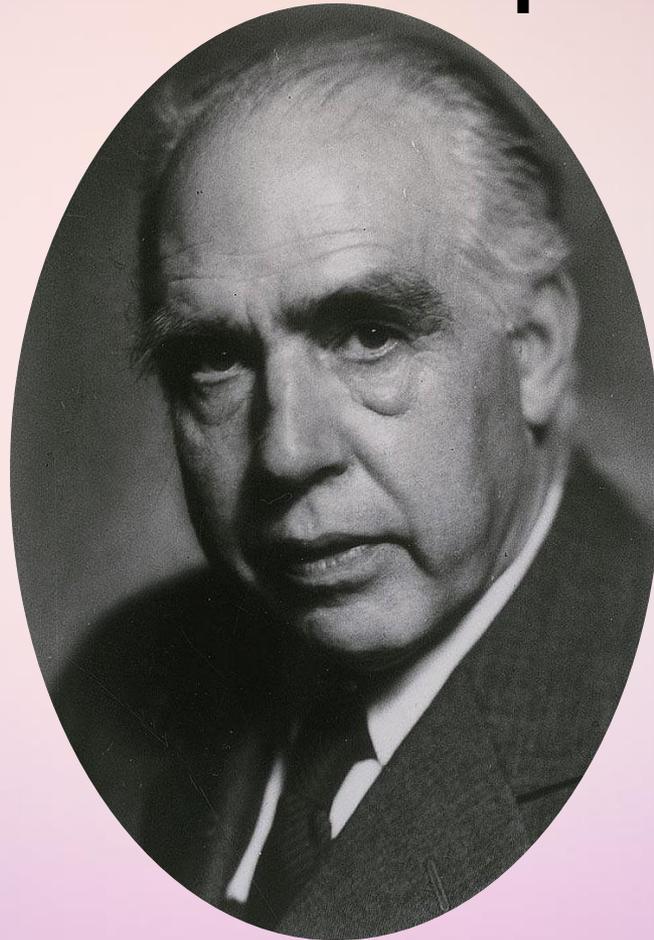
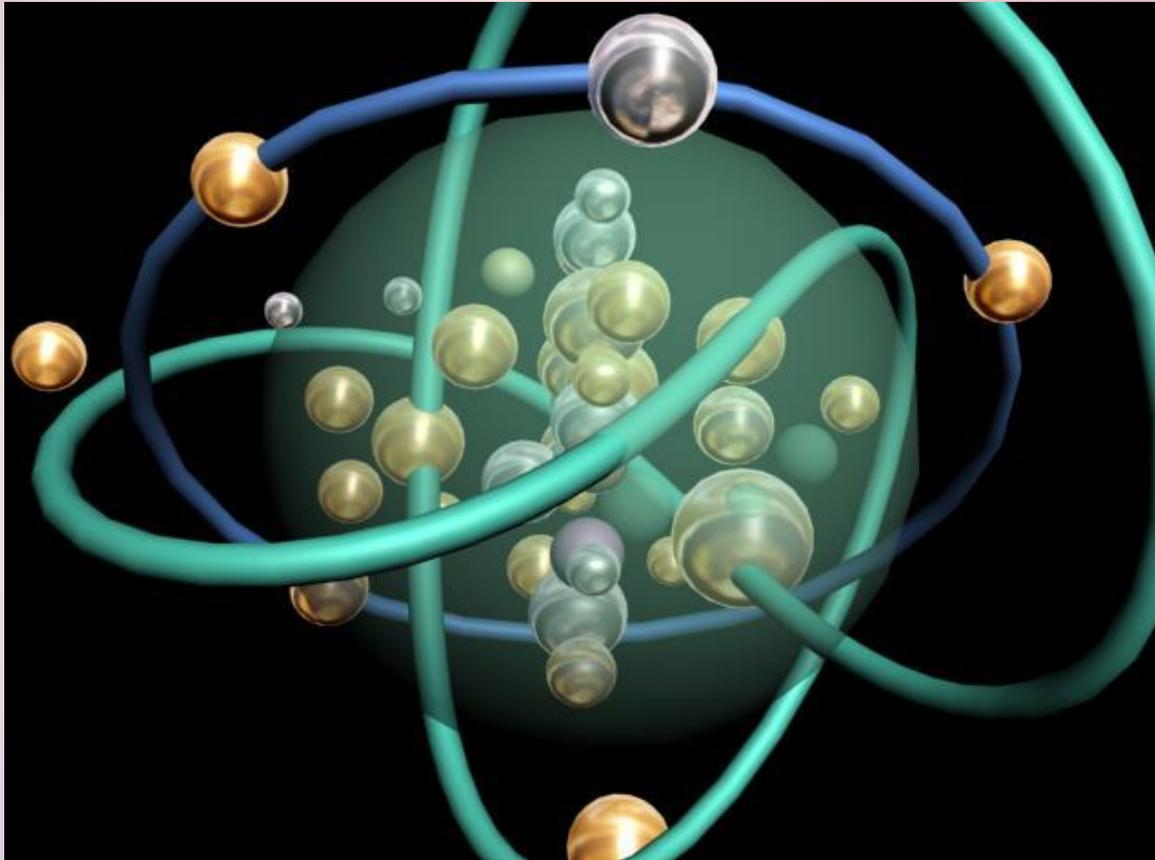


