

ЛЕКЦИЯ 7

Квантовая физика

Если величина F сохраняется, то

$$\frac{d\langle F \rangle}{dt} = 0.$$

Теперь нужно понять, справедливы ли законы из макрофизики в квантовой физике. В квантовой физике эволюция системы определяется эволюцией ψ -функции. Как записать законы сохранения с помощью ψ -функции?

Величина F сохраняется, если, она коммутирует с гамильтонианом системы:

$$[\hat{H}\hat{F}] = 0 = \hat{H}\hat{F} - \hat{F}\hat{H} \quad \text{— скобки Пуассона.}$$

Пример 7.1 (для энергии).

$$\hat{H}\hat{H} - \hat{H}\hat{H} = 0$$

Пример 7.2 (для импульса).

$$\hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \Rightarrow \hat{H}\hat{p} - \hat{p}\hat{H} = -i\hbar \hat{H} \frac{\partial}{\partial x} + i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \hat{H} = 0$$

Для углового момента это тоже верно.

В квантовой физике есть еще другие законы. Описание системы не должно зависеть от того, какую систему координат мы выбрали — правую или левую. Говорят, что это операция — операция инверсии.

$$\vec{r} \rightarrow -\vec{r}.$$

Операция инверсии эквивалентна зеркальному отражению.

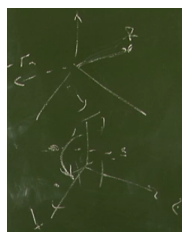


Рис. 7.1.

Можно ли на самом деле однозначно выбрать лево и право?

Что происходит с волновой функцией при зеркальном отображении? Введем оператор инверсии и подействуем им на волновую функцию

$$\hat{p}\psi(r) = \psi(-r).$$

Двойное применение оператора инверсии ничего не меняет:

$$\hat{p}^2\psi(r) = \hat{p}(\hat{p}\psi) = \hat{p}\psi(-r) = \psi(r).$$

Лекция 7. Квантовая физика

Собственные значения оператора \hat{p} :

$$\hat{p}\psi = \pi\psi,$$

где π — это собственные значения оператора.

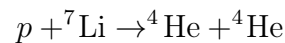
$$\hat{p}^2\psi = \pi^2\psi.$$

Отсюда получаем, что собственные значения: $\pi = \pm 1$. Значит функция может быть симметричной или асимметричной. Пусть функция симметрична. Сохраняется ли оператор инверсии?

$$\hat{p}\hat{H} - \hat{H}\hat{p} = 0.$$

Поскольку собственные числа оператора инверсии ± 1 , то это выполняется. Говорят, что четность волновой функции сохраняется. Она может быть четной или нечетной, т. к. именно ψ^2 определяет вероятность.

Оказывается, что частицы тоже обладают четностью. Для протона, нейтрона: $\pi_N = +1$ А для атома лития: $\pi = -1$. Например, для реакции:



Законы сохранения энергии, импульса, позволяют ее провести, но закон сохранения четности не позволяет этой реакции существовать.

Если есть две частицы, у которых свои четности π_1, π_2 и они находятся в совместном движении с орбитальным моментом l , то суммарная четность

$$\pi_\sigma = \pi_1\pi_2(-1)^l.$$

В зависимости от числа l , система электронов в атоме может быть четной или нечетной.

Но был проведен эксперимент, в котором четность не сохраняется. Все, что мы рассматривали — это нерелятивистский случай, а в релятивистском — четность может не сохраняться.

В микромире есть одинаковые частицы. Например электроны или атомы лития. Это называется принцип тождественности.

Из принципа тождественности вытекает очень важный принцип: при смене тождественных частиц ничего не поменяется.

Состояние системы описывается набором квантовых чисел. Они описываются квантовыми числами ξ_1, ξ_2 . Операция смены частиц не тождественна отражению. Но если $l = 0$, то это то же самое.

