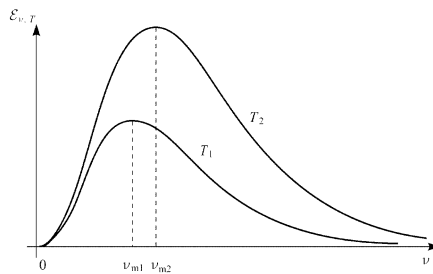


Лекция 1. Квантуване

Възникване на идеята за квантуване – топлинно лъчение. Атом и квантуване.

14 декември 1900 г. – начало на квантовата физика.

Опитите да се обясни спектралния състав на топлинното (електромагнитно) лъчение показали, че класическата физика съдържа редица вътрешни противоречия, които могат да бъдат преодоляни чрез принципно нови физични идеи. Такава физична идея била предложена от Макс Планк на 14 декември 1900 г. в доклада му пред немската Академия на науките. Той успял да изведе формула, описваща в целия честотен диапазон



Фиг. 1

експериментално наблюдаваното спектрално разпределение на равновесното топлинно лъчение. Планк е трябвало да направи предположение, напълно противоречащо на представите на класическата физика: излъчването на електромагнитно топлинно лъчение от веществото става на кванти (порции), като енергията на един квант се дава с израза

$$\varepsilon = h\nu.$$

Тук с ν е означена честотата на лъчението, а с h – универсална константа, която понастоящем се нарича константа на Планк. Една приближена нейна стойност е

$$h = 6,626 \cdot 10^{-34} \text{ J.s.}$$

Така във физиката се появява още една фундаментална константа!

Планк прилага методите на термодинамиката и кинетичната теория към задачата за равновесното топлинно лъчение. Той показва, че спектралният състав на лъчението не зависи от материала на стените на кухината, в която то се намира. Това му дава възможност да ги замени със съвкупност от заредени линейни хармонични осцилатори, които играят ролята на излъчватели. За да получи съгласие между теорията и експеримента, Планк приема, че всеки излъчвател-осцилатор не може да има произволна енергия, а само определени дискретни стойности, кратни на неговата честота $\nu = \sqrt{k/m}/2\pi$, т.е.

$$E = \frac{p^2}{2m} + \frac{kx^2}{2} = nh\nu, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (1)$$

От хипотезата на Планк и закона за запазване на енергията непосредствено следва, че излъчването става на порции (кванти)!

Стабилност на атомите.

Неуспешни се оказват опитите да се приложат законите на класическата физика за обяснение на стабилността на атомите, наблюдавана експериментално, и на техните линейни спектри на излъчване. През 1911 г. Ръдърфорд въз основа на анализа на резултатите от разсейване на α -частици върху атоми формулира и обосновава планетарния модел за строежа на атома. Според този модел атомът се състои от масивно положително заредено ядро с много малки размери ($R \sim 10^{-15} \text{ m}$), около което по определени орбити се движат електрони, осигуряващи неутралността на атома. Размерите на тези орбити са от порядъка на 10^{-10} m . Моделът се нарича „планетарен модел на атома“, тъй като отразява очевидната аналогия между него и Слънчевата система, в която планетите се движат по определени орбити около Слънцето. За разлика от Слънчевата система планетарният модел на атома е вътрешно противоречив в рамките на класическата физика, което се дължи на наличието на електричен заряд у електрона.

Според класическата електродинамика, движещ се с ускорение a електрон със заряд по големина q_0 , излъчва електромагнитно лъчение с мощност

$$P = \frac{2}{3} \frac{e^2}{c^3} a^2,$$

където $e^2 = q_0^2 / 4\pi\epsilon_0 \approx 2,3 \cdot 10^{-28} \text{ N.m}^2$, а $c \approx 3 \cdot 10^8 \text{ m/s}$ е скоростта на светлината във вакуум. Следователно енергията E на електрона намалява със скорост

$$\frac{dE}{dt} = -\frac{2}{3} \frac{e^2}{c^3} a^2.$$

Във водородния атом (ядро+електрон) електронът се движи равномерно по окръжност с радиус r и скорост v около неподвижното ядро, при което имаме

$$m \frac{v^2}{r} = \frac{e^2}{r^2}, \quad a = \frac{F}{m} = \frac{e^2}{mr^2}.$$

Тогава енергията му е

$$E = \frac{mv^2}{2} - \frac{e^2}{r} = -\frac{e^2}{2r},$$

при което можем да запишем

$$\frac{dE}{dt} = \frac{dE}{dr} \frac{dr}{dt} = \frac{e^2}{2r^2} \frac{dr}{dt} = -\frac{2}{3} \frac{e^6}{m^2 c^3 r^4}.$$