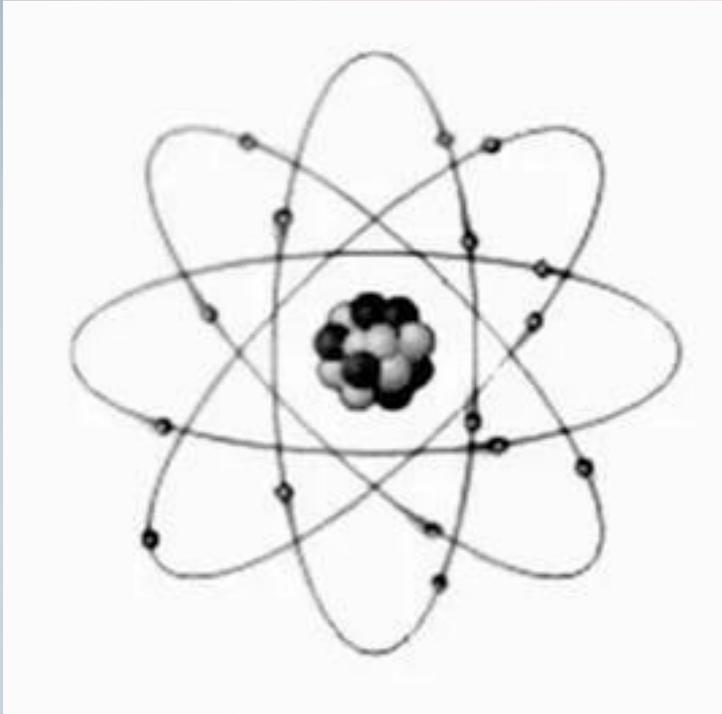
Трудности теории Бора Квантовая физика



Квантовая механика— раздел теоретической физики, описывающий физические явления, в которых действие сравнимо по величине с постоянной Планка.

