ЛЕКЦИЯ 7

§ 6.2. Атом водорода

Вернемся к спектру атома водорода.

Запишем основные формулы и параметры для такой системы.
Формулы перехода от прямоугольных (Декартовых) координат к сферическим:

$$x = r \sin \vartheta \cos \varphi ,$$
$$y = r \sin \vartheta \sin \varphi ,$$
$$z = r \cos \vartheta .$$

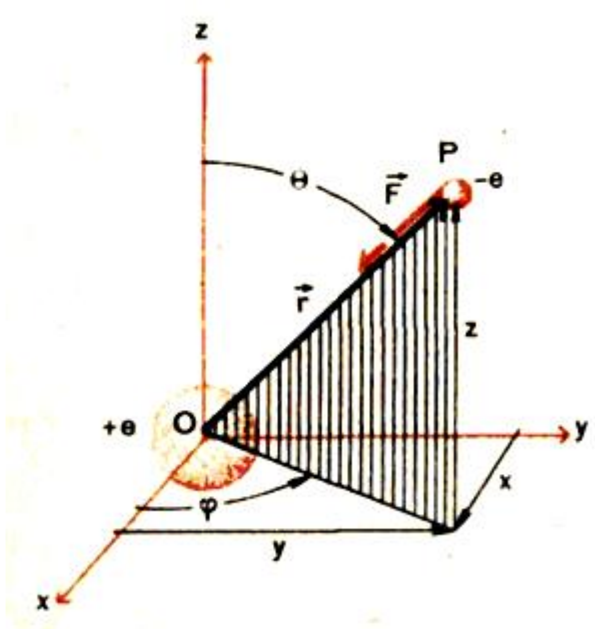

Рис. 75. Полярные координаты

Имеется система из трех квантовых чисел:

– Главное или (полное) квантовое число n = 1, 2, 3 … характеризует диаметр орбиты;
– Азимутальное или (орбитальное) квантовое число l = 0, 1, 2, … , (n – 1) – степень вытянутости орбиты;
– Магнитное квантовое число m = 0, ±1, ±2, …, ± l – ориентацию нормали к плоскости орбиты и вектора ее магнитного момента p_m в пространстве.

Квантовая механика (решение уравнения Шредингера) показывает, что в данном стационарном состоянии, кроме величины вектора L, имеет вполне определенное значение лишь проекция его на одно какое-нибудь направление в пространстве, например L_z [4]. Численное значение этой проекции совпадает со значением момента количества движения одномерного ротатора и равно:

$$L_z = m\hbar . \tag{6.28}$$

Магнитное квантовое число m может принимать любые целые значения, не превышающие по абсолютной величине l:

$$m = 0, \quad \pm 1, \pm 2, ..., \pm l, \tag{6.29}$$

т. е. данному l отвечает всего $2l + 1$ различных значений m. Физический смысл ограничения m по величине состоит в том, что проекция вектора момента не может превышать длины самого вектора.

Величина и форма электронной волны $\psi_{n,l,m}$ (в той мере, в которой эти слова имеют смысл, так как границы этой волны не очерчены резко) определяются значениями квантовых чисел n и l. Квантовое число m характеризует ориентацию орбиты в пространстве (так называемое «пространственное квантование»). При сферически симметричном электрическом поле (ядра и других электронов) энергия электрона может зависеть только от n и l, определяющих форму электронного облака, но не от m. Зависимость энергии от m возникает, если атом находится во внешнем магнитном поле или если магнитное поле порождается ядром и другими электронами атома. Различные ориентации орбиты (т. е. вектора момента импульса относительно оси z) были показаны на **рис. 73** для случая $l = 2$.

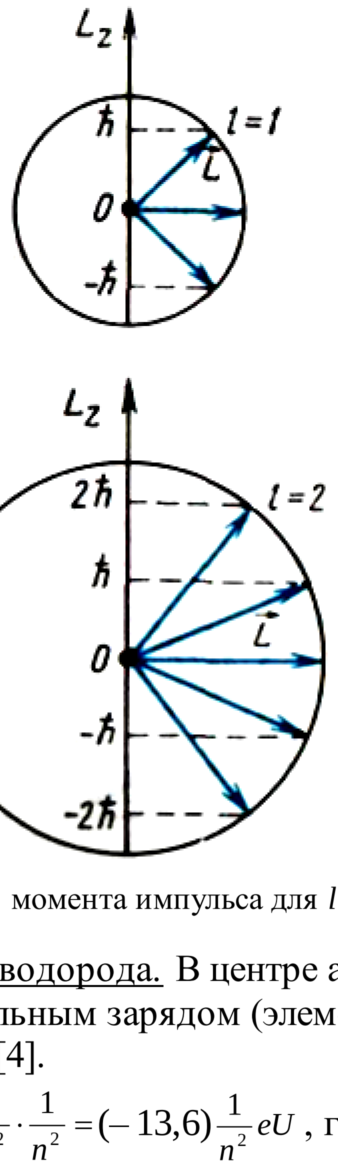

Рис. 76. Вектор момента импульса для $l = 1$ и $l = 2$

Основное состояние атома водорода. В центре атома находится ядро малых размеров – протон – с положительным зарядом (элементарным) e. Масса протона много больше массы электрона [4].

