

УДК 530.145(075)
ББК 22.314я7

Основы квантовой механики и ЯМР-спектроскопии : учебное пособие / А.Ш. Агишев, И.П. Шишкина, М.А. Агишева; М-во образ. и науки России, Казан. нац. исслед. технол. ун-т. – Казань : Изд-во КНИТУ, 2013. – 108 с.

ISBN 978-5-7882-1336-1

Рассмотрены основы квантовой механики и ЯМР-спектроскопии, приведены частные решения классических уравнений квантовой механики, показаны классические конфигурации электронных оболочек; раскрыты основные понятия ЯМР (ядерный магнитный резонанс), приведены методы разложения фурье-спектроскопии, а также даны рекомендации к прикладным аспектам.

Предназначено для студентов магистерской подготовки института нефти, химии и нанотехнологий, изучающих дисциплину «Физика».

Подготовлено на кафедре физики.

Печатается по разрешению редакционно-издательского совета Казанского национального исследовательского технологического университета

Рецензенты: д-р хим. наук, проф. *В.В. Клочков*
д-р техн. наук, проф. *А.Ф. Кемалов*

ISBN 978-5-7882-1336-1

© Агишев А.Ш., Шишкина И.П.,
Агишева М.А., 2013

© Казанский национальный исследовательский
технологический университет, 2013

Содержание

Предисловие	3
1. Элементы квантовой механики	4
1.1. Корпускулярно-волновые свойства электромагнитного излучения	4
1.2. Взаимосвязь между волновыми и корпускулярными свойствами электромагнитного излучения.....	5
1.3. Волновые свойства частиц вещества	9
1.4. Статистический смысл волн де Бройля.....	11
1.5. Соотношения неопределенностей Гейзенберга.....	12
1.6. Примеры, иллюстрирующие соотношения неопределенностей Гейзенберга	16
1.7. Уравнение Шредингера. Волновая функция микрочастицы.....	19
1.8. Движение микрочастицы в потенциальной «яме»	26
2. Квантовомеханические представления об атоме	34
2.1. Уравнение Шредингера для электрона в атоме водорода.....	34
2.2. Энергия электрона в атоме. Главное квантовое число n	46
2.3. Орбитальный момент импульса электрона в атоме. Квантовые числа l и m_l	53
2.4. Спин электрона. Спиновое квантовое число m_s	57
2.5. Квантовомеханическая модель электрона в атоме.....	59

2.6. Многоэлектронный атом. Принцип Паули. Правило Гунда.....	69
2.7. Периодическая система элементов Д.И. Менделеева.....	76
3. Основные понятия ЯМР	80
3.1. Релаксация и энергетические уровни ядер в магнитном поле	82
3.2. Некоторые свойства векторов	84
3.3. Прецессия ядер	86
3.4. Уравнения Блоха	88
3.5. Вращающаяся система координат	91
3.6. Намагниченность во вращающейся системе отсчета	93
3.7. Спектральный анализ и преобразование Фурье.....	100
Список литературы	103