Суммарная волновая функция двух частиц

$$\Psi_{1,2}(\xi_1, \xi_2) = e^{i\alpha} \Psi_{2,1}(\xi_2, \xi_1).$$

Здесь мы добавили фазовый множитель, который не меняет модуль.

$$|\Psi_{1,2}(\xi_1, \xi_2)|^2 = |\Psi_{2,1}(\xi_2, \xi_1)|^2.$$

Отсюда получается, что

$$e^{i\alpha} = \pm 1$$

— то же самое, что и для операции инверсии.

Функции бывают симметричные и антисимметричные:

$$\Psi(\xi_1, \xi_2) = \pm \Psi(\xi_2, \xi_1).$$

Если плюс, то симметричная. Минус — антисимметричная.

Частицы, обладающие целым спином, называются бозонами. Например, $\pi, \gamma, {}^4\text{He}$. Они описываются симметричными волновыми функциями.

Частицы, обладающие полуцелым спином, называются фермионы. Например, $e, p, n, {}^3\text{He}$. Они описываются антисимметричными волновыми функциями.

Как правильно записать волновую функцию двух частиц, описывающихся квантовыми числами ξ_1 и ξ_2 . Надо учитывать, что мы не можем отличить одну частицу от другой.

$$\Psi_{\text{сим(антисим)}} = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ \psi_\alpha(\xi_1) \psi_\beta(\xi_2) \pm \psi_\alpha(\xi_2) \psi_\beta(\xi_1) \}.$$

Мы симметризовали волновую функцию. Тожественные частицы входят симметрично. Эта волновая функция для двух частиц α и β , с квантовыми числами ξ_1 и ξ_2 . Теперь поместим частицы вместе: $\alpha = \beta$. Тогда получится $\Psi_{\text{антисим}} = 0$.

Оказывается, если частицы — фермионы, то они не могут находиться в одном и том же квантовом состоянии, в одной и той же точке пространства.

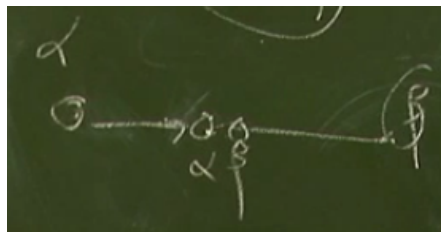


Рис. 7.2.

А если частицы — бозоны, то они могут находиться в одном и том же месте, имея одинаковые квантовые числа.

Впервые, на это обратил внимание Паули, поэтому это называют принципом запрета Паули. В силу **запрета Паули**, все электроны не сбиваются на нижний энергетический уровень, а вынуждены распределяться по уровням.

Теперь мы можем объяснить таблицу Менделеева.

$$2 \text{ (H, He)}, 10 \text{ (... Ne)}, 18 \text{ (... Ar)}, 36 \text{ (... Kr)}, 54 \text{ (... Xe)}, 86 \text{ (... Rn)}.$$

Эти числа называли магические, потому что никакой закономерности в них найти не могли. Но сейчас мы покажем, что они следуют из законов заполнения электронами уровней.

Менделеев распределял элементы в соответствии с массой элементов. Затем Мозли предложил распределять элементы по заряду ядра. Но как найти заряд ядра?

Электроны располагаются на слоях. K, L, M-слои. Если облучить атом излучением, то можно выкинуть, например, атом из K-оболочки. Но его место сразу же займет электрон с более высокого уровня и при этом излучится квант света. Измерив это излучение, Мозли получил такую зависимость:

$$\sqrt{\nu} = a(Z - b) \quad \text{— закон Мозли} \quad (a, b = \text{const}).$$

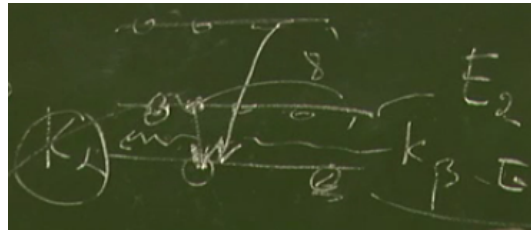


Рис. 7.3.

