

Державний вищий навчальний заклад
«Прикарпатський національний університет імені Василя Стефаника»
Факультет природничих наук
Кафедра хімії

МАТЕРІАЛ
для практичних занять
з дисципліни «Квантова хімія»

Спеціальність 102 «Хімія»

Викладач

к.т.н. Хацевич О.М.

Івано-Франківськ,

2020 рік

Програма практичних занять

Тема 1. Розвиток уявлень про будову атома. Історія виникнення квантової хімії. Елементарні частинки, їх значення і поширення. (2 год.)

Тема 2. Основні постулати квантової механіки. Оператори фізичних величин. Рівняння Шредінгера. (1 год.)

Тема 3. Атомні орбіталі. Енергія атомних орбіталей. Спектри атомів. Властивості багатоелектронних атомів. Поняття про атомні терми. (2 год.)

Тема 4. Квантово-хімічне трактування періодичної системи. Особливості будови електронних оболонок атомів елементів у головних і побічних групах періодичної системи. (1 год.)

Тема 5. Орбіталі Слетера-Зенера, розрахунок константи екранування (2 год.).

Тема 6. Типи хімічного зв'язку. Поняття гібридизації. Гібридні зв'язки: особливості та значення. (2 год.)

Практичне заняття

Тема 1-2. Вступ. Будова атома. Елементарні частинки.

План

1. Вступ. Історія виникнення квантової хімії.
2. Розвиток уявлень про будову атома.
3. Сучасне уявлення про будову атомного ядра.
4. Елементарні частинки, їх значення і поширення.
5. Парадокси квантової хімії.

Література

1. Булавін Л. А., Тартаковський В. К. Ядерна фізика. — Знання. — Київ: ВТД «Університетська книга», 2005. — 439 с.
2. Вакарчук І. О. Квантова механіка : підручник / І. О. Вакарчук. - 4-те вид., доп.- Львів : ЛНУ імені Івана Франка, 2012. - 872 с.
3. Юхновський І. Р. Основи квантової механіки. - К.: Либідь, 2010. – 435 с.
4. Слета Л.А., Иванов В.В. Квантовая химия. –Харьков: Фолио, 2007. -476 с.
5. Боженко К.В. Основы квантовой химии. - М.: Российский университет дружбы народов, 2010.- 128 с.
6. Черановський В.О., Іванова К.Ф. Основи будови речовини. Навчальний посібник для студентів хімічного факультету –Харків: ХНУ, 2003. -121 с.
7. Кларк Т. Компьютерная химия. -М.: Мир, 1990.- 381 с.
8. Вальтер А. К, Залюбовський И. И. Ядерная физика. — Харьков: Основа, 1991. — 480 с.

Вступ

В ХХ столітті фізика, а разом з нею і все розуміння про оточуюче середовище зазнали значних та глибоких змін. До кінця ХІХ ст. система фізичної науки, в основі якої лежали механіка Ньютона і електродинаміка Максвелла – Герца, здавалася повністю завершеною. Але вже в перші роки ХХ століття лорд Кельвін, один із найбільших фізиків свого часу, в лекціях, прочитаних в Балтиморському університеті, відмітив, що на бездоганно чистому небосхилі фізики все ж можна спостерігати дві невеликі хмарини. Перша з цих хмарин – це негативний результат досліду Майкельсона, проведення якого планували з метою вирішення всіх протиріч в проблемі захоплюючого і незахоплюючого ефіру. Отже, воно затьмарювало картину блискучих успіхів класичної електродинаміки Максвелла – Герца. Друга хмара символізувала труднощі в створенні теорії випромінювання абсолютно чорного тіла і свідчило про обмеженість статистичної механіки, основаної на класичній механіці Ньютона. Таким чином, на початку ХХ століття були

знайдені дві, здавалося не зв'язані між собою групи явищ, що свідчили про неможливість використання звичайної класичної теорії електромагнітного поля до процесів взаємодії з речовиною і процесів, що відбуваються в атомі. Перша група явищ була зв'язана з встановленням на досліді двійної природи світла (дуалізм світла); друга — з неможливістю пояснити на основі класичних уявлень стійке існування атома, а також спектральні закономірності, відкриті при вивченні випромінювання світла атомами. Із цих, як здавалось на перший погляд, несуттєвих проблем виросла вся сучасна фізика. Всупереч початковим побоюванням, сучасна фізика не спростувала класичні теорії. Вона показала, що класична фізика зовсім не обов'язково повинна бути використана до всіх явищ. Встановлення зв'язку між цими групами явищ і спроба пояснити їх на основі нової теорії привели, в кінцевому рахунку, до відкриття законів квантової механіки.

