

АТОМ ВОДОРОДА В КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ

Лекция 5.3

1. Уравнение Шредингера для водородоподобного атома

Рассмотрим систему, состоящую из электрона, который движется в кулоновском поле ядра с зарядом Ze .

Такая система называется водородоподобной .

Потенциальная энергия электрона

$$U = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

Уравнение Шредингера в этом случае имеет вид:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi + (U - E)\psi = 0$$

Т.к. поле является сферически симметричным решение этого уравнения целесообразно проводить в сферической системе координат r, θ, φ :

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \left[\frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial \psi}{\partial \vartheta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} \right] + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U)\psi = 0$$

Решение уравнения Шредингера в частных случаях: удовлетворяющих требованиям однозначности, конечности, и непрерывности волновой функции

- 1) Энергия - при любых положительных энергиях E
- 2) При дискретных отрицательных значениях энергии, равных

$$E_n = - \frac{Z^2 e^4 m}{32 \pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2 n^2}$$

Случай E<0 соответствует электрону, связанному с ядром. n=1, 2, 3

Квантовая механика приводит к формуле для энергетических уровней без использования каких-либо дополнительных постулатов (в отличие от теории Бора).

Таким образом, мы пришли к той же системе энергетических уровней, что и у Бора, различие лишь в том, что в теории Бора – это движение по орбитам, здесь же орбиты теряют смысл, их место занимают ψ - функции

Собственные функции, т.е. ψ – функции, содержат три целочисленных параметра n, l, m :

$$\psi = \psi_{n,l,m}(r, \theta, \varphi)$$

n - главное квантовое число

l - орбитальное квантовое число

m - магнитное квантовое число



Согласно квантово-механическим представлениям состояние электрона в атоме полностью определяется значениями четырех физических величин:



E

- **ЭНЕРГИЯ**

L

- **ОРБИТАЛЬНЫЙ МОМЕНТ
ИМПУЛЬСА**

L_z

- **ПРОЕКЦИЯ ОРБИТАЛЬНОГО
МОМЕНТА НА НАПРАВЛЕНИЕ Z**

L_s


- **ПРОЕКЦИЯ СПИНОВОГО
МОМЕНТА НА НАПРАВЛЕНИЕ Z**

**СОГЛАСНО КВАНТОВО-МЕХАНИЧЕСКИМ
ПРЕДСТАВЛЕНИЯМ СОСТОЯНИЕ ЭЛЕКТРОНА В
АТОМЕ ВОДОРОДА ПОЛНОСТЬЮ
ОПРЕДЕЛЯЕТСЯ ЗНАЧЕНИЯМИ 4-Х
ФИЗИЧЕСКИХ ВЕЛИЧИН: КВАНТОВЫХ ЧИСЕЛ**

КВАНТОВЫЕ ЧИСЛА

Квантовое число		Определяет	Формула	Принимает значения
Главное	n	Энергию электрона	$E_n = -\frac{Z^2 e^4 m}{32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2 n^2}$	$n = 1, 2, 3, \dots$
Орбитальное	l	Орбитальный момент импульса	$L = \hbar \sqrt{l(l+1)}$	$l = 0, 1, 2, 3, \dots, (n-1)$
Магнитное орбитальное	m	Проекцию орбитального момента импульса	$L_z = \hbar m$	$2l+1$ Ориентаций $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$
Магнитное спиновое	m_s	Проекцию спинового момента	$L_{s.z} = \hbar m_s$	$m_s = \pm \frac{1}{2}$





**Значения четырех квантовых
чисел полностью определяют
квантово-механическое
состояние связанного электрона
в атоме**

Спиновой момент



собственный механический
момент импульса электрона, не
связанный с его орбитальным
движением вокруг ядра

Энергия электрона зависит только от главного квантового числа, следовательно каждому собственному значению энергии, кроме $n=1$ соответствует несколько собственных функций $\psi = \psi_{n,l,m}(r, \theta, \varphi)$ отличающихся значениями l и m . Значит электрон может иметь одно и то же значение энергии, находясь в нескольких различных состояниях

Пример:

Энергией с $n=2$ обладают 4 состояния:

$$\psi_{2,0,0} \quad \psi_{2,1,-1} \quad \psi_{2,1,0} \quad \psi_{2,1,+1}$$

Вырожденные состояния -
состояния с одинаковой энергией

Кратность вырождения N – число
различных состояний с
определенным значением энергии

$$N = 2n^2$$

Различные состояния электрона в атоме принято обозначать малыми буквами латинского алфавита в зависимости от значения орбитального квантового числа l



Квантовое число	0	1	2	3	4	5
Символ состояния	s	p	d	f	g	h

Вероятность

- Каждому энергетическому состоянию соответствует волновая функция, квадрат модуля которой определяет вероятность обнаружения электрона в единице объема

Электронное облако

- Электрон в своем движении как бы «размазан» по всему объему, образуя электронное облако

Квантовые числа n и l характеризуют размер и форму электронного облака, а квантовое число m характеризует ориентацию электронного облака в пространстве