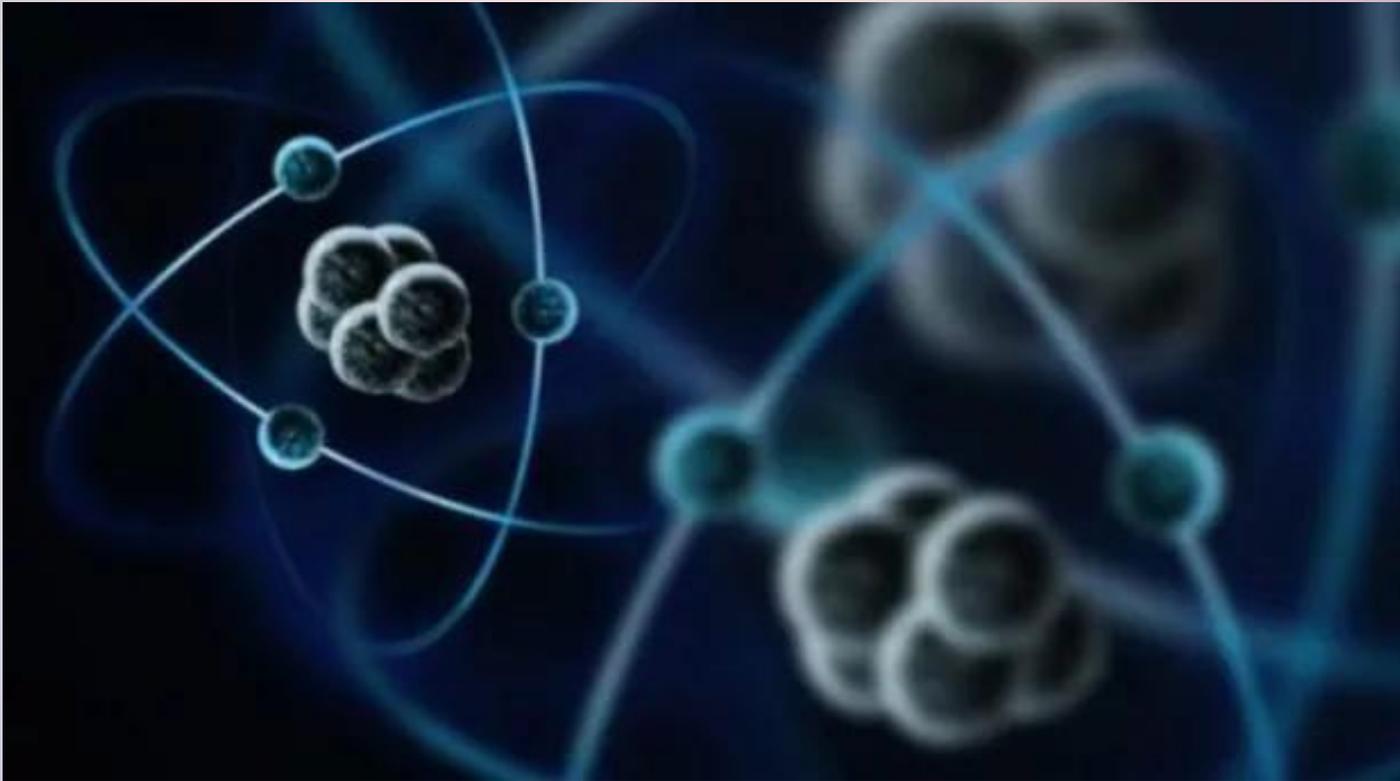


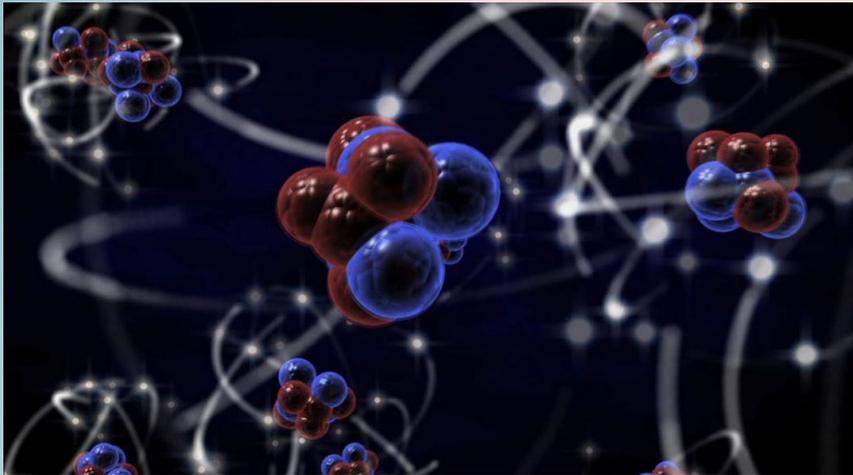
Наибольший успех теория Бора имела применительно к атому водорода, для которого оказалось возможным построить количественную теорию спектра. Однако построить количественную теорию для следующего за водородом атома гелия на основе боровских представлений не удалось.



Относительно атома гелия и более сложных атомов теория Бора позволяла делать лишь качественные (хотя и очень важные) заключения. Это неудивительно. Теория Бора является половинчатой, внутренне противоречивой. С одной стороны, при построении теории атома водорода использовались обычные законы механики Ньютона и давно известный закон Кулона, а с другой — вводились квантовые постулаты, никак не связанные с механикой Ньютона и электродинамикой Максвелла.

Введение в физику квантовых представлений требовало радикальной перестройки как механики, так и электродинамики. Эта перестройка была осуществлена в начале второй четверти XX века, когда были созданы новые физические теории: квантовая механика и квантовая электродинамика.



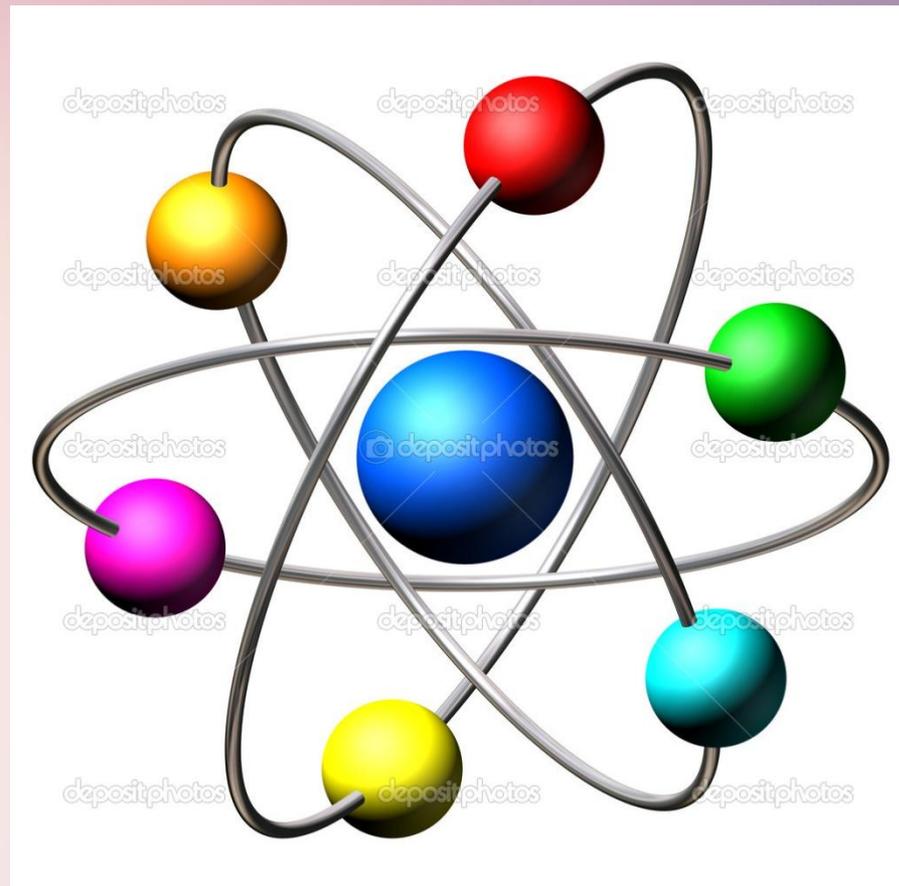


Постулаты Бора оказались совершенно правильными. Но они выступали уже не как постулаты, а как следствия основных принципов этих теорий. Правило же квантования Бора, как выяснилось, применимо далеко не всегда.



Представление об определенных орбитах, по которым движется электрон в атоме Бора, оказалось весьма условным. На самом деле движение электрона в атоме имеет очень мало общего с движением планет по орбитам. Если бы атом водорода в наинищшем энергетическом состоянии можно было бы сфотографировать с большой выдержкой, то мы увидели бы облако с переменной плотностью.

Большую часть времени электрон проводит на определенном расстоянии от ядра. Это расстояние можно принять за грубое подобие радиуса орбиты. Фотография атома совсем не походила бы на привычный рисунок Солнечной системы, а, скорее, напоминала бы расплывчатое пятно, полученное при фотографировании бабочки, порхающей около фонаря.



Бор высказал предположения, которые были названы **постулатами Бора**.

- ***Первый постулат:*** атом может находиться только в особенных стационарных или квантовых состояниях, каждому из которых отвечает определённая энергия. В стационарном состоянии атом не излучает электромагнитных волн.

