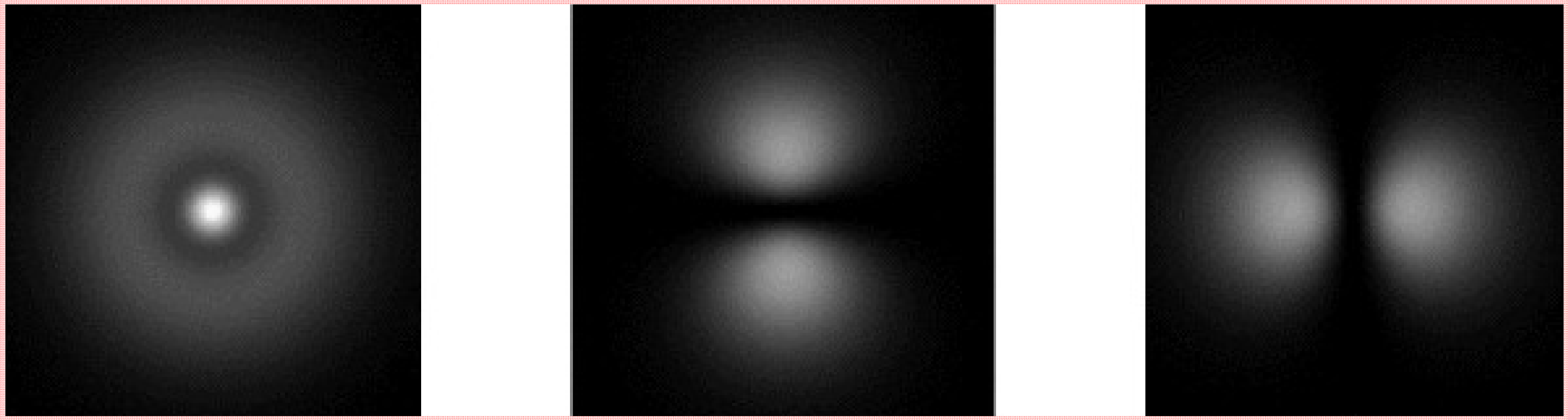
8.Квантово-механическая модель атома водорода. Квантовые числа.

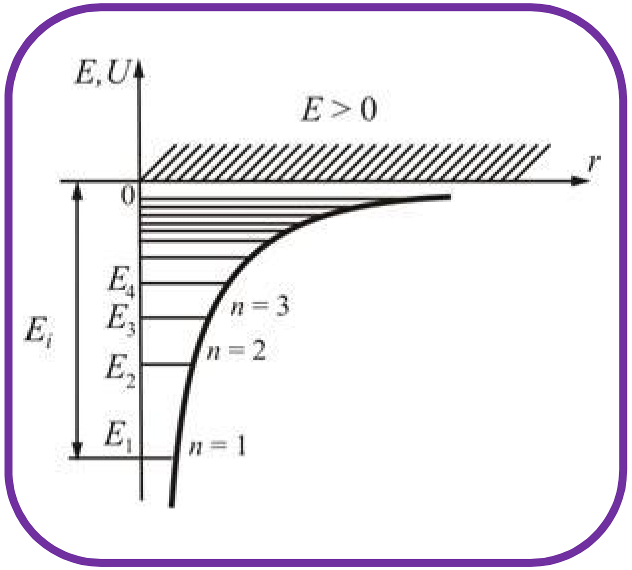


1. Решение уравнения Шредингера для электрона в центрально-симметричном поле неподвижного ядра.

*Рассмотрим систему, состоящую из ядра с зарядом +Ze и **одного электрона**.*

$$U = -\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r}$$

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



Можно показать, что уравнение Шредингера имеет однозначные, конечные и непрерывные решения

при любых положительных значениях E>0

(свободный электрон) ;

при дискретных отрицательных значениях E<0 .

(связанный электрон) :

$$E_n = -\frac{m_e Z^2 e^4}{8h^2\varepsilon_0^2}\cdot\frac{1}{n^2} \qquad n = 1,2,3,\ldots$$

(без постулатов Бора)

Собственные функции ур-ия Шредингера содержат три целочисленных параметра, которые определяют квантовое состояние электрона в атоме.

$$\psi_{nlm} \qquad n\,;\,\ell\,;\,m$$

***n* – главное квантовое число;** $\rightarrow$ $n = 1, 2, 3, \ldots$

совпадает с номером энергетического уровня;

характеризует энергетическое состояние электрона в атоме.

ℓ– азимутальное квантовое число $\rightarrow$ $\ell = 0, 1, 2, \ldots n-1$

***m*– магнитное квантовое число** $\rightarrow$ $m = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots \pm \ell$

*Одному энергетическому состоянию может соответствовать несколько квантовых состояний электрона – **выврожденные состояния**.*

