \frac{U}{E}}\right)^2}$$

Энергетический спектр частицы непрерывен вне зависимости от высоты порога!

Прохождение частицы через потенциальный барьер. Туннельный эффект.

Барьер задается выражением:

$$U(x) = \begin{cases} U_0 & x \in [0; a] \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}$$



Аналогично:

$$\begin{cases} \psi_1'' + \frac{2m}{\hbar^2}(E)\psi_1 = \psi_1'' + k_1^2\psi_1 = 0 \\ \psi_2'' + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U_0)\psi_2 = \psi_2'' - k_2^2\psi_2 = 0 \\ \psi_3'' + \frac{2m}{\hbar^2}(E)\psi_3 = \psi_3'' + k_1^2\psi_3 = 0 \end{cases}$$

Решение данной системы имеет вид:

$$\begin{cases} \psi_1 = A_1 \exp[ik_1x] + B_1 \exp[-ik_1x] \\ \psi_2 = A_2 \exp[k_2x] + B_2 \exp[-k_2x] \\ \psi_3 = A_3 \exp[ik_1x] + B_3 \exp[-ik_1x] \end{cases}$$

Применим граничные условия, условия регулярности, условия нормированности:

- 1) A_1 положим 1 ; во третьей области нет отраженной волны $\Rightarrow B_3 = 0$;
- 2) Получим систему из 4 уравнений, с 4 неизвестными, применив условия непрерывности. Решив ее, получим коэффициент A_3 , описываемый громоздкой формулой.

Коэффициент прохождения:

$$\bar{j} = i\hbar/2m (\Psi \text{grad} \bar{\Psi} - \bar{\Psi} \text{grad} \Psi)$$

Определим $|\bar{j}_{\text{пад}}|, |\bar{j}_{\text{прош}}|$

$$|\bar{j}_{\text{пад}}| = \frac{\hbar k_1}{m} |A_1|^2 = \frac{\hbar k_1}{m}; |\bar{j}_{\text{прош}}| = \frac{\hbar k_3}{m} |A_3|^2 = \frac{\hbar k_1}{m} |A_3|^2$$

Отсюда:

$$\text{Коэффициент прохождения } D = \frac{|\bar{j}_{\text{прош}}|}{|\bar{j}_{\text{пад}}|} = |A_3|^2 \approx D_0 \exp[-2k_2 a] \approx \exp[-2k_2 a]$$

$$D \approx \exp\left[-\frac{2a}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)}\right]$$

В случае криволинейного барьера, мы разбиваем его на прямоугольные элементарные участки шириной dx и суммируем:

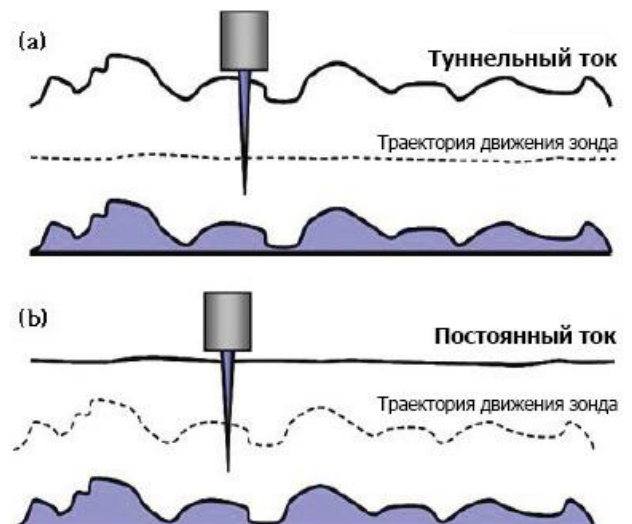
$$D \approx \exp\left[-\frac{2}{\hbar} \int_a^b \sqrt{2m(U(x) - E)} dx\right]$$

Прохождение частицы через потенциальный барьер называется **туннельным эффектом**. Вероятность прохождения зависит от высоты и ширины барьера. При прохождении через барьер не меняется полная энергия частицы.

Туннельным эффектом объясняется контактная разность потенциалов, холодная эмиссия электронов из металла, альфа-распад.

Сканирующий туннельный микроскоп (СТМ):

Устройство, позволяющее «увидеть атом»: между иглой и поверхностью металлов создается разность потенциалов – потенциальный барьер. В силу туннельного эффекта между металлом и иглой возникает туннельный ток, по величине которого можно судить о вероятности прохождения, пропорциональной расстоянию от иглы до поверхности металла.



Уравнение Шредингера для гармонического осциллятора, анализ его решений.