$$E_n = \frac{-me^4}{32\pi^2\varepsilon_0^2\hbar^2}\cdot\frac{1}{n^2} = (-13{,}6)\frac{1}{n^2}eU \text{, где } n = 1, 2, 3, \ldots, \qquad (6.30)$$

или в общем виде (для $z \neq 1$) $E_n = (-13{,}6)\, Z^2 \cdot \frac{1}{n^2}$ *эв.*

У свободной частицы спектр собственных значений энергии сплошной. У частицы, заключенной в результате взаимодействия с другими частицами в ограниченный объем пространства, спектр собственных значений энергии дискретный [3].

Квантовая механика разрешила два основных противоречия: падение электрона на ядро и неизлучение энергии при ускоренном движении электрона вокруг ядра.

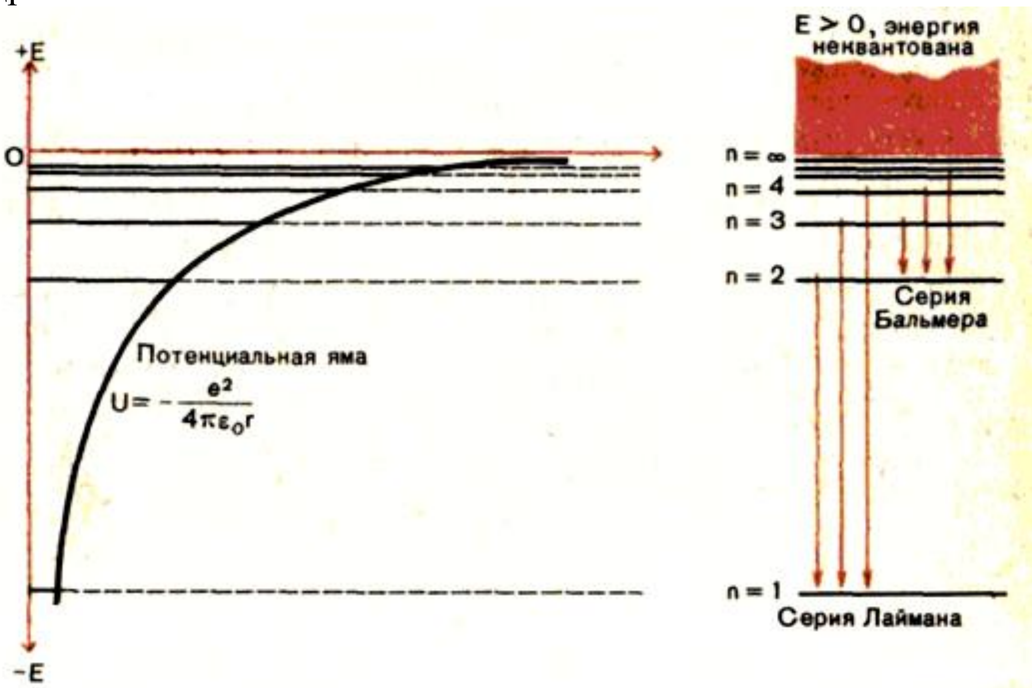

Рис. 77. Другое представление уровней энергии для атома водорода

1. Если положение электрона вблизи ядра изменяется в пределах $\Delta r \approx r$, то, согласно соотношению неопределенностей, его импульс имеет неопределенность:

$$\Delta p = \frac{\hbar}{\Delta r} \approx \frac{\hbar}{r}.$$

Пусть импульс примерно равен $p \approx \Delta p$, тогда:

$$E_k = \frac{p^2}{2m} \approx \frac{(\Delta p)^2}{2m} \approx \frac{\hbar^2}{2mr^2}. \qquad [4] \qquad (6.31)$$

Полная энергия в атоме водорода:

$$E = E_{\text{k}} + U \approx \frac{\hbar^2}{2mr^2} - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}. \qquad (6.32)$$

Видно, что с уменьшением $r \Rightarrow E_{\text{k}}$ возрастает быстрее, чем убывает U.