Одним із вирішальних етапів при розробці квантової теорії була гіпотеза М. Планка, яка дозволила вперше ввести нову фізичну константу h — елементарний квант дії. Постійна Планка має першочергове значення в механіці мікрочастинок. Відкриття постійної Планка було першим серйозним попередженням про неготовність механічного перенесення закономірностей з області макросвіту в область мікрочастинок та їх систем. Наступні експериментальні дослідження показали, що явища, в яких стала Планка грає суттєву роль треба вважати квантовими.

Як виявилось, квантове явище не може бути витлумачено в рамках класичної фізики. В 20-х роках минулого століття були відкриті нові експериментальні факти, які остаточно заставили вчених відказатися від спроби використати закони класичної фізики для пояснення квантових явищ. Було показано, що електрони набувають хвильових властивостей, проявляючи дифракцію при проходженні через кристал. Пізніше було доказано, що явище дифракції властиве не тільки електронам, але і взагалі всім мікрочастинкам. Рух мікрочастинок виявився більш подібним до руху хвиль, а ніж переміщенню матеріальної точки по визначеній траєкторії. Як показали експерименти, явище дифракції несумісне з уявленням про рух частинок по траєкторіях. При вивченні властивостей мікрочастинок вченим вдалося знайти неспростовні факти, що свідчать про хвильово-корпускулярні властивості мікрочастинок. Дослідним шляхом було доказано, що об'єкти досліджень, які класична фізика розглядала як електромагнітні хвилі, володіють корпускулярними властивостями. І, навпаки, для об'єктів, які володіли всіма неспростовними ознаками частинок, виявились переважаючі хвильові властивості. Таким чином, була відкрита принципово нова і зовсім загальна закономірність. Глибоке осмислення цих експериментальних даних привело вчених до створення квантової механіки, що змогла знайти здавалося б в хаосі мікроявищ вражаючі по своїй загальності та красі закономірності.

Дослід Штерна–Герлаха.

Цей дослід експериментально підтвердив, що атоми мають магнітний момент, проекція якого на напрям зовнішнього магнітного поля приймає лише певні значення (просторово квантована). Здійснено в 1922 р. О. Штерном¹ і німецьким фізиком В. Герлахом, які досліджували проходження пучка атомів Ag (а потім і інших елементів) в сильно неоднорідному магнітному полі (див. рис. 21) з метою перевірки

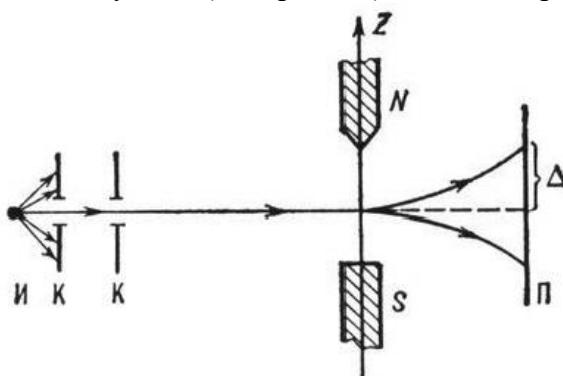


Рис. 1. Схема досліду Штерна-Герлаха:

I - джерело атомів; K - щілини, що формують вузький пучок;
N, S - полюси магніту, що створює постійне неоднорідне поле;
П - пластинка, на яку осідають атоми; Δ - величина відхилення пучка від первинного напрямку.

Дослід виконується у вакуумі.

теоретично отриманої формули просторового квантування проекції m_z на напрям Z магнітного моменту атома μ_0 : $\mu_z = \mu_0 m$ ($m = 0; \pm 1; \dots$).

На атом, що володіє магнітним моментом і рухомий в неоднорідному уздовж Z магнітному полі N, діє сила, яка відхиляє його від початкового напрямку руху. Якщо проекція магнітного моменту атома могла б змінюватися безперервно, то на пластинці П спостерігалася б розмита широка смуга. Однак у досліді Штерна-Герлаха було виявлено розщеплення пучка атомів на 2 компоненти, симетрично зміщені відносно первинного напрямку поширення на величину Δ - на платівці з'явилися дві вузькі смуги. Це вказувало на те, що проекція магнітного моменту атома μ_z на напрям поля N приймає тільки два відрізняються знаком значення $\pm \mu_0$, тобто μ_0 орієнтується уздовж N і в протилежному напрямку. Величина магнітного моменту атома μ_0 , виміряна в досліді по зсуву Δ , виявилася рівною магнетону Бора.