Гармонический осциллятор – система, совершающая гармонические колебания под действием квазиупругой силы $F = -\alpha x$.

$$\ddot{x} + \frac{\alpha}{m}x = 0, \frac{\alpha}{m} = \omega_0^2$$

Потенциальная энергия ГО $U(x) = \frac{m\omega_0^2 x^2}{2}$

Будем называть КГО частицу, находящуюся в таком силовом поле.

Уравнение Шредингера в данном случае имеет вид:

$$\psi'' + \frac{2m}{\hbar} \left(E - \frac{m\omega_0^2 x^2}{2} \right) \psi = 0$$

Введем обозначения: $\eta = 2E/\hbar\omega_0$, $x_0 = \sqrt{\hbar/m_0\omega_0}$, $\zeta = x/x_0$ уравнение Шредингера примет вид:

$$\frac{d^2\psi}{d\zeta^2} + (E - \eta^2)\psi = 0$$

Анализ этого выражения показывает, что волновые функции будут непрерывны и конечны лишь при значениях $\eta = 2E/\hbar\omega_0 = 2n + 1$, $n = 1, 2, 3 \dots$

Соответственно получаем дискретный спектр энергии КГО:

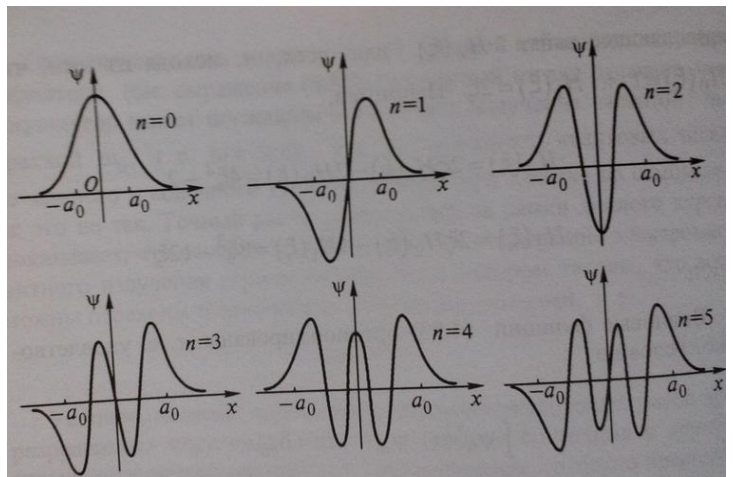
$$E = \hbar\omega_0 \left(n + \frac{1}{2} \right)$$

Волновые функции КГО имеют сложный вид, состоящий из произведения нормировочной постоянной, экспоненты и полинома Чебышева-Эрмита n -го порядка.

Волновые функции для первых трех энергетических уровней КГО имеют вид:

$$\psi_0 = \frac{1}{\sqrt{x_0\sqrt{\pi}}} \exp \left[-\frac{x^2}{2x_0^2} \right]$$

$$\psi_1 = \frac{1}{\sqrt{2x_0\sqrt{\pi}}} \frac{2x}{x_0} \exp \left[-\frac{x^2}{2x_0^2} \right] \quad \psi_2 = \frac{1}{\sqrt{8x_0\sqrt{\pi}}} \left(\frac{4x^2}{x_0^2} - 2 \right) \exp \left[-\frac{x^2}{2x_0^2} \right]$$



Представление физических величин операторами. Собственные функции и собственные значения операторов. Вычисление средних значений физических величин.

Оператор – математическое правило, преобразующее одну функцию в другую.

Второй постулат квантовой механики гласит, что каждой физической величине соответствует оператор этой физической величины, соотношения между операторами имеют ту же структуру, что и отношения между соответствующими физическими величинами в классической механике.

Квантомеханические операторы должны быть:

А) **Линейными**

В) **самосопряженными (эрмитовыми)**

$$\int \bar{\Psi}_1 \hat{F} \Psi_2 dV = \int \Psi_2 \overline{\hat{F} \Psi_1} dV$$

(собственные значения эрмитовых операторов могут быть только действительными числами)

Собственные значения, собственные функции операторов:

$$\hat{F}\Psi = a\Psi$$

Спектр собственных значений называется дискретным, если его собственные значения можно пронумеровать, если нельзя – непрерывным. Если одному собственному значению принадлежит несколько собственных функций, собственное значение называется вырожденным.