1S-состояние

- Состояние электрона, характеризующееся квантовыми числами
 - $l=0$ называют S-состоянием (а электрон S – электрон)
 - $l=1$ – p-состояние
 - $l=2$ - d-состояние
 - $l=3$ = f- состояние
- Значение главного квантового числа указывается перед условным обозначением орбитального квантового числа. Например, $n=2, l=0$
 - , $l=1$ обозначаются: символами: 2S и 2 p
-

Сферически симметричные решения уравнения Шредингера имеют вид:

$$\psi_n(\rho) = \frac{e^{\frac{\rho}{a}}}{\rho} q_n(\rho)$$

$\rho = \frac{r}{a}$, a – боровский радиус

$q_n(\rho) = \sum \alpha \rho^k$, α – константа

В s -состоянии ($l=0, m=0$) волновая функция сферически симметрична (не зависит от θ и φ)

Нормированные волновые функции в атоме водорода имеют вид:



1s- состояние

$$\psi_{100}(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-\frac{r}{a}}$$

2s- состояние

$$\psi_{200}(r) = \frac{1}{\left(4\sqrt{\pi a^3}\right) \left(2 - \frac{r}{a}\right)} e^{-\frac{r}{2a}}$$

$$\psi_{100}(\rho) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-\rho}$$

$$\psi_{200}(\rho) = \frac{1}{\left(4\sqrt{2\pi}\right) (2 - \rho)} e^{-\frac{\rho}{2}}$$

Вероятность обнаружить электрон в окрестности точки с координатами r, θ, φ в объеме dV

$$d\omega = |\psi_{n,l,m}(r, \theta, \varphi)|^2 dV$$



$$d\omega = |\psi_{1,0,0}(r)|^2 4\pi R^2$$

Многоэлектронные атомы и молекулы

Точное решение уравнения Шредингера для многоэлектронного атома – чрезвычайно сложная задача, поэтому допускаем упрощения:


Одноэлектронное приближение

1. Электроны движутся вокруг неподвижного ядра, т.к. его масса много больше массы электрона

2. Каждый электрон движется в некотором усредненном стационарном центральном поле, которое создано зарядом ядра и зарядом всех электронов

Такой подход к задаче о многоэлектронном атоме позволит сохранить описание свойств электрона в водородоподобном атоме для описания свойств электронов сложного атома

Уравнение Шредингера позволяет найти разрешенные уровни энергии, но ничего не говорит о том как электроны будут распределены по этим уровням. Этим распределением управляет **принцип Паули.**



**Принцип тождественности
(неразличимости) частиц:
перестановка любых
одинаковых частиц не дает
НОВОГО СОСТОЯНИЯ**

Принцип Паули



В любом квантовом состоянии может находиться не более одного электрона

или


В атоме (и в любой квантовой системе) не может быть электронов с одинаковыми значениями всех четырех квантовых чисел

Т.е. каждый следующий электрон невозбужденного атома должен занимать самый глубокий из еще незаполненных уровней

Принцип Паули объяснил, почему электроны в атомах оказываются не все на самом нижнем дозволённом энергетическом уровне

Периодическая система элементов Д.И. Менделеева

Периодическая повторяемость
свойств химических элементов
обусловлена определенной
периодичностью структуры
электронных оболочек атомов
(1869 г.)



Состояние каждого электрона в атоме задается четырьмя квантовыми числами.

Распределение электронов в атомах по энергетическим состояниям подчиняется двум принципам: минимуму энергии и принципу запрета Паули

- Максимальное число электронов в многоэлектронном атоме, имеющих одно и то же квантовое число n называют электронной оболочкой.
- В каждой из оболочек электроны распределяются по подоболочкам, соответствующих данному L



Оболочки обозначаются в порядке возрастания l строчными буквами латинского алфавита s, p, d, f, g

n	Электро нный слой	Максимальное число электронов в состояниях					Всего электронов в оболочке
		$S (l=0)$	$p (l=1)$	$d (l=2)$	$f (l=3)$	$g (l=4)$	
$n=1$	K	2					2
$n=2$	L	2	6				8
$n=3$	M	2	6	10			18
$n=4$	N	2	6	10	14		32
$n=5$	O	2	6	10	14	18	50

Электронная оболочка
— совокупность
электронов атома с
заданными значениями
квантового числа n и l

**Электронные слои -
совокупность электронов с
заданными значениями
главного квантового числа.**

K, L, M, N, O – Для $n=1,2,3,\dots$
соответственно

Каждый период (кроме первого) начинается со щелочного металла в электронной конфигурации которого только один наружный s – электрон

Каждый период заканчивается атомом благородных газов. У этих атомов (кроме гелия) наружная s-p-оболочка состоит из 8 электронов, образующих особенно компактно и прочно связанную систему

В соседней 7 группе очень активные элементы, т.к. S-p-оболочка этих атомов состоит из 7 электронов и может быть легко дополнена до замкнутой оболочки присоединением 8-го электрона. Это активные неметаллы.

Конспект 5.3.

1. Оптические квантовые генераторы (лазеры)

- устройство
 - принцип действия
 - применение
-