Второй постулат (правило частот): излучение и поглощение энергии в виде кванта света происходит лишь при скачкообразном переходе электрона из одного стационарного состояния в другое. Величина светового кванта равна разности энергий тех стационарных состояний, между которыми совершается скачок электрона.

$$h\nu = E_n - E_k$$

Отсюда следует, что изменение энергии атома, связанное с излучением при поглощении фотона, пропорционально частоте ν :

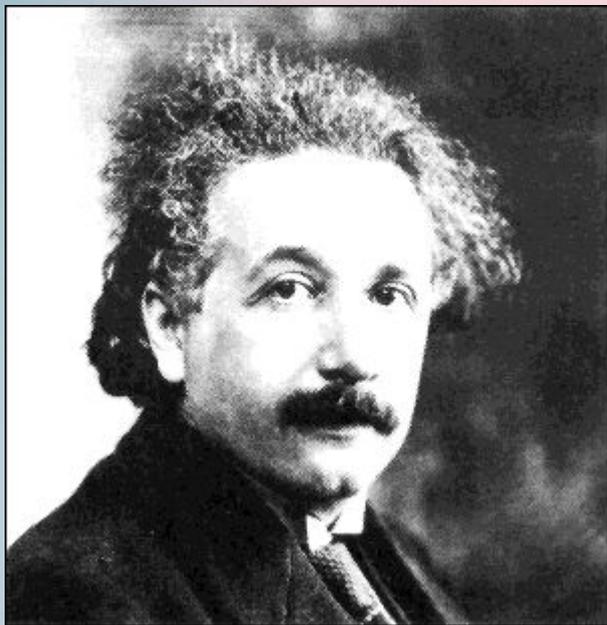
$$\omega = \frac{E_n}{\hbar} - \frac{E_k}{\hbar} \quad \text{или} \quad \nu = \frac{E_n}{h} - \frac{E_k}{h}$$

Правило квантования орбит: из всех орбит электрона возможны только те, для которых момент импульса равен целому кратному постоянной Планка:

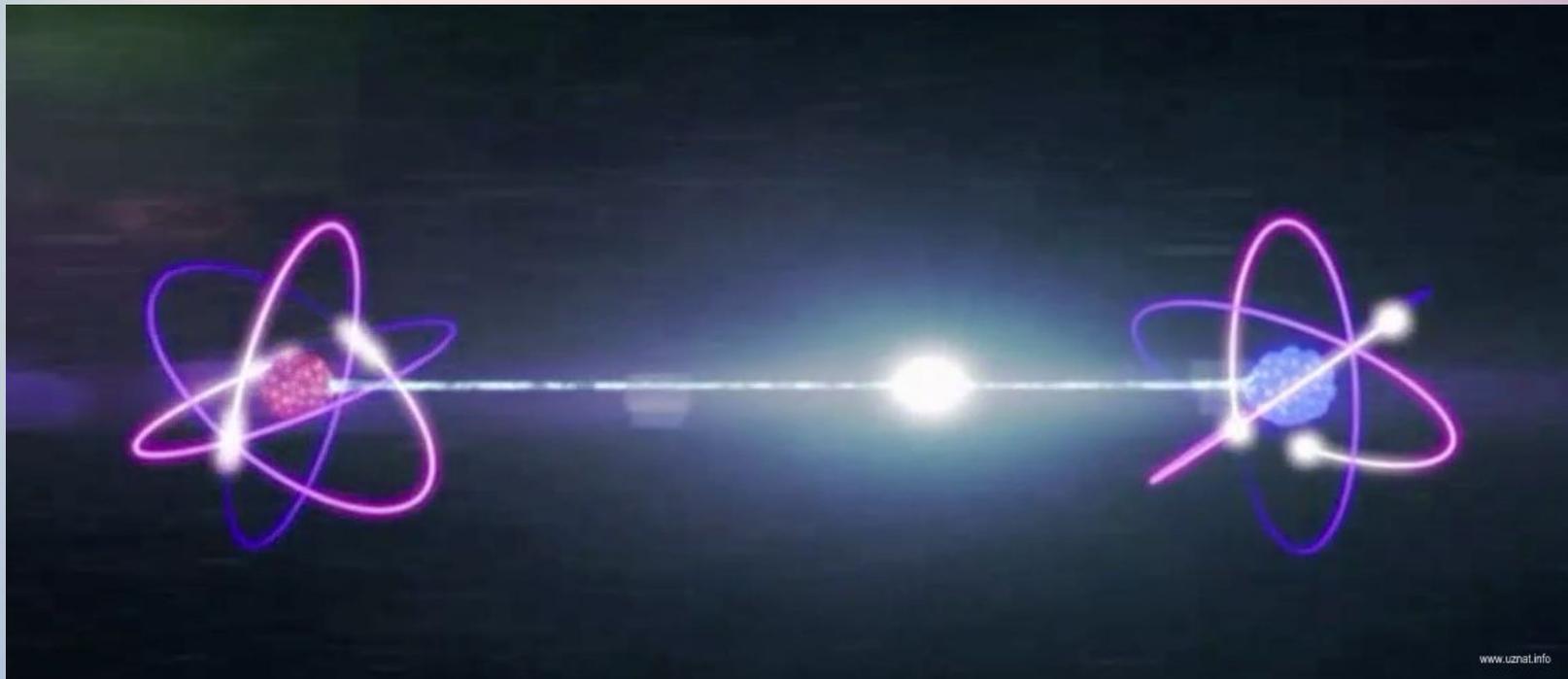
$$m_e v r = n \hbar$$

где $n = 1, 2, 3, \dots$ – главное квантовое число.