Собственные функции ортонормированы $\int_V \Psi_n \bar{\Psi}_m dV = \delta_{nm} = \begin{cases} 1, n = m \\ 0 \text{ otherwise} \end{cases}$

Среднее значение

$$\langle f \rangle = \sum P_n f_n = \sum |C_n|^2 f_n = \int_V \bar{\Psi} \hat{F} \Psi dV$$

Основные операторы физических величин:

- 1) оператор координат $\hat{x} = x$, непрерывный спектр собственных значений
- 2) радиус-вектор $\hat{r} = \bar{i}\hat{x} + \bar{j}\hat{y} + \bar{k}\hat{z}$, непрерывный спектр собственных значений
- 3) оператор импульса $\hat{p} = -i\hbar \text{grad}$, непрерывный спектр собственных значений
- 4) квадрат импульса $\widehat{p^2} = (\hat{p})^2 = -\hbar\Delta$, непрерывный спектр собственных значений
- 5) момент импульса $\hat{L} = [\hat{r} \times \hat{p}]$, момент импульса неопределен – нет собственных значений!
- 6) Проекция момента импульса на ось $\widehat{L_z} = -i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}$ дискретный спектр собственных значений
- 7) Квадрат момента импульса – дискретный спектр собственных значений (угловой момент)

$$\widehat{L^2} = -\hbar^2 \Delta_{\theta, \varphi}$$

$$\Delta_{\theta, \varphi} = \frac{1}{r^2} \left[\frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right]$$

- 8) Кинетическая энергия $\widehat{E_k} = \widehat{p^2}/2m = -\hbar/2m \Delta$

- 9) Потенциальная энергия $\hat{U} = U$

- 10) Гамильтониан – оператор полной энергии

$$\hat{H} = \widehat{p^2}/2m + \hat{U} = -\hbar/2m \Delta + U$$

Операторы импульса и момента импульса. Их собственные значения и собственные функции.

- 1) Импульс $\hat{p}\Psi = -i\hbar \text{grad}$, обладает непрерывным спектром собственных значений.
- 2) $\hat{L} = [\hat{r} \times \hat{p}]$, не обладает собственными значениями
- 3) Проекция момента импульса на ось $\widehat{L}_z = -i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}$

Найдем собственные значения: $L_z \Psi = -i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial \varphi}$

Решением этого ДУ является периодическая функция

$$\Psi = C \exp \left[i L_z \varphi / \hbar \right] = C \exp \left[i L_z (\varphi + 2\pi) / \hbar \right] = C \exp \left[i L_z \varphi / \hbar \right] \exp \left[i L_z 2\pi / \hbar \right]$$

Из условия периодичности получим соотношение:

$$\exp \left[i L_z 2\pi / \hbar \right] = 1 \Rightarrow \frac{L_z}{\hbar} = m, m = 1, 2, 3 \dots$$

Получили дискретный спектр собственных значений: $L_z = \hbar m, m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3 \dots$

Собственные функции: $\Psi_m = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp[im\varphi]$

- 4) Квадрат момента импульса – дискретный спектр собственных значений (угловой момент)

$$\widehat{L}^2 = -\hbar^2 \Delta_{\theta, \varphi}$$

$$\Delta_{\theta, \varphi} = \frac{1}{r^2} \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right]$$

Решение ДУ для поиска его собственных значений сложное и не рассматривается в нашем курсе, можно отметить, что в итоге также можно получить дискретный спектр собственных значений: $L^2 = \hbar^2 l(l+1)$, $l = 0, 1, 2 \dots$

Каждому собственному значению L^2 соответствуют $(2l+1)$ собственных функций, каждая из которых определяется параметром $m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3 \dots, \pm l$ – другими словами, собственное значение имеет степень вырождения, равную $(2l+1)$.

Собственные функции оператора квадрата момента импульса мы также не рассматриваем.

Коммутирующие операторы. Условия возможности одновременного измерения разных механических величин. Соотношение неопределённости Гейзенберга.

Операторы коммутируют, если $\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = 0$

При измерении физической величины мы получаем **собственное значение** ее оператора.

Вероятность получить определенное значение при измерении равна $P_n = |C_n|^2$

Если две различные величины можно точно измерить одновременно, то $\hat{A}\hat{B}\Psi = ab\Psi$

Это выполняется только в том случае, когда операторы этих физических величин коммутируют.

Соотношение неопределенности Гейзенберга:

Объект микромира нельзя характеризовать одновременно точной координатой и точной величиной проекции импульса на ту же ось координат. Также это справедливо для неопределенности энергии микропроцесса в процессе длительности t .