Начиная с некоторого расстояния, при сближении электрона с ядром увеличение его кинетической энергии превосходит убывание потенциальной энергии и полная энергия не убывает, а возрастает. Поэтому падения электрона на ядро не происходит.

2. Движению на разрешенной орбите отвечает стационарная волна, амплитуда которой остается со временем неизменной [7]. Очевидно, что неизменной волне должно отвечать неизменное распределение заряда. Таким образом, движение электрона вдоль неизменной орбиты следует уподоблять не вращению заряженной дробинки, а замкнутому постоянному электрическому току I. Такой вращающийся заряженный «обруч» (**рис. 71**) обладает механическим моментом количества движения, равным

$$L_{\text{мех}} = m\upsilon r = n\frac{h}{2\pi} = n\hbar, \qquad (6.33)$$

и направленным в противоположную сторону постоянным магнитным моментом (так как заряд электрона отрицательный):

$$p_m = \frac{e\upsilon r}{2c} = \frac{e}{2mc}L = n\hbar\frac{e}{2mc},$$

кратным элементарному магнитному моменту

$$p_{m,1} = \frac{\hbar}{2mc} = 0{,}9273 \cdot 10^{-20}\,\text{ãñ}\cdot\text{ñì}^{3}, \qquad (6.34)$$

называемому «магнетоном Бора». Такой микроскопический замкнутый ток создает вокруг себя постоянное магнитное поле. Отдельные заряженные элементы обруча de непрерывно вращаются, но распределение заряда в пространстве в целом остается неизменным, так что электрическое поле электрона также постоянно. Следовательно, электрон, находящийся на стационарной орбите, создает в пространстве постоянное, а не переменное электромагнитное поле, т. е. не излучает.

Основное состояние атома водорода – состояние с минимальной полной энергией – определяется главным квантовым числом $n = 1$. $\Rightarrow l$ – орбитальное квантовое число = 0; $m_l = 0$.

Тогда из $L = \hbar\sqrt{l(l+1)}$ следует, что в основном состоянии у атома водорода модуль момента импульса электрона равен 0.

В этом случае движение электрона можно представить как колебание относительно ядра по прямой, проходящей через ядро. Состояние с квантовым числом $l = 0$ называют s состоянием.

Таблица 3

Значение l	0	1	2	3	4	…
Состояние*	*s*	*p*	*d*	*f*	*g*	

**Обозначение состояния пришло из оптической спектроскопии.*

В s состоянии момент импульса электрона равен 0. s – оболочка сферически симметричная, т. е. электрон можно обнаружить с равной вероятностью в любой точке пространства на расстоянии r от ядра [4]. Решение уравнения Шредингера для основного $1s$ состояния дает распределение вероятности $\rho = 4\pi R^2\Psi^2$.

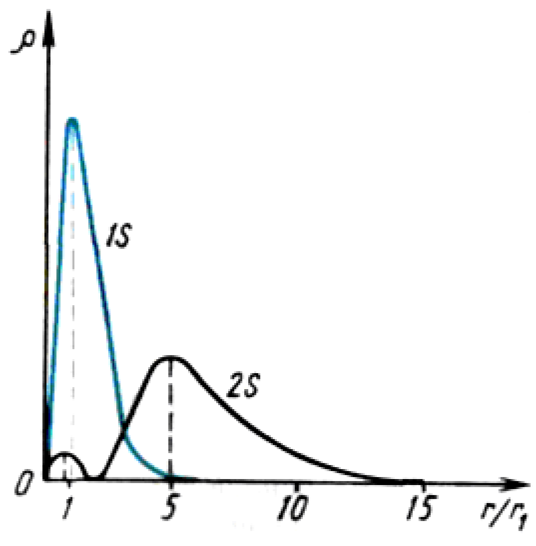

Рис. 78. Плотности вероятности нахождения электрона вблизи ядра

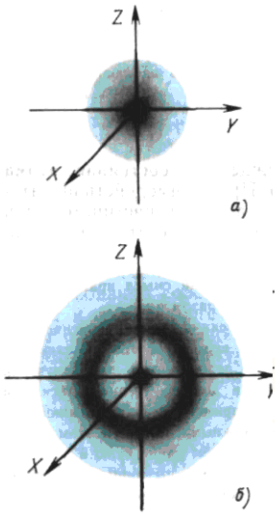

Рис. 79.