Квантовая механика в основном была создана в течение первых трёх десятилетий 20-го века благодаря работам М. Планка, А. Эйнштейна, Н. Бора, А. Комптона, Л. де Бройля, В. Паули, М. Борна, В. Гейзенберга, Э. Шрёдингера и П. Дирака.



Физической основой квантовой механики является корпускулярно-волновой дуализм, согласно которому любому материальному объекту – частице или волне – присущи как волновые, так и корпускулярные свойства. Корпускулярно-волновой дуализм наиболее ярко проявляется у микрообъектов. Его следствием является необходимость отказа от некоторых классических представлений, возникших в результате наблюдений за движением макроскопических тел. В частности волновые свойства частиц несовместимы с представлением об их движении по определённым классическим траекториям.

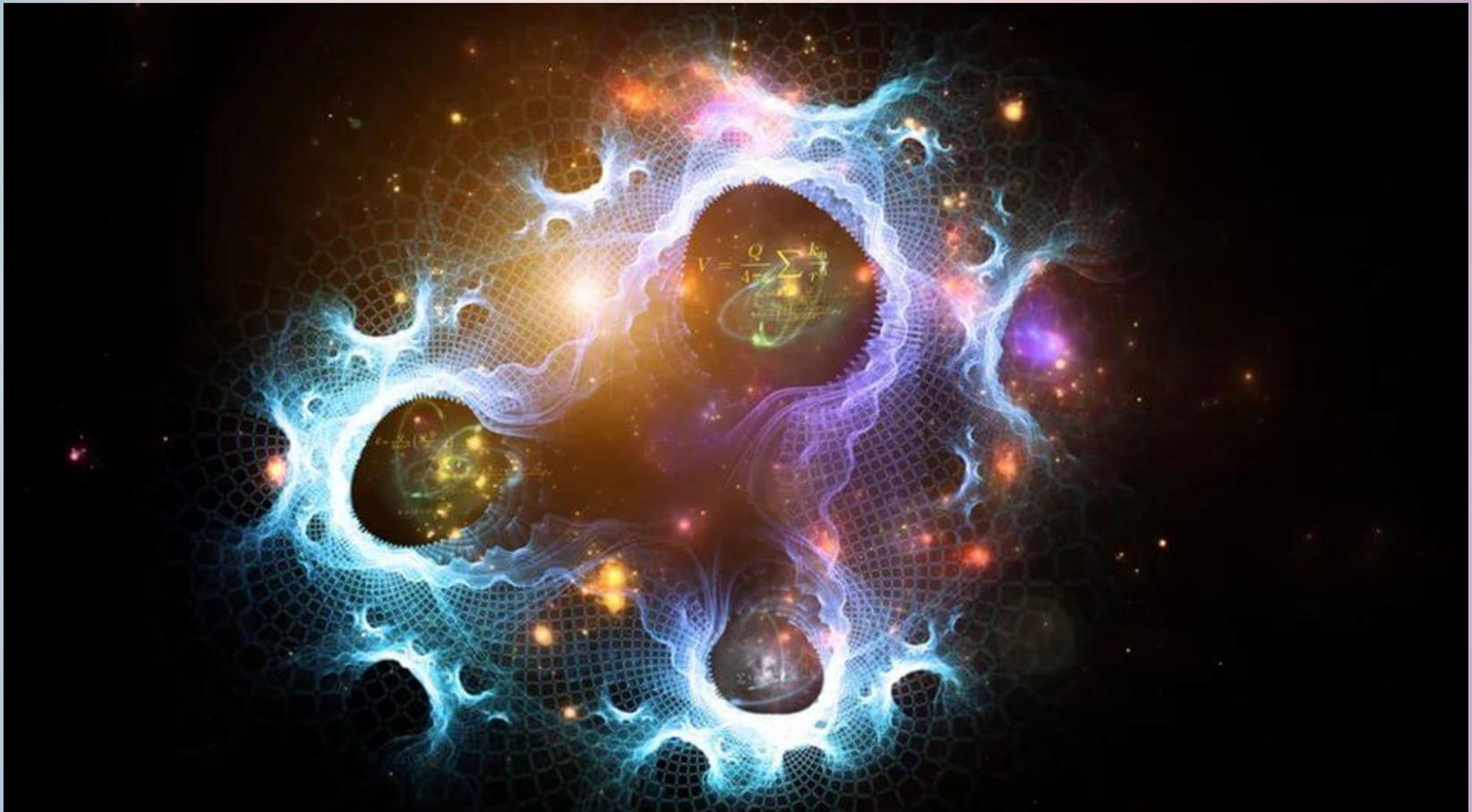


Волновые свойства частицы, например, электрона, требуют и соответствующего “волнового” её описания. В квантовой механике частица описывается комплексной функцией, называемой волновой функцией, амплитуда которой зависит от пространственных координат x и времени. Волновая функция полностью определяет состояние частицы. Как известно интенсивность любой волны определяется квадратом её амплитуды. Интенсивность волны, связанной с материальной частицей, определяется квадратом модуля волновой функции.