Среднеквадратичная флуктуация: $\sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2} = \sqrt{\langle (\Delta x)^2 \rangle} = \Delta x$ - назовем это неопределенностью координаты, аналогично с импульсом. Тогда:

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

Стоит учесть, что $\hat{x}\hat{p}_x - \hat{p}_x\hat{x} = i\hbar$

Для любых некоммутируемых операторов:

$$\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = c$$

$$\Delta a \Delta b \geq \frac{|c|}{2}$$

Уравнение Шредингера для атома водорода. Квантовые числа, их физический смысл.

Электрон в атоме водорода движется в стационарном силовом поле

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

В сферической системе координат $\Delta\psi = \Delta_r\psi + \frac{1}{r^2}\Delta_{\theta,\varphi}\psi = \Delta_r\psi - \frac{L_z^2}{r^2\hbar^2}\psi$

$$\Delta_r = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)$$

Уравнение Шредингера $\hat{H}\psi = E\psi$ можно записать в виде:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_r\psi + \frac{L_z^2}{2mr^2}\psi - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}\psi = E\psi$$

Решением этого ДУ является сложная функция, зависящая от трех квантовых чисел, и являющаяся произведением *радиальной и шаровой составляющих*:

$$\Psi_{nlm}(\rho, \theta, \varphi) = R_{nl}(\rho)Y_{lm}(\theta, \varphi)$$

Физический смысл квантовых чисел:

1. Главное квантовое число: $n = 1, 2, 3 \dots$ определяет полную энергию электрона в любом квантовом состоянии:

$$E_n = -\frac{me^4}{32\pi^2\epsilon_0^2\hbar^2}\frac{1}{n^2}$$

2. Орбитальное квантовое число $l = 0, 1, 2 \dots, n-1$ определяет величину момента импульса атома: $L = \hbar\sqrt{l(l+1)}$, характеризует размер и форму электронного облака
3. Магнитное квантовое число $m = 0, \pm 1, \pm 2 \dots, \pm l$ определяет величину проекции момента импульса $L_z = \hbar m$, орбитального магнитного момента $p_z^m = \mu_B m$, соответственно, ориентацию электронного облака в пространстве
4. Магнитное спиновое квантовое число $m_s = \pm \frac{1}{2}$ - характеризует направление собственных механического и магнитного момента электронов

В атоме может быть только один электрон с данным набором квантовых чисел, согласно **принципу запрета Паули** (*в системе тождественных фермионов несколько фермионов не могут находиться в одном и том же состоянии*)

Число различных состояний в зависимости от энергетического уровня равно $2n^2$

Механический и магнитный моменты атома. Опыт Штерна и Герлаха.

Атом обладает механическим моментом L , у которого определена величина и проекция на ось, $L = \hbar\sqrt{l(l+1)}$; $L_z = \hbar m$

Так, как движущийся вокруг ядра электрон является заряженной частицей, его орбиту можно рассматривать как некоторый замкнутый контур с током, который можно охарактеризовать орбитальным магнитным моментом p^m

В классической теории $p^m = j\pi r^2 = (ev/2\pi r)(\pi r^2) = evr/2$

Механический и магнитный моменты связаны гиромагнитным соотношением:

$$\frac{p^m}{L} = \frac{e}{2m}$$

Отсюда:

$$p^m = L \frac{e}{2m} = \frac{\hbar e}{2m} \sqrt{l(l+1)} = \mu_B \sqrt{l(l+1)}$$

$\mu_B = 0,927 \cdot 10^{-23} \frac{\text{Дж}}{\text{Тл}}$ – магнетон Бора, единица измерения магнитных моментов атомов.

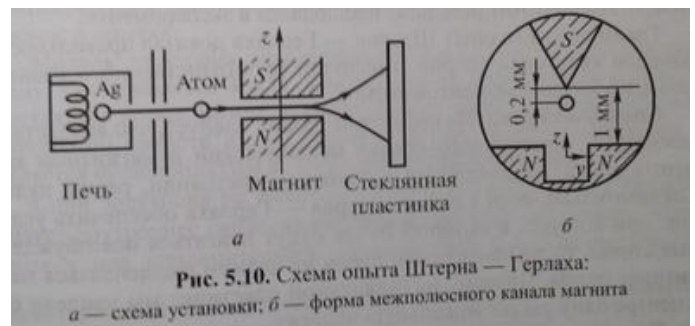
Величина проекции магнитного момента равна:

$$p_z^m = m\mu_B$$

Опыт Штерна и Герлаха.