Тогава имаме

$$dt = -\frac{1}{4} \frac{m^2 c^3}{e^4} (3r^2 dr) = -\frac{1}{4} \frac{m^2 c^3}{e^4} dr^3 .$$

Така при преминаване на електрона от кръгова орбита с радиус $R_1 \approx 10^{-10}$ m (размер на атома) върху ядрото с размер $R_2 \approx 10^{-15}$ m за времето t получаваме оценката

$$t = \frac{1}{4} \frac{m^2 c^3}{e^4} (R_1^3 - R_2^3) \approx 1.10^{-10} \text{ s} ,$$

т.е. електронът ще падне върху ядрото за време $t \sim 10^{-10}$ s. Според класическата физика планетарният модел на атома се оказва неустойчив. Спектърът на излъчените електромагнитни вълни ще бъде непрекъснат, т.е. ще съдържа вълни с произволна честота (дължина на вълната). Този извод е в пълно противоречие с опитно наблюдавания линеен спектър на излъчване на водородния атом.

Теория на Бор за водородния атом

През 1913 г. Нилс Бор показва, че планетарният модел на атома може да се „спаси“, ако се въведе в теорията квантуване и по този начин се отделят от възможните класически орбити такива, по които движението на електрона става без той да излъчва. Теорията на атома по Бор се основава на два постулата (некласически!), които могат да бъдат формулирани по следния начин:

1. В атома съществуват стационарни орбити на електрона, при движението по които той има постоянна енергия $E_1, E_2, E_3, \dots$ и не излъчва. Изменението на енергията на електрона е възможно само при квантов (скокообразен) преход от една стационарна орбита на друга.
2. Излъчване или поглъщане на електромагнитно лъчение става при преход от една стационарна орбита на друга. При това честотата ν на лъчението се определя от разликата на енергиите на електрона на двете стационарни орбити. При излъчване

$$h\nu = E_{\text{initial}} - E_{\text{final}} , \quad (E_{\text{initial}} > E_{\text{final}}) ,$$

докато при поглъщане имаме

$$h\nu = E_{\text{final}} - E_{\text{initial}} , \quad (E_{\text{final}} > E_{\text{initial}}) ,$$

където E_{initial} и E_{final} са съответно началната и крайната енергия на електрона.

„Узаконявайки“ чрез постулатите дискретния характер на спектрите на излъчване и поглъщане на атомите, Бор предлага и конструктивен начин за пресмятане на енергетичните нива във водородния атом. Първо нека изясним каква физична величина трябва да се квантува. Енергията на електрона в модел на водороден атом с неподвижно ядро се дава с израза

$$E = \frac{p^2}{2m} - \frac{e^2}{r} .$$

Нека препишем този израз, като отделим пълен квадрат

$$E = \left(\frac{p}{\sqrt{2m}} - \frac{\sqrt{me^2}}{\sqrt{2}rp} \right)^2 - \frac{me^4}{2(rp)^2}.$$

Както се вижда, движението на електрона се извършва с минимална енергия, когато изразът в скобите е равен на нула, т.е. при условие, че

$$\frac{p}{\sqrt{2m}} = \frac{\sqrt{me^2}}{\sqrt{2}rp} \rightarrow m \frac{v^2}{r} = \frac{e^2}{r^2}.$$

Полученият резултат показва, че движението на електрона с минимална енергия става по кръгова орбита, като енергията му, радиусът на орбитата му и скоростта му се определят от момента на импулса $L = rp$, т.е. имаме

$$E = -\frac{me^4}{2L^2}, \quad r = \frac{L^2}{me^2}, \quad v = \frac{e^2}{L}.$$

Следователно квантуването на момента на импулса определя квантуването на енергията. За да квантува момента на импулса, Бор следвал хипотезата на Планк за квантуването на енергията на линеен хармоничен осцилатор. Равенството (1) може да се запише като уравнение на елипса в пространството (x, p) – координата импулс, наречено фазово пространство:

$$\frac{x^2}{a^2} + \frac{p^2}{b^2} = 1, \quad a = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{2nh}{mv}}, \quad b = \sqrt{2mnhv}.$$

Елипсата огражда „площ“ S във фазовото пространство, наричана още действие, която е равна на

$$S = \pi ab = nh. \quad (2)$$

Преписано в този вид условието (2) се нарича условие за квантуване на Бор. Във водородния атом електронът се движи равномерно по окръжност. Импулсът p е постоянен, а при едно завъртане координатата x , представляваща дължина на дъга от окръжността, се изменя от нула до $2\pi r$. Площта S във фазовото пространство е лицето на правоъгълник със страни p и $2\pi r$, т.е.