При переходе, будет излучаться такая энергия:

$$\hbar\omega_\alpha = E_2 - E_1.$$

Самый ближний к ядру электрон не чувствует влияния других электронов.

Для следующего электрона эффективный заряд будет меньше на 1, т. к. его экранирует электрон на нижнем уровне. Для электронов следующего уровня, эффективный заряд будет меньше на $\frac{7}{2} = 3,5$, т. к. из семи экранирующих электронов только половина работает

Тогда для каждого из уровней мы будем иметь водородоподобный атом, с зарядом, равным эффективному.

$$\hbar\omega^{\text{характ}} = E_2 - E_1 = Ry \left[\left(\frac{z - \sigma_1}{n_1} \right)^2 - \left(\frac{z - \sigma_2}{n_2} \right)^2 \right], \quad \sigma_1 = 3,5, \quad \sigma_2 = 1.$$

Мозли обнаружил, что в таблице Менделеева надо поменять местами никель и кобальт, а также оставить место под технеций.

Если мы знаем заряд ядра, то с помощью принципа Паули, можно построить электронную конфигурацию атома.

Попробуем получить эти самые магические числа. Каждый электрон обладает следующими характеристиками:

$$s, m_l, m_s, \vec{j} = \vec{l} + \vec{s}.$$

Но если электронов много, то как получить общий момент.

Для легких элементов справедлива **Рассел – Саундеровская связь**. Она заключается в том, что для атома, полные моменты:

$$S = \sum s_i, \quad L = \sum l_i, \quad J = \sum (s_i + j_i) = \sum j_i.$$

Атом ${}_1\text{H}$ описывается следующим образом: ${}^{2S+1}L_J$

Построим электронные конфигурации элементов таблицы Менделеева.

Когда заполняется оболочка, появляется благородный газ (сначала He, потом Ne и т. д.). Когда заполняется d -оболочка, то это будет Ag. Но потом, оказывается, что химически, инертные элементы уже не те, у которых заполнена оболочка.

Инертность объясняется тем, что валентный электрон, который вступает в связь, очень сильно связан с ядром и электрон не участвует в реакциях.

Таблица 7.1.

Электронная конфигурация	Элемент	Основное состояние	K	L	Полное число заполненных
$1s_{\frac{1}{2}}$	${}^1\text{H}$	${}^2\text{S}_{\frac{1}{2}}$	1	0	0
$\left(1s_{\frac{1}{2}}\right)^2$	${}^2\text{He}$	${}^2\text{S}_0$	2		
$\left(1s_{\frac{1}{2}}\right)^2 2s_{\frac{1}{2}}$	${}^3\text{Li}$	${}^2\text{S}_{\frac{1}{2}}$	2	1	
$\left(1s_{\frac{1}{2}}\right)^2 \left(2s_{\frac{1}{2}}\right)^2$	${}^4\text{Be}$	${}^1\text{S}_0$	2	1	
$\left(1s_{\frac{1}{2}}\right)^2 \left(2s_{\frac{1}{2}}\right)^2 2p_{\frac{1}{2}}$	${}^5\text{B}$		2	2(2s) 1(2p)	
$\left(1s_{\frac{1}{2}}\right)^2 \left(2s_{\frac{1}{2}}\right)^2 \left(2p_{\frac{1}{2}}\right)^6$	${}_{10}\text{Ne}$		2	2(2s) 6(2p)	10

Для электрона с $l = 0$, существует только кулоновский потенциал. Но как только увеличивается l , то начинает все больше сказываться центробежный потенциал, который стремится оторвать электрон от ядра. Поэтому на самом деле, электрон лучше всего держится в атоме, то есть обладает наибольшей энергией связи, при заполнении d -оболочки. Поэтому инертные газы — это именно те, у которых заполнена d -оболочка.

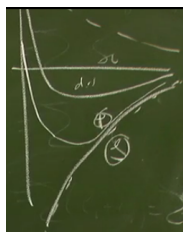


Рис. 7.4.