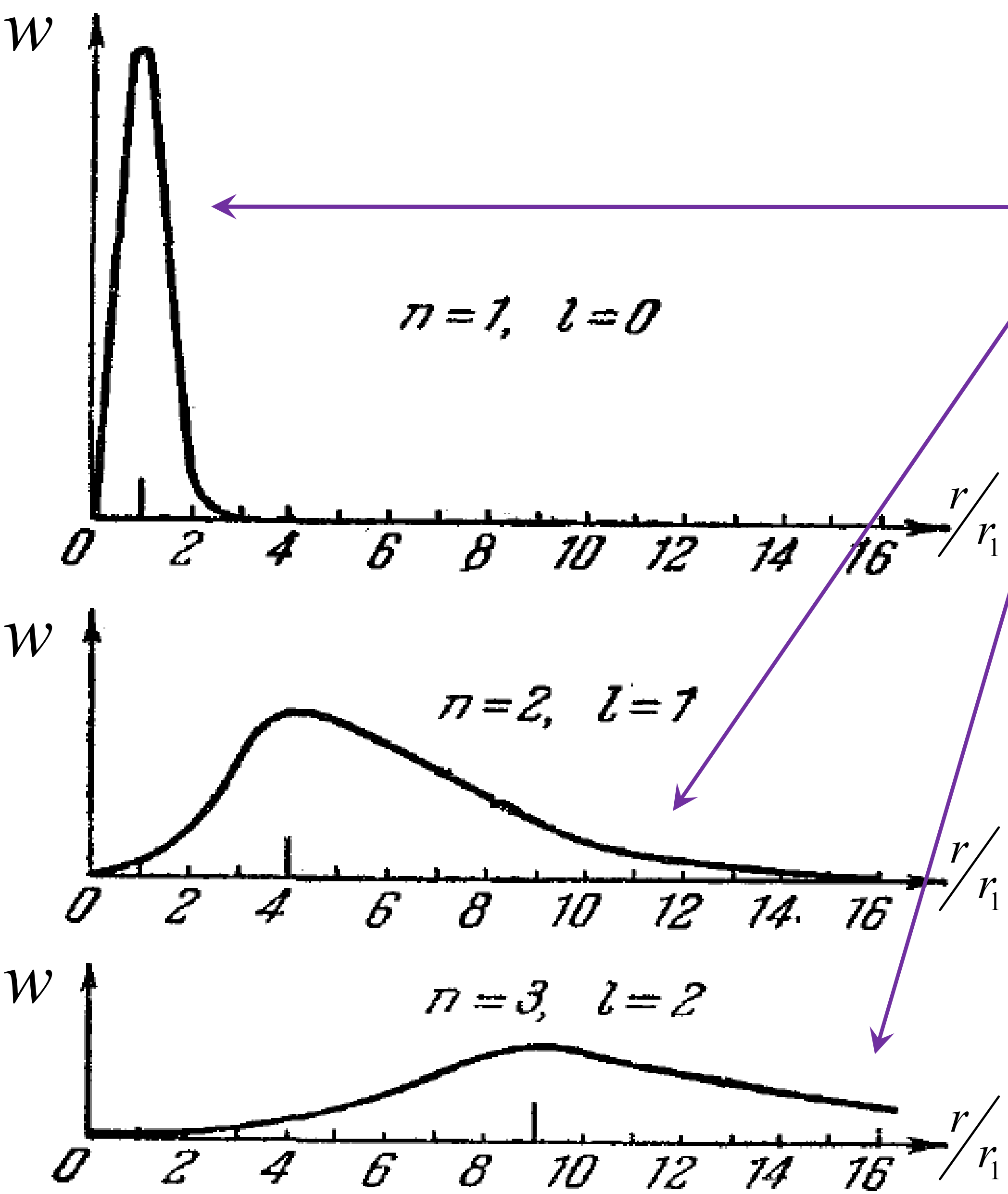
*Число вырожденных состояний – **кратность вырождения**.*

$$\sigma = \sum_{\ell=0}^{n-1}(2\ell+1) = \frac{1+[2(n-1)+1]}{2}\cdot n = n^2 \quad \Rightarrow \quad \boxed{\sigma = n^2}$$

$\ell = 0$	1	2	3...
s	p	d	f...

E_n	σ	ψ_{nlm}	n	ℓ	m	
E_1	1	$\psi_{1,0,0}$	1	0	0	$1s$
E_2	4	$\psi_{2,0,0}$	2	0	0	$2s$
		$\psi_{2,1,-1}$	2	1	-1	$2p$
		$\psi_{2,1,0}$	2	1	0	
		$\psi_{2,1,+1}$	2	1	$+1$	
E_3	9	$\psi_{3,0,0}$	3	0	0	$3s$
		$\psi_{3,1,-1}$	3	1	-1	$3p$
		$\psi_{3,1,0}$	3	1	0	
		$\psi_{3,1,+1}$	3	1	$+1$	
		$\psi_{3,2,-2}$	3	2	-2	$3d$
		$\psi_{3,2,-1}$	3	2	-1	
		$\psi_{3,2,0}$	3	2	0	
		$\psi_{3,2,+1}$	3	2	$+1$	
		$\psi_{3,2,+2}$	3	2	$+2$	

2. Физический смысл квантовых чисел



Зависимость плотности вероятности нахождения электрона от расстояния r до ядра в единицах 1-го боровского радиуса

Определяется **главным квантовым числом**

n

Т.о., радиусы боровских орбит совпадают с наиболее вероятными расстояниями электрона от ядра.

Состояния с различными значениями азимутального квантового числа $\boxed{\ell}$ *отличаются величиной* ***моментa импульса*** *и формой распределения плотности вероятности:*

$$\boxed{L = \hbar\sqrt{\ell(\ell+1)} \qquad \ell = 0,1,2\ldots n-1}$$

Т.о, модуль момента импульса принимает дискретные значения:

$$E_1 \Rightarrow L = 0$$