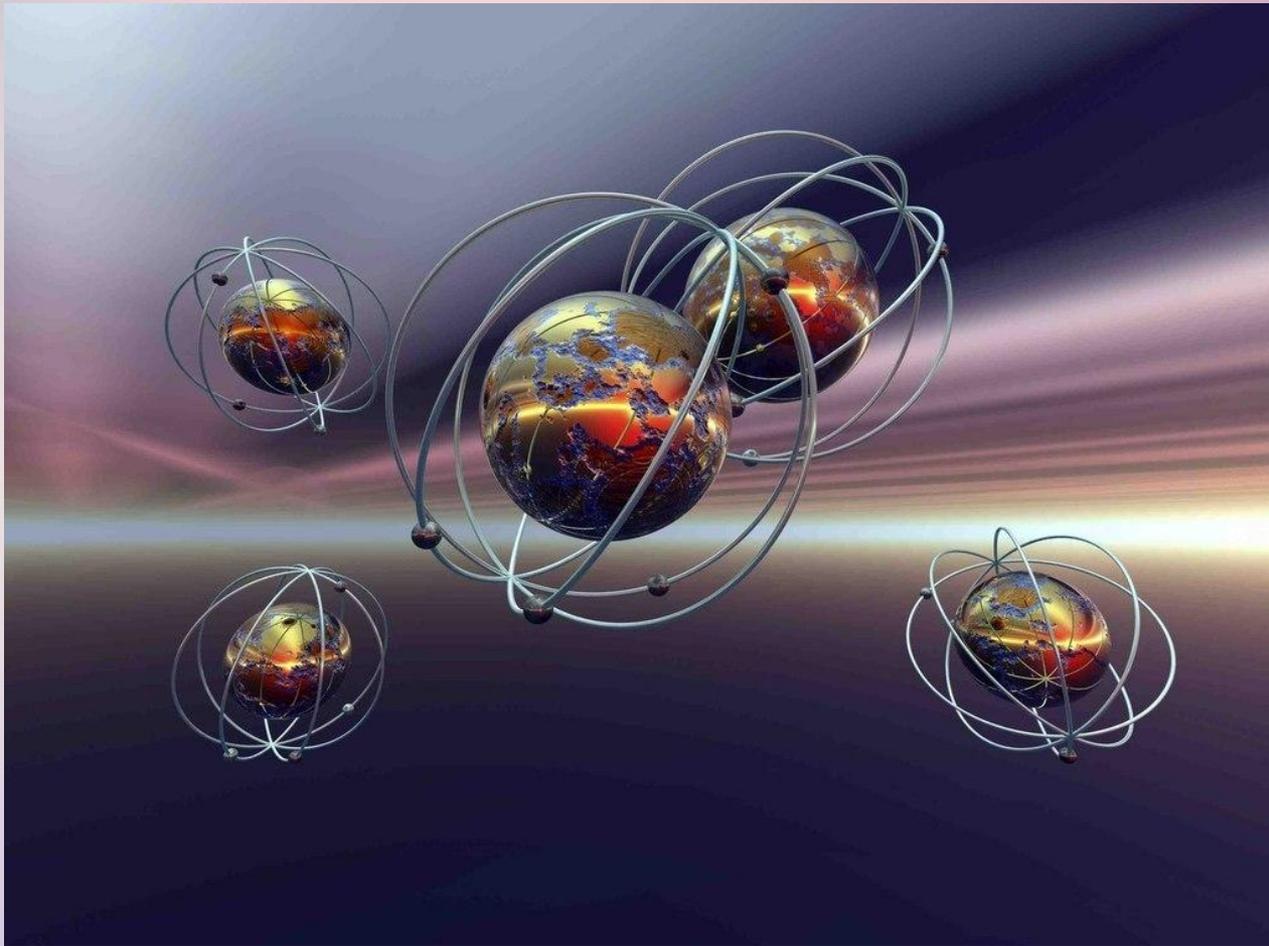


Однако, есть вероятность обнаружить частицу в момент времени в единичном объеме вокруг точки пространства с координатами x .

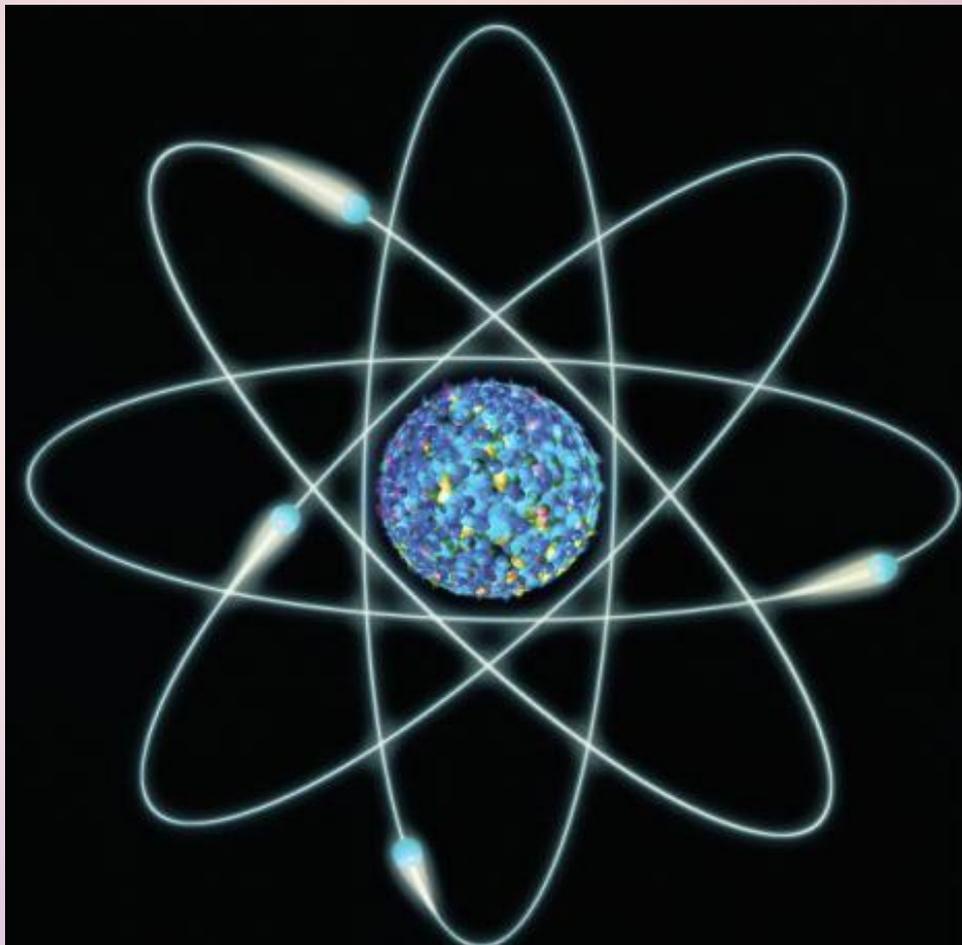
Этот вероятностный характер поведения частицы, во-первых, позволяет отразить волновые свойства объектов при их корпускулярном описании и, во-вторых, принципиально отличает квантовую систему от классической.