$$S = 2\pi rp = 2\pi L = nh,$$

откъдето следва условието за квантуване на момента на импулса

$$L = n\hbar, \quad n = 1, 2, \dots \quad \text{при} \quad \hbar = \frac{h}{2\pi} \approx 1,05 \cdot 10^{-34} \text{ J.s.} \quad (3)$$

Случаят $n=0$ се изключва, тъй като той не съответства на въртене. Условието за квантуване на момента на импулса определя дискретните стойности на основните физични величини в теорията на Бор за водородния атом

$$\text{Енергия на електрона } E_n = -\frac{me^4}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2} = -\frac{13,6}{n^2} \text{ eV},$$

$$\text{Радиус на орбитата на електрона } r_n = \frac{\hbar^2}{me^2} n^2 = 0,53 \cdot 10^{-10} n^2 \text{ m},$$

$$\text{Скорост на електрона върху орбитата } v_n = \frac{e^2}{\hbar} \frac{1}{n} = \frac{2,2 \cdot 10^6}{n} \text{ m/s}, \quad n = 1, 2, \dots$$

В своята теория на водородния атом Нилс Бор за първи път реализира идеята за квантуване на енергията на частица, движеща се в силово поле. Тя обаче не може да се разглежда като завършена теория на атомните явления. Описвайки атома със законите на класическата физика, Бор „забранява“ на електрона да излъчва електромагнитни вълни, когато се движи по стационарна орбита. Опитите на Бор да обопи теорията си за по-сложни атоми не се увенчават с успех. Въпреки това, като първа квантова теория на атома, теорията на Бор е изиграла огромна роля за развитието на правилни физични представи за атомните явления.

Пример 1. Обобщение на модела на Бор за водороден атом с движещо се ядро.

Досега разглеждахме спектъра на водородния атом в модел на ядро с безкрайно голяма маса, т. е. ядрото се описваше като силов център. Сега ще видим по-какъв начин се отразява крайната маса на ядрото върху енергетичния спектър на атома. Ще направим анализ в общия случай на две частици с маси съответно m_1 и m_2 , чиято потенциална енергия на взаимодействие е $U(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$. Ще разгледаме въпроса класически.

Решение. Енергията на системата от две взаимодействащи си частици е

$$E = \frac{\mathbf{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\mathbf{p}_2^2}{2m_2} + U(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|).$$

Ще я представим като сума от енергии на независими движения, които впоследствие ще квантуваме. За тази цел нека въведем координатите на центъра на масата $\mathbf{R}$ и на относителното положение $\mathbf{r}$:

$$\mathbf{R} = \frac{m_1 \mathbf{r}_1 + m_2 \mathbf{r}_2}{m_1 + m_2}, \quad \mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2.$$

Първо умножаваме второто равенство с m_2 и го събираме с първото, откъдето следва

$$\mathbf{r}_1 = \mathbf{R} + \frac{m_2}{m_1 + m_2} \mathbf{r}.$$

След това умножаваме второто равенство с m_1 и го изваждаме от първото, като получаваме

$$\mathbf{r}_2 = \mathbf{R} - \frac{m_1}{m_1 + m_2} \mathbf{r}.$$

За скоростите на двете частици след диференциране по времето имаме

$$\mathbf{v}_1 = \mathbf{V} + \frac{m_2}{m_1 + m_2} \mathbf{v}, \quad \mathbf{v}_2 = \mathbf{V} - \frac{m_1}{m_1 + m_2} \mathbf{v}.$$

Като заместим в израза за енергията $\mathbf{p}_1 = m_1 \mathbf{v}_1$, $\mathbf{p}_2 = m_2 \mathbf{v}_2$ и означим

$$\mathbf{P} = (m_1 + m_2) \mathbf{V} = M \mathbf{V}, \quad \mathbf{p} = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \mathbf{v} = \mu \mathbf{v},$$

имаме

$$E = \frac{\mathbf{P}^2}{2M} + \frac{\mathbf{p}^2}{2\mu} + U(\mathbf{r}),$$

където първият член описва транслационното движение на системата от две частици като движение на частица с маса $M = m_1 + m_2$, а останалите – относителното движение на частиците като движение на частица с маса $\mu = m_1 m_2 / (m_1 + m_2)$ в поле с потенциална енергия $U(\mathbf{r})$. Ако изключим равномерното транслационно движение на системата, енергията на относителното движение е

$$E^{\text{отн.}} = \frac{\mathbf{p}^2}{2\mu} + U(\mathbf{r}) = \frac{\mathbf{p}^2}{2\mu} - \frac{e^2}{r}.$$