Помимо квантования энергии в атоме присутствует пространственное квантование – дискретность проекции магнитного момента атома на выбранное направление. В опыте Штерна и Герлаха поток атомов пропускается сквозь полюса магнита с

сильным неоднородным магнитным полем, направленным вдоль оси z , которое за счет особой формы магнита сильно отклоняет пролетающие атомы в зависимости от их магнитного момента. С позиций классической механики магнитные моменты в атомах ориентированы хаотически, и на экране должно появляться сплошное пятно, но по результатам опыта мы наблюдаем серию узких полос, подтверждающих пространственное квантование магнитных моментов атомов.



Орбитальный, спиновый и полный механический и магнитный моменты электрона.

Из квантовой теории следует, что в основном состоянии механический и магнитный момент атома в невозбужденном состоянии равен нулю, однако если в опыте Штерна-Герлаха обеспечить такие условия, что в атомном пучке движутся только нерасщепленные электроны, вопреки предположению, что пучок не должен расщепляться, он расщепляется на два симметричных пучка.

Проекция магнитного момента невозбужденного атома серебра оказалась равна $\pm\mu_B$

Это связано с тем, что электрон обладает собственным магнитным и механическим моментами, названными спином, являющейся таким же его свойством как масса и заряд.

Количественно спин характеризуется числом $s = \frac{1}{2}$

$$L_s = \hbar\sqrt{s(s+1)} = \frac{\sqrt{3}}{2}\hbar$$

$$p_s^m = \mu_B\sqrt{s(s+1)} = \sqrt{3}\mu_B$$

Собственные механический и магнитный моменты связаны гиромангнитным соотношением (в два раза больше, чем у орбитальных)

$$\frac{p^m}{L} = \frac{e}{m}$$

Проекции собственных моментов на выделенное направление определяются *спиновым квантовым числом* $m_s = \pm\frac{1}{2}$

$$L_{s_z} = m_s\hbar = \pm\frac{1}{2}\hbar$$

$$p_{s_z}^m = 2\mu_B m_s = \pm\mu_B$$

Полный механический и магнитный моменты атома (с учетом спина):

Квантовое число $j = \{l + s, |l - s|\}$ определяет суммарный механический момент атома:

$L_j = \hbar\sqrt{j(j+1)}$, при l отличном от нуля соответствующим двум различным ориентациям спинового момента относительно орбитального. (для системы с 1 электроном)

Атом во внешнем магнитном поле. Эффект Зеемана.

В сложном многоэлектронном атоме каждый из N электронов имеет собственные орбитальный и спиновый механический и магнитные моменты.

При сложении моментов в результирующий момент возможны два случая:

JJ-связь – механический и магнитный моменты каждого электрона складываются в суммарный момент электрона, моменты электронов складываются в результирующий момент атома. Встречается у тяжелых атомов.

LS-связь, наиболее часто распространенная (связь Рассел-Саундерса), осуществляется по следующей схеме:

- 1) Все орбитальные моменты складываются в суммарный (L – суммарный орбитальный момент атома, его квантовое число. L всегда либо целое число, либо 0)

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

- 2) Также суммарный спиновый момент: (S – суммарный спиновый момент атома, его квантовое число. Если N четное, то S принимает целые значения от 0 до $N/2$, если N нечетное, то S принимает нечетные значения от $1/2$ до $N/2$)

$$\mathcal{L}_S = \hbar \sqrt{S(S+1)}$$

- 3) Результирующий механический момент (квантовое число J принимает значения $J = \{L + S, L + S - 1, L + S - 2, \dots, |L - S|\}$)

$$\mathcal{L}_J = \hbar \sqrt{J(J+1)}$$

- 4) Фактор Ланде:

$$g = 1 + \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)}$$

- 5) Результирующий магнитный момент

$$\mathcal{P}_J^m = g \mu_B \sqrt{J(J+1)}$$

- 6) Проекция равны:

$$\mathcal{P}_{J_z}^m = g \mu_B m_J ; \mathcal{L}_{J_z} = \hbar m_J$$

$$m_J = -J, -J+1, \dots, J$$

Для обозначения 3 квантовых чисел атома ввели понятие **Терм**:

$$2S+1 L_J$$

L=	0	1	2	3	4
4Буква	S	P	D	F	G

Правила перехода:

$$\Delta L = 0, \pm 1; \quad \Delta S = 0; \quad \Delta J = 0, \pm 1$$

Эффект Зеемана: расщепление линий атомных спектров в магнитном поле.

Эффект обусловлен тем, что в присутствии магнитного поля B электрон, обладающий магнитным моментом, приобретает дополнительную энергию $\Delta E = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}$, приобретённая энергия приводит к снятию вырождения атомных состояний по магнитному квантовому числу m_j и расщеплению атомных спектральных линий.