Дослід Штерна - Герлаха відіграв велику роль у подальшому розвитку уявлень про електрон. Згідно квантової теорії Бора-Зоммерфельда, орбітальний і, отже, магнітний моменти використовуваних в досліді атомів з одним електроном в зовнішній оболонці дорівнюють нулю, тому такі атоми не повинні були б взагалі відхилятися магнітним полем. Дослід Штерна - Герлаха показав, що всупереч теорії ці атоми мають магнітний момент. Дослід Штерна - Герлаха, а також інші більш ранні експерименти привели в 1925 р. Дж. Ю. Уленбека і С. Гаудсмита до гіпотези існування *власного механічного моменту електрона - спина*.

Дослід Бібермана - Сушкина - Фабриканта .

У другій половині XX сторіччя чималі зусилля вчених, що працюють в галузі фізики мікрочастинок, були присвячені можливості експериментального підтвердження одного з основних положень квантової механіки - принципу невизначеності Гейзенберга. Для цього було необхідно здійснити експерименти, які дозволяли б наочно встановити координати та імпульс мікрочастинок. Серйозний успіх при вирішенні цієї фундаментальної задачі мав дослід, здійснений радянськими фізиками Л. Біберманом, Н. Сушкіним і В. Фабрикантом. Принципова схема пристрою, що дозволяє прямим шляхом визначати положення електрона, представлена на рис. 22. На екран зі щілиною АВ шириною Δx ,

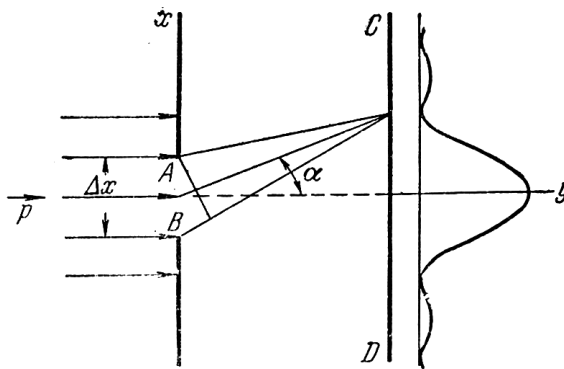


Рис. 2. Визначення положення електрона за допомогою екрана із щілиною.

який можна розглядати як відповідну діафрагму, ліворуч падає електрон в напрямку, перпендикулярному до площини цієї діафрагми. Нехай вісь ОХ спрямована паралельно діафрагмі, а вісь ОУ розташована перпендикулярно до неї. Якщо на флуоресцюючому екрані, розташованому праворуч від діафрагми, за характерними сцинтиляцій вдається виявити електрон, то можна стверджувати, що він пройшов через щілину АВ. У цьому випадку « Місце електрона » у момент проходження через щілину можна визначити як положення щілини щодо інших частин приладу, оскільки положення щілини в діафрагмі буде фіксованим щодо даної системи відліку. Отже, положення електрона в момент проходження через щілину буде відоме з похибкою Δx , яка дорівнює ширині щілини. Звужуючи щілину, можна підвищувати точність визначення положення електрона, причому межі для підвищення точності теоретично не існує.

На перший погляд може здатися, що і імпульс електрона можна встановити з усією визначеністю. Якщо взяти до уваги, що напрямок руху електрона зліва від діафрагми перпендикулярно її площині (рис. 11), то x -складова імпульсу зліва від екрана дорівнює нулю, а y -складова дорівнює p . Таким чином, в такій ситуації має імпульс електрона певне значення. Однак при проходженні через щілину плоска хвиля де Бройля, що описує рух вільного електрона, відчуває дифракцію. Якщо замість одного електрона в напрямку осі ОУ через діафрагму рухатиметься паралельний потік мікрочастинок, тоді на фотопластині або флуоресцюючому екрані з'являється дифракційна картина, що складається з розмитого головного максимуму і слабших поінтенсивності максимумів більш високих порядків, розташованих симетрично щодо осі ОУ (рис. 22). Характер дифракційної картини свідчить, що після проходження через щілину більшість електронів продовжує рухатися в початковому напрямку. Проте, з'являються електрони, які змінюють свій напрямок і потрапляють в різні точки фотопластинки з мінливою ймовірністю. Безумовно, що з усією очевидністю така дифракційна картина виникає тоді, коли через щілину одночасно проходить велике число електронів.

Радянські фізики Л. Біберман, Н. Сушкін і В. Фабрикант експериментально довели, що при проходженні через дифрагуючу систему окремих електронів поодиноці (такі електрони поведуться абсолютно незалежно один від одного) через відносно великі проміжки часу при достатній тривалості досліду виникає дифракційна картина, що точно збігається з тією, яку дають потоки з інтенсивністю в десятки мільйонів електронів. У цьому досліді проміжок часу між двома послідовними проходженнями електронів через дифрагуючу систему приблизно в 30 000 разів перевищував тривалість проходження всього приладу одним окремим електроном. Це свідчить про те, що зміна напрямку польоту електрона, що веде до виникнення характерної дифракційної картини, відбувається при індивідуальному проходженні електронів через дифрагуючу систему.