В квантовой механике можно говорить лишь о вероятности обнаружить частицу в каком-то месте пространства, даже при полном знании её начальных кинематических характеристик и всех внешних полей, действующих на неё. И это не связано с какой-то неполнотой квантовых законов, а заложено в природе микрообъектов.



В квантовой механике для нахождения всего набора (спектра) возможных значений какой-либо физической величины обычно решаются дифференциальные уравнения, в которых каждой наблюдаемой физической величине (энергии, импульсу, угловому моменту, координате и так далее) сопоставляется оператор (обычно дифференциальный). Во многих случаях этот спектр является дискретным (квантованным).



Эволюция квантовой системы в нерелятивистском случае описывается волновой функцией, удовлетворяющей уравнению Шредингера

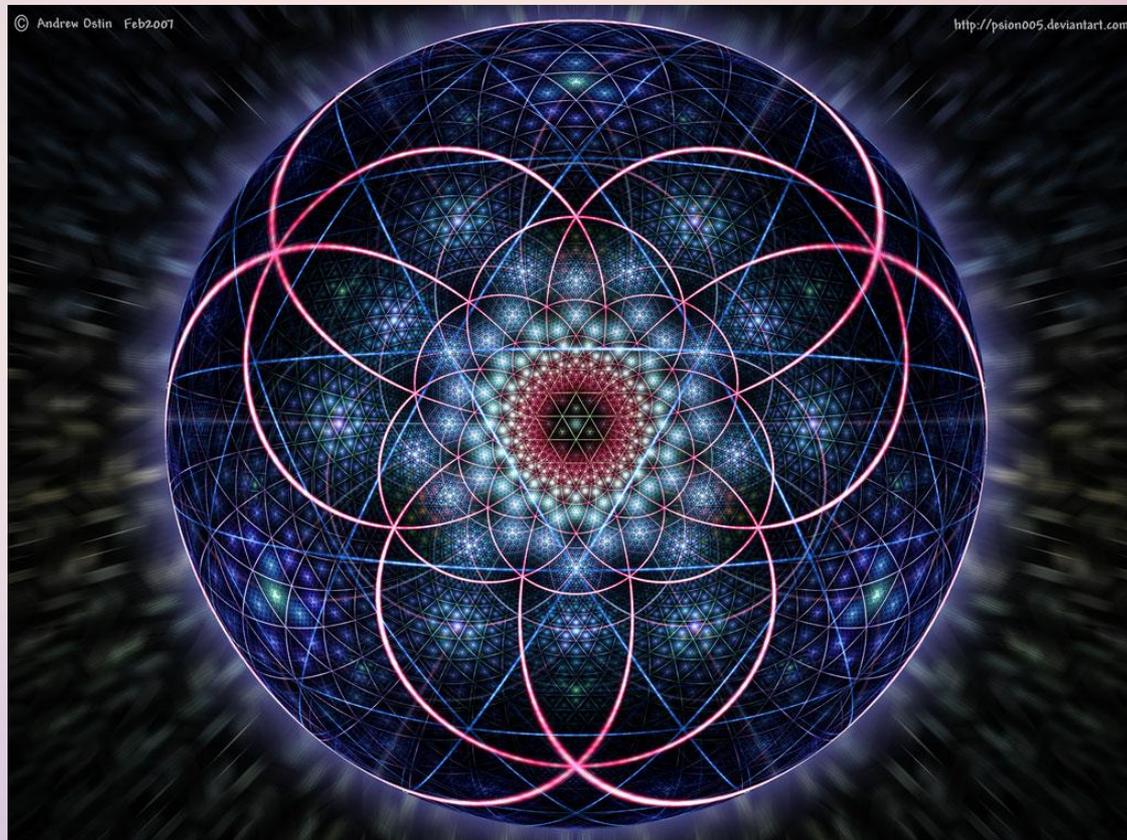
$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H} \psi,$$