За водородния атом приведената маса е

$$\mu = \frac{Mm}{M+m} = m \frac{1}{1+m/M} \approx m \left(1 - \frac{m}{M} \right),$$

тъй като отношението на масата на електрона към масата на ядрото $m/M \approx 5,4 \cdot 10^{-4}$. Енергията на относителното движение за водородния атом с крайна маса на ядрото има същия вид както с неподвижно ядро, като масата на електрона е заменена с приведената маса. Тогава намираме

$$E_n^{\text{отн.}} = -\frac{\mu e^4}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2} = E_n \left(1 - \frac{m}{M} \right) = E_n + \Delta_n, \quad \Delta_n = \frac{m}{M} |E_n|.$$

Поправката $\Delta_n > 0$ води до отместване на нивата нагоре. Тя е съществена за първите няколко нива. Например преходът $n=1 \rightarrow n=2$ е свързан с поглъщане на фотон с честота

$$\nu = \frac{1}{h} (E_2^{\text{отн.}} - E_1^{\text{отн.}}) = \frac{1}{h} (E_2 - E_1) + \frac{1}{h} (\Delta_2 - \Delta_1) = \nu_0 - \frac{m}{M} \nu_0,$$

като относителната промяна на честотата му е

$$\frac{\nu_0 - \nu}{\nu_0} = \frac{m}{M} \approx 5,4 \cdot 10^{-4}.$$

Пример 2. Хелиевоподобен йон в модела на Бор

Разгледайте модел на хелиевоподобен йон на атом със заряд на ядрото Zq_0 и два електрона всеки със заряд $-q_0$, в който ядрото е неподвижно, тъй като масата му е много по-голяма от тази на електрона. Всеки електрон се движи по стационарна кръгова орбита около ядрото, радиусът на която се определя от условието за квантуване на Бор:

$$mvr = n\hbar, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

- Намерете радиусите r_1 и r_2 на двата електрона в основното състояние на йона.
- Определете енергията на основното състояние на йона.
- Определете максималната дължина на вълната на монохроматично електромагнитно лъчение, което йонизира хелиевоподобен йон, намиращ се в основното си състояние. Направете числена оценка за хелий ($Z = 2$) и литий ($Z = 3$).

Фундаментални константи

Маса на електрона в покой $m = 9,1 \cdot 10^{-31}$ kg

Елементарен заряд $q_0 = 1,6 \cdot 10^{-19}$ C

Електрична константа $\epsilon_0 = 8,85 \cdot 10^{-12}$ F/m

Константа на Планк $h = 6,63 \cdot 10^{-34}$ J.s

Скорост на светлината във вакуум $c = 3,0 \cdot 10^8$ m/s

Решение.

а) Всеки от електроните се движи по стационарна кръгова орбита около неподвижното ядро със заряд Zq_0 . Електронът 1 се движи по кръгова орбита с радиус r_1 под действие на две сили: кулонова сила на привличане от ядрото с големина

$$F_1 = \frac{Zq_0^2}{4\pi\epsilon_0 r_1^2} = \frac{Ze^2}{r_1^2},$$

и кулонова сила на отблъскване между двата електрона, чиято минимална стойност е

$$F_{12} = \frac{q_0^2}{4\pi\epsilon_0 (r_1 + r_2)^2} = \frac{e^2}{(r_1 + r_2)^2} = F_{21}.$$

Тогава уравненията на движение имат вида

$$m \frac{v_1^2}{r_1} = \frac{Ze^2}{r_1^2} - \frac{e^2}{(r_1 + r_2)^2}, \quad m \frac{v_2^2}{r_2} = \frac{Ze^2}{r_2^2} - \frac{e^2}{(r_1 + r_2)^2}.$$

Тъй като на най-ниската орбита $mv_1 r_1 = mv_2 r_2 = \hbar$, получаваме

$$Zr_1 - \frac{r_1^3}{(r_1 + r_2)^2} = Zr_2 - \frac{r_2^3}{(r_1 + r_2)^2},$$

откъдето следва $r_1 = r_2$. Тогава имаме

$$\frac{\hbar^2}{me^2} = \left(Z - \frac{1}{4} \right) r_1,$$

при което намираме

$$r_1 = r_2 = \frac{\hbar^2}{me^2} \frac{1}{Z - \frac{1}{4}}.$$

б) Енергията на атома се дава с изказа

$$E = \frac{mv_1^2}{2} + \frac{mv_2^2}{2} - \frac{Ze^2}{r_1} - \frac{Ze^2}{r_2} + \frac{e^2}{r_1 + r_2}.$$

Като заместим r_1 и r_2 с получените по-горе изрази, намираме

$$E_{\text{осн}} = -2 \frac{(Z - 1/4)^2 me^4}{2\hbar^2}.$$

Енергията на основното състояние може да се интерпретира по следния начин – това е енергия на два независими електрона, всеки един от които се движи в полето на екраниран заряд на ядрото, поради движението на другия електрон.