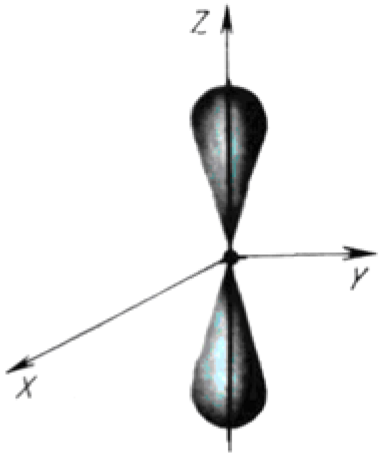

Рис. 80.

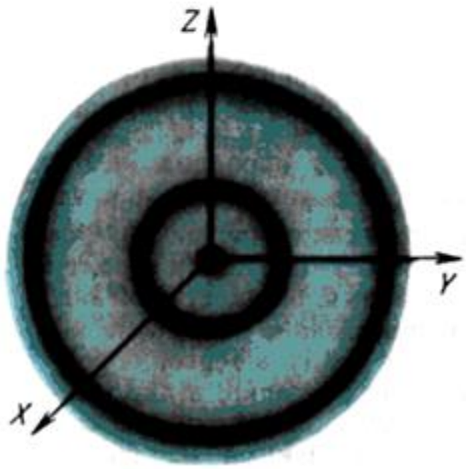

Рис. 81. Плотности вероятностей нахождения электрона для различных состояний (рис.79–81)

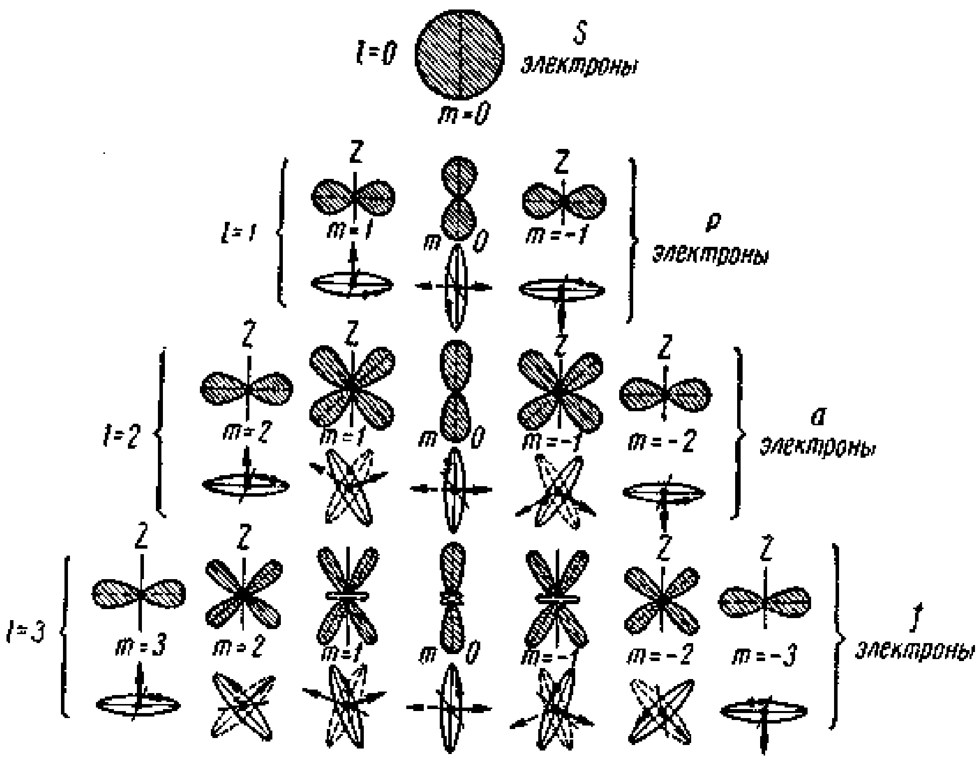

Рис. 82. Конфигурации плотностей вероятности для различных состояний

Поскольку зависимость E от l и m слабая, то можно считать, что каждый из уровней (6.14) при данном n расщепляется на ряд близких уровней. Каждому значению l соответствует $2l + 1$ уровней с различными значениями (6.26) магнитного квантового числа m [7].

При данном значении n азимутальное квантовое число l может изменяться от 0 до $n - 1$. Поэтому общее число «орбит», отличающихся значениями l или m, при данном n будет равно

$$\sum_{l=0}^{l=n-1}(2l+1)=\frac{1+[2(n-1)+1]}{2}n=n^2 \text{*}. \tag{6.35}$$

---

* Как будет показано в следующем параграфе, наличие еще одной, внутренней, степени свободы электрона, спина, приводит к тому, что числа возможных состояний будут вдвое больше, т. е. $2n^2$.