У цьому досліді установка дозволяє виміряти положення мікрочастинок з невизначеністю Δx , яку в принципі можна зробити як завгодно малою величиною. Однак при жорстко закріпленій діафрагмі неможливо врахувати віддачу, випробовувану діафрагмою при проходженні електрона.

Тому додатковий імпульс, що набувається часткою, залишається у відомих межах Δp_x невизначеним. Можна довести, що невизначеності Δx і Δp_x пов'язані співвідношенням:

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq 2\pi\hbar.$$

З рис. 22 видно, що

$$\Delta p_x = p \sin \alpha = \frac{2\pi\hbar}{\lambda} \sin \alpha \quad (11-1)$$

Якщо враховувати попадання електрона на фотопластину в межах тільки головного дифракційного максимуму, кут α буде кутом між віссю ОУ і напрямком до першого дифракційного мінімуму. Положення цього мінімуму визначається умовою, щоб різниця ходу хвиль „дифрагованих від верхнього і нижнього країв діафрагми, дорівнювала довжині хвилі λ . Звідси отримуємо (див. рис. 22)

$$\Delta x \sin \alpha = \lambda \quad (11-2)$$

або

$$\Delta x = \frac{\lambda}{\sin \alpha} \quad (11-2a)$$

Перемноживши ліві і праві частини співвідношень (11-1) і (11 -2a) , отримуємо

$$\Delta x \Delta p_x = \frac{2\pi\hbar}{\lambda} \sin \alpha \frac{\lambda}{\sin \alpha} = 2\pi\hbar \quad (11-3)$$

Якщо врахувати побічні дифракційні максимуми , то замість умови (11-3) доведеться записати

$$\Delta x \cdot \Delta p_x = n2\pi\hbar \quad (11-4)$$

Отже , в загальному вигляді

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq 2\pi\hbar \quad (11-5)$$

Співвідношення (11-5) відображає принцип невизначеності Гейзенберга .Таким чином , дослід Бібермана - Сушкіна - Фабриканта є експериментальним підтвердженням одного з основних положень квантової механіки - принципу невизначеності Гейзенберга .

2. Будова атома

Останньою відомою границею поділу речовини є елементарні частинки – протони, нейтрони та інші. Атомами називають найбільш прості електрично нейтральні системи, які складаються з елементарних частинок. Більш складні системи, молекули – складаються з декількох атомів. Атоми хімічних елементів – це структурні одиниці, які утворюють речовини. Вони є найменшими частинками хімічних елементів, носіями їхніх хімічних властивостей.

Атом складається з позитивного ядра, яке містить протони, нейтрони, та електронів, що рухаються навколо ядра. Атоми бувають стійкі (ті, що існують дуже довго) і нестійкі або радіоактивні, які перетворюються в інші атоми в результаті змін, які відбуваються в ядрі.

Кількість електронів у нейтральних атомах дорівнює позитивному заряду ядра; заряд ядра рівний за величиною і протилежний за знаком сумі зарядів електронів. При видаленні одного чи кількох електронів від атома утворюється позитивний іон, при додаванні електрона – негативний іон.

Число електронів в атомі і відповідний позитивний заряд ядра визначає поведінку атомів у хімічних реакціях.

Хімічний елемент – це сукупність атомів з однаковим зарядом ядра. Заряд ядра визначає позицію елемента в періодичній системі Д. І. Менделєєва. Порядковий номер елемента в періодичній системі дорівнює заряду ядра атома елемента [1].

Число атомів у одному грамі будь-якого елемента називається *числом Авогадро* (N_0). Точні виміри доводять, що

$$N_0 = 6,023 \cdot 10^{23} \text{ г} - \text{атом}^{-1} \quad (1)$$

Грам-атом та грам молекула визначає кількість елемента або речовини в гармах,що чисельно дорівнює його атомній масі або молекулярній масі.

Таке ж число (N_0) молекул в грам-молекулі будь-якої індивідуальної речовини. Величина атомної маси, яка виражається відношенням маси атома елемента до $1/12$ маси атома C^{12} , разом з *числом Авогадро* є однією з найбільш важливих в хімії і фізиці *універсальних сталих*; вона не залежить від природи речовини та її агрегатного стану.

Число Авогадро розраховують багатьма способами, яких відомо близько 60. Розглянемо два з них – найбільш точний і найбільш наочний.

1. Під час розпаду деяких радіоактивних елементів випромінюються α – частинки ядра атомів гелію. Кількість гелію, який виділяється при випромінюванні, невелика, але її можна визначити за допомогою мікрометодів.

α – частинка, з якої утворюється атом гелію, володіє енергією, достатньою для того, щоб викликати ефект, який спостерігається наочно. Оскільки кожна α – частинка перетворюється в атом гелію, то можна розрахувати скільки атомів гелію одержується із 1 г радіоактивного елемента, а знаючи об'єм утвореного гелію, легко знайти число атомів, які містяться в 22,4 л гелію. Молекула гелію одноатомна, і кількість атомів в грам – молекулярному об'ємі цього газу дорівнює числу молекул – числу Авогадро.

2. Число Авогадро може бути знайдене за допомогою величини заряду електрона – фундаментальної константи, знання якої необхідне для теорії будови речовини. Точне визначення заряду електрона було вперше здійснено в 1909 – 1914 р. Міллікеном.

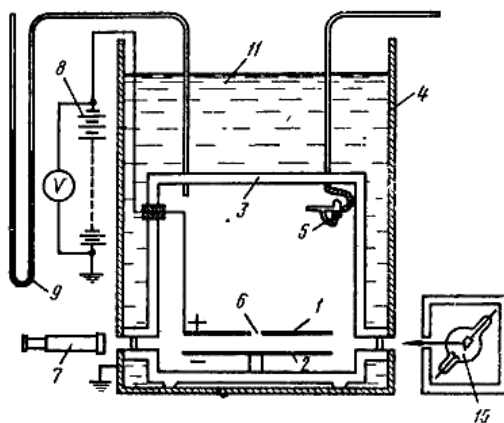


Рис. 1. Схематичне зображення установки Міллікена для вимірювання заряду електрона.

- 1,2 – пластини конденсатора;
- 3 – металева камера;
- 4 – термостат;
- 5 – розпилювач масла;
- 6 – отвір в пластині;
- 7 – оглядова трубка;
- 8 – батарея акумуляторів;
- 9 – манометр;
- 10 – рентгенівська трубка;
- 11 – термостатуюча рідина.

Схема установки Міллікена зображена на рис. 1. Основною її частиною є електричний конденсатор, який складається з латунних пластин 1 і 2 і

розміщений в металічній камері 3, що знаходиться в термостаті 4. При допомозі розпилювача 5 в камері утворюється туман із малих крапель масла. Через отвір 6 у верхній частині краплі можуть попадати в конденсатор. За рухом крапель між пластинами конденсатора можна спостерігати в оглядову трубку 7. Освітлення рентгенівськими променями викликає іонізацію. Вільні електрони, які утворюються, попадають на краплі масла, і ті одержують електричний заряд e_k . Змінюючи напругу на пластинках конденсатора, можна підібрати таке її значення, при якому сила електричного поля зрівноважує силу тяжіння зарядженої краплі, і вона залишиться нерухомою. Тоді:

$$mg = e_k E, \quad (1.1)$$

де m – маса краплі;

g – прискорення сили тяжіння;

E – напруженість електричного поля.

Для плоского конденсатора:

$$E = V/d, \quad (1.2)$$

де V – прикладена до пластин напруга;

d – відстань між пластинами.

З формул (1.1) і (1.2) випливає, що:

$$e_k = mgd/V, \quad (1.3)$$

звідси, знаючи масу краплі, можна знайти величину e_k .

Міллікен довів, що заряд краплі завжди буде кратним деякій величині e , а заряд менший e не спостерігається. Це можна пояснити тим, що крапля може захоплювати 1, 2 і т.д. електрони (або іони), але ніколи не приєднує частинку електрона, бо електрон неподільний. Звідси, найменший заряд краплі – це заряд електрона.

Згідно закону Фарадея, для виділення одного грам-еквівалента речовини при електролізі необхідно пропустити через розчин один фарадей електрики, рівний 96485 Кл. Частково така кількість електрики необхідна для того, щоб із соляної кислоти виділити 1,008 г водню і 35,453 г хлору. Оскільки при електролізі розчину HCl виникає ряд іонів H^+ і Cl^- , кожний з яких має заряд, рівний за величиною заряду електрона. Отже, відношення фарадея електрики до величини заряду електрона показує, скільки атомів міститься в 35,453 г хлору або в 1,008 г водню. Тобто, є число Авогадро, відповідно

$$N = F/e \quad (1.4)$$

Звідси:

$$N_0 = 96485 / (1,602 \cdot 10^{-19}) = 6,023 \cdot 10^{23} \text{ г} - \text{атом}^{-1} \quad (1.5)$$

Оскільки число Авогадро дуже велике, тому можна стверджувати:

1. Навіть дуже малі кількості речовин, які ледь розрізняються у оптичному мікроскопі, містять величезне число атомів. Тому речовина під мікроскопом здається суцільною.

2. Будь-яка, навіть найчистіша проста речовина з одного з елементів, завжди містить домішки (деяку кількість атомів інших елементів) [1].

Знаючи число Авогадро, можна знайти масу будь-якого атома в грамах і оцінити розміри атомів. Маса атома m визначається діленням грам-атомної ваги (A) елемента на число Авогадро:

$$m = A / N_0 \quad (1.6)$$

Тому для атома гідрогену, вага дорівнює наприклад:

$$m_H = 1,008 / 6,023 \cdot 10^{23} = 1,674 \cdot 10^{-24} \text{ г} \quad (1.7)$$

Якщо ми розділимо об'єм, який займає грам-атом простої речовини в твердому стані, на число Авогадро, то знайдемо об'єм, який припадає на 1 атом. При цьому можна розглядати атом як кулю. Оскільки в твердих тілах атоми знаходяться досить близько один від одного, то таке наближення не дає дуже великої похибки. Діаметр атома можна знайти, якщо добути кубічний корінь із об'єму, що припадає на 1 атом.

Для точного розрахунку розмірів атомів необхідно знати їх розміщення в кристалах твердих речовин. Ці дані дає метод рентгеноструктурного аналізу. Проведені цим методом дослідження показали, що у більшості металів розміщення атомів таке ж, як при найгустішому упакуванні куль. При найгустішому упакуванні об'єм куль складає 74% від об'єму всього займаного простору. За цими даними можна легко знайти точне значення радіуса атома міді (R_{Cu}) в кристалі.

3. Складові частини атома – електрони і ядро. [1]. Відомо, що атоми хімічних елементів складаються з ядра і електронів, що рухаються навколо нього. Властивості електронів були вивчені після того, як у другій половині минулого століття вдалось одержати потік цих частин. Спочатку було розраховано відношення заряду електрона до його маси e/m_e . Якщо атом має розмір порядку 10^{-8} см., то ядро дуже мале, і радіус атомних ядер знаходиться в межах 10^{-13} - 10^{-12} см. Вперше такі вимірювання були проведені у 1897 р. Дж. Томсоном (Англія). За допомогою цих експериментів було знайдено $e/m_e = 5,273 \cdot 10^{17}$ ел.ст.од /г.

Знаючи величину e/m_e і e , можна знайти масу електрона. Виявилось, що $m_e = 0,91095 \cdot 10^{-27}$ г.

Для прикладу порівняємо цю величину з масою атома гідрогену.

$$m_e/m_H = (0,9108 \cdot 10^{-27}) / (1,674 \cdot 10^{-24}) = 1/1837 \quad (1.9)$$

Звідси випливає, що маса електрона дуже мала у порівнянні з масою найлегшого атома. Отже, майже вся маса атома зосереджена в ядрі. Ядро і електрони – це заряджені частинки. Вони створюють навколо себе електричне поле, яке заповнює простір всередині атома і за його межами. Поле – це матеріальне утворення (як електрони і ядро).

Історія розвитку уявлень про будову атома. Резерфорд, дослідивши наявність ядра у атомі, запропонував планетарну модель атома. За цією моделлю електрони рухаються навколо ядра так само, як планети рухаються навколо Сонця. Проте закони електродинаміки свідчать що, рухаючись навколо центра, заряджена частинка (електрон) стає джерелом електромагнітних коливань. Тому електрон мав би безперервно втрачати енергію і в кінцевому результаті впасти на ядро. В 1913 р. Бор запропонував теорію, згідно якої у атомі існують стаціонарні орбіти, по яких електрон

може рухатись без випромінювання енергії. Для цих орбіт, за Бором, повинно виконуватися співвідношення:

$$m_e V r = n (h/2\pi), \quad (1.14)$$

де: $m_e V r$ – момент імпульсу електрона;

m_e і V – маса і швидкість електрона;

r – радіус орбіти;

$n = 1, 2, 3 \dots$,

h – стала Планка;

Величину $h/2\pi$ прийнято позначати \hbar , тоді:

$$m_e V r = n \hbar \quad (1.15)$$

Виходячи з цього рівняння, Бору вдалося розробити теорію будови атома водню. Прирівнюючи відцентрову силу до сили притягання електрона до ядра, можна записати:

$$m_e V^2/r = e^2/r^2 \quad (1.16)$$

Розв'язуючи систему рівнянь (1.15) і (1.16), можна знайти рівняння для швидкості електрона на стаціонарній орбіті:

$$V = e^2/n \hbar \quad (1.17)$$

та її радіуса:

$$r = n^2 \hbar^2/m_e e^2 \quad (1.18)$$

Енергія електрона E складається з кінетичної (T) і потенціальної (U):

$$E = T + U \quad (1.19)$$

Потенціальна енергія двох різнозаряджених тіл з зарядами q_1 і q_2 , що знаходяться на відстані r один відносно другого, визначається роботою, яку необхідно здійснити для переміщення цих тіл у положення з нульовою потенціальною енергією на задану відстань r . Ця робота (у відповідності з законом Кулона) виражається інтегралом:

$$\int_{\infty}^r (q_1 q_2 / r^2) dr = - (q_1 q_2 / r) \quad (1.14)$$

Для однойменно заряджених тіл виходить аналогічна формула із знаком “+”. В атомі гідрогену заряди ядра і електрона рівні e . Тому треба записати:

$$E = m_e V^2/2 + [- (e^2/r)] \quad (1.20)$$

Підставивши в це рівняння значення V (1.11) і r (1.12) одержимо:

$$E = - (1/2) (m_e e^4 / n^2 \hbar^2) = - (const/n^2) \quad (1.21)$$

Для атома гідрогену:

$$E = - hcR/n^2 \quad (1.22)$$

Прирівнявши два останні рівняння, можна знайти теоретичне співвідношення для сталої Рідберга:

$$R = 2 \pi^2 m_e e^4 / ch^3 \quad (1.23)$$

Вирахуване за цим рівнянням значення R співпадає з експериментальним. Бор теоретично розрахував спектр гідрогену.

Пізніше Зоммерфельд та інші вчені розробили теорію будови багатоелектронних атомів. Вважалося, що стаціонарні орбіти в атомах можуть бути не тільки круговими, але й еліптичними, і можуть по-різному розміщуватися

в просторі. При цьому розміри орбіт і їх розміщення в просторі визначались правилами квантування. За допомогою цієї теорії вдалося пояснити багато закономірностей, які характерні для спектрів. Проте ця теорія не задовільняє сучасний етап науки. Основні її недоліки :

1. Основою теорії є правила квантування, які не витікають із законів механіки і електродинаміки.

2. Ця теорія при розрахунку деяких спектральних характеристик дає результати, які не співпадають з дослідом.

3. При розрахунку енергії електронів в багатоелектронних атомах теорія також дає результати, які не співпадають з дослідом.

4. Дану теорію неможливо використати для кількісного пояснення хімічного зв'язку.

4. Елементарні частинки.

Першою відкритою елементарною частинкою був електрон (e) - носій елементарного електричного заряду.

$$m_e = 9.11 \times 10^{-28} \text{ г}$$

$$r \leq 10^{-16} \text{ см.}$$

$$e = 4.8 \times 10^{-10} \text{ СГСЕ (} 1.6 \times 10^{-19} \text{ Кл)}$$

Елементарна частинка протон (p) - ядро атома Н.

- позитивний заряд e,
- $m_p = 1.67 \times 10^{-24} \text{ г}$ (~ 1840 мас електрона).

Частка такої ж маси, але з нульовим зарядом - нейтрон (n).

Мюони (μ^+ , μ^-), піони (π^+ , π^-), нейтрино (ν), резонанси, античастинки: позитрон (e^+), антипротон і ін.

Античастинки існують для всіх частинок крім фотона

$$p \rightarrow p^+ e^- + \nu_e$$

Чотири види взаємодій елементарних частинок:

сильна, електромагнітна, слабка, гравітаційна.

Сильні взаємодії здійснюються між частинками, які називаються адронів.

Переносники взаємодії - глюони.

Адрони *баріони* *мезони*

Баріони: протони, нейтрони і група частинок, званих гіперонами. Вони мають напівцілий спіні. На відміну від баріонів, мезони мають нульовий спіні. Всі мезони нестабільні.

Частинки які не вступають в сильні взаємодії називаються *лептонами*. Кожному зарядженому лептону (електрон, мюон і тау частка) відповідає нейтральна частинка нейтрино- електронне, мюонне або тау-нейтрино. Загальна кількість лептонів -12.

Адрони складаються з більш фундаментальних частинок - *кварків*, що мають дробовий електричний заряд, кратний $e/3$, і розміри менше $0,5 \times 10^{-19}$ м. Кварки існують тільки всередині адронів і не спостерігаються як ізольовані частки. Розрізняють 6 типів кварків.

Стандартна модель

Вся речовина складається з 12 фундаментальних частинок – 6 лептонів і 6 кварків. Кварки беруть участь в сильних, слабких і електромагнітних взаємодіях; заряджені лептони – в слабких і електромагнітних; нейтрино – тільки в слабких взаємодіях.

5. Парадокси квантової механіки

Велику роль у пізнанні мікросвіту мали дискусії між ученими, які створили квантову теорію або відіграли важливу роль у її розвитку. Кожен із цих великих людей так і не досягнув того “доброго” розуміння квантової механіки, на яке нас штовхає повсякденний досвід. Вони по-різному висловлювали своє незадоволення та здивування з приводу того, якої форми врешті-решт набула квантова механіка. Ці дискусії породжували різні парадокси. Для ілюстрації атмосфери, у якій велись дискусії, наведемо тут лише три з багатьох парадоксів.

Парадокс із котом Шредингера. Парадокс, який запропонував Е. Шредингер, полягає ось у чому. Всередині скриньки, стінки якої не пропускають ні світла, ні звуку, знаходиться кіт. У скриньці є отвір, що може бути відкритий на час, необхідний для пропускання одного фотона. На шляху фотона в скриньці є напівпосріблене дзеркало, що з імовірністю 1/2 відбиває фотон і з імовірністю 1/2 пропускає його. Якщо фотон проходить крізь дзеркало, то він приводить у дію пристрій (рушниця, ампула з синильною кислотою), який позбавляє бідлашного кота життя. Якщо фотон відбивається від дзеркала, то нічого не відбувається. Вважається, що фотон перебуває в суперпозиційному стані: “пройшов крізь дзеркало” та “відбився від дзеркала”. Відповідно до цього кіт перебуває в суперпозиційному стані – між живим та мертвим, тобто маємо живомертвого кота:

$$|\text{стан кота}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ |\text{живий кіт}\rangle + |\text{мертвий кіт}\rangle \},$$

де замість ψ миввелидужки $|\rangle$ і, що позначають амплітуду стану. Суть парадокса полягає в тому, що після потрапляння фотона в скриньку стан кота є недетермінованим, тобто таким, що принципово не має певного значення (живомертвий кіт). Виходить, що опис ситуації залежить від того, відкрили ми скриньку, щоб побачити стан кота, чи не відкривали її. Насправді, недетермінованість і зникає саме в момент взаємодії фотона з пристроєм.

Парадокс де Бройля. У Парижі знаходиться закрита скринька. У ній є одна частинка, яка дзеркально відбивається від стінок. У скриньку вставляється перегородка також із дзеркально відбиваючими стінками, яка ділить її на дві рівні скриньки, що відокремлюються. Одну з них відправляють до Львова, а другу залишають у Парижі. У якій зі скриньок знаходиться частинка, повністю не детерміновано: це не означає, що частинка десь є, а нам просто невідомо де. Це означає, що не існує певного місця перебування частинки, тобто немає сенсу запитувати, де ж все-таки вона є. У Львові ставиться експеримент з виявлення частинки. Парадокс полягає в тому, що результат експерименту у Львові миттєво впливає на ситуацію в Парижі, тобто детермінованість миттєво поширюється до Парижа (безвідносно до того, чи є процес інформація в Парижі, чи її там немає).

Якщо аналізувати цю ситуацію з позиції класичної фізики, то частинка десь знаходиться, але нам невідомо де саме. Тобто стан частинки є детермінований і відкривання скриньки лише інформує нас про те, чи є вона у Львові, чи немає. Квантова механіка стверджує повну недетермінованість стану частинки.

Парадокс Айнштейна–Подольського–Розена. З метою довести, що квантова механіка дає неповний опис фізичних систем, А. Айнштейн, Б. Подольський і Н. Розен 1935 року опублікували статтю, в якій запропонували ситуацію, подібну до парадокса де Бройля. Зауважимо, що парадокс Шредингера з його живомертвим котом був реакцією на цю статтю. Отже, нехай маємо дві частинки, відстань між якими дорівнює сталій величині x_0 , а їхній повний імпульс дорівнює p . Величина x_0 може мати будь-яке значення.

Таку систему частинок тепер називають EPR-парою (аббревіатура походить від перших літер прізвищ в англійській мові авторів парадокса). Суть парадокса полягає в тому, що, вимірюючи імпульс однієї з частинок, ми ментально знаємо в той самий момент значення імпульсу другої частинки, “не торкаючись її”, якою великою не була б відстань між ними x_0 . Таким чином, інформація поширюється зі швидкістю більшою, ніж швидкість світла (маємо суттєву нелокальність квантової теорії), і вимір величини для однієї з частинок впливає на детермінованість відповідних величин інших частинок. Крім того, стверджують, що вимірювання координати та імпульсу, наприклад першої частинки, дає змогу отримати певні значення координати та імпульсу другої частинки, не вимірюючи їх безпосередньо. Тобто ці величини існують одночасно, а це заборонено принципом невизначеностей Гайзенберга.

Ми ще раз будемо повертатись до цього EPR-парадокса, де-тальне вивчення якого врешті-решт привело до експериментальної реалізації так званої квантової телепортації.