в) При еднократна йонизация крайната енергия на йона е

$$E_{\text{кр}} = -\frac{Z^2 me^4}{2\hbar^2}.$$

Тогава енергията на фотона, предизвикал еднократната йонизация на хелиевоподобния йон, е

$$h\nu = \frac{hc}{\lambda} = E_{\text{кр}} - E_{\text{осн}} = \frac{me^4}{2\hbar^2} \left(Z^2 - Z + \frac{1}{8} \right).$$

В заключение имаме следния израз за максималната дължина на вълната

$$\lambda_{\text{max}} = \frac{hc}{\frac{me^2}{2\hbar^2} \left(Z^2 - Z + \frac{1}{8} \right)},$$

който определя следните числени стойности

$$Z = 2, \quad \lambda_{\text{max}}(\text{He}) \approx 43 \text{ nm},$$

$$Z = 3, \quad \lambda_{\text{max}}(\text{Li}^+) \approx 15 \text{ nm}.$$

Задача 1. Движението на електрона по кръгова орбита във водородния атом е еквивалентно на протичане на електричен ток. Оценете в модела на Бор магнитния диполен момент на електрона, свързан с орбиталното му движение по орбитата с $n=1$, т.е. в основното състояние на атома.

Задача 2. Развитие на модела на Бор за водородния атом

а) Пресметнете индукцията на магнитното поле **B** (посока и големина) в центъра на водородния атом, създадена от движещия се електрон по първата орбита на Бор.

б) Тъй като протонът притежава магнитен момент

$$\mu_p = \frac{q_0 \hbar}{2m_p},$$

който има компоненти $\pm\mu_p$ по посоката на полето, енергията на атома в основното състояние се променя. Оценете разцепването на енергетичното ниво в това състояние.

Полезни константи. $q_0 = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ C}$, $\mu_0 = 4\pi \cdot 10^{-7} \text{ N/A}^2$, $m_e = 9,1 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$, $m_p = 1838m_e$.

Решение. а) Движението на електрона по първата орбита на Бор е свързано с протичане на ток

$$I = q_0 v = \frac{q_0}{T} = \frac{q_0 v}{2\pi r_0},$$

където

$$v = \frac{e^2}{\hbar}, \quad r_0 = \frac{\hbar^2}{m_e e^2}.$$

След заместване в израза за тока намираме

$$I = \frac{q_0 m_e e^4}{2\pi \hbar^3} = \frac{q_0}{\pi \hbar} |\varepsilon_1|, \quad |\varepsilon_1| = \frac{m_e e^4}{2\hbar^2}.$$

От закона на Био–Савар следва, че индукцията на магнитното поле в центъра е насочена перпендикулярно на равнината на орбитата и

$$\mathbf{B} = \frac{\mu_0}{4\pi} \oint \frac{I(d\vec{l} \times \mathbf{r})}{r^3}, \quad B = \frac{\mu_0}{4\pi r_0^3} I(2\pi r_0) r_0 = \frac{\mu_0 I}{2r_0}.$$

Окончателно намираме

$$B = \frac{\mu_0}{2\pi \hbar} q_0 \frac{|\varepsilon_1|}{r_0} \approx 12,5 \text{ T}.$$

б) Създаденото магнитно поле действа на протона и променя енергията на атома. Към енергията на електрона се добавя енергията на взаимодействие на магнитния момент на ядрото с магнитното поле. Тогава имаме

$$\varepsilon' = \varepsilon_1 - \mu_p B, \quad \varepsilon'' = \varepsilon_1 + \mu_p B.$$

Следователно енергетичното разстояние между двете нива е

$$\Delta\varepsilon = \varepsilon'' - \varepsilon' = 2\mu_p B = \frac{q_0 \hbar}{m_p} B \approx 7,8 \cdot 10^{-7} \text{ eV} \approx 0,78 \text{ } \mu\text{eV}.$$