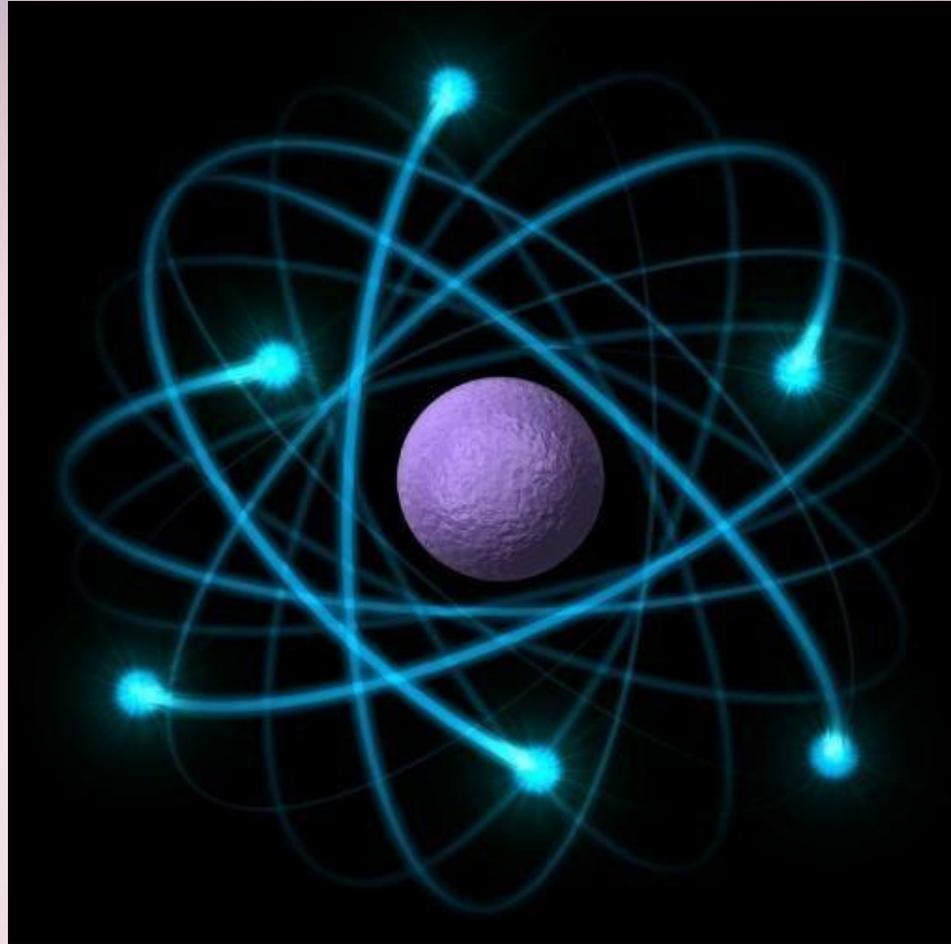
где $\psi(x,y,z,t)$ - волновая функция, \hat{H} - оператор Гамильтона (оператор полной энергии системы). В нерелятивистском случае

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{U}(x, y, z),$$

где m – масса частицы, \hat{p} – оператор импульса, $\hat{U}(x,y,z)$ – оператор потенциальной энергии частицы.

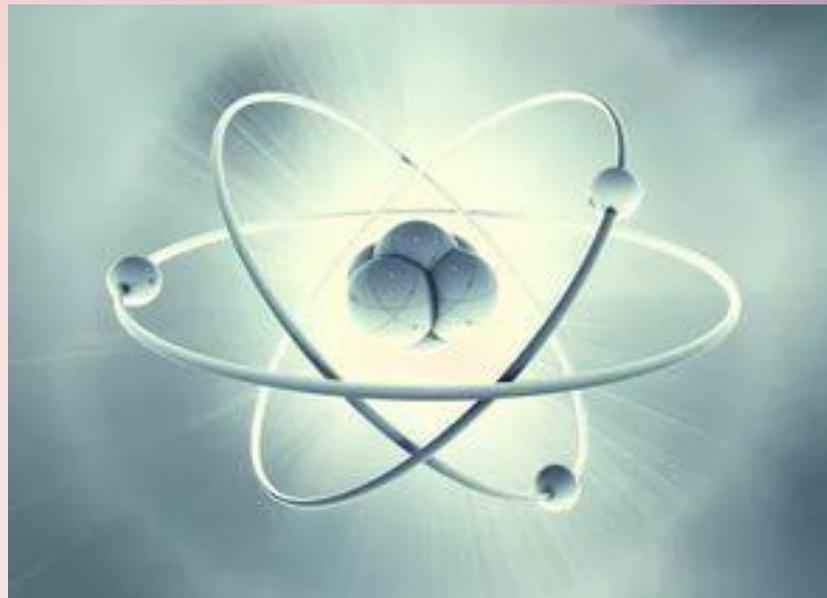
Задать закон движения частицы в квантовой механике - это значит, определить значение волновой функции в каждый момент времени в каждой точке пространства. Уравнение Шредингера играет в квантовой механике такую же роль, как и второй закон Ньютона в классической механике. Знание волновой функции квантовой системы и операторов физических величин позволяет вычислить все физические величины, характеризующие данную квантовую систему.





В силу недетерминированности квантово-механических предсказаний эти вычисляемые (и наблюдаемые) физические величины носят вероятностный характер, т. е. являются статистическими средними. В результате реализации такой программы можно получить исчерпывающее квантово-механическое описание поведения частицы (системы) в изолированном состоянии или во внешних полях.

Так квантово-механическая задача для атома водорода сводится к решению уравнения Шрёдингера для электрона в кулоновском поле протона, с которым он связан. Решением этой задачи является дискретный (квантованный) спектр энергетических состояний (уровней) электрона, квантовые числа, характеризующие электрон в каждом из этих состояний, и, конечно, сами волновые функции электрона в каждом состоянии.



Если электрон в атоме водорода не находится в самом нижнем энергетическом состоянии, то атом неустойчив и будет претерпевать эволюцию, вызванную переходами электрона на более низкие энергетические уровни. Вероятности этих переходов также вычисляются методами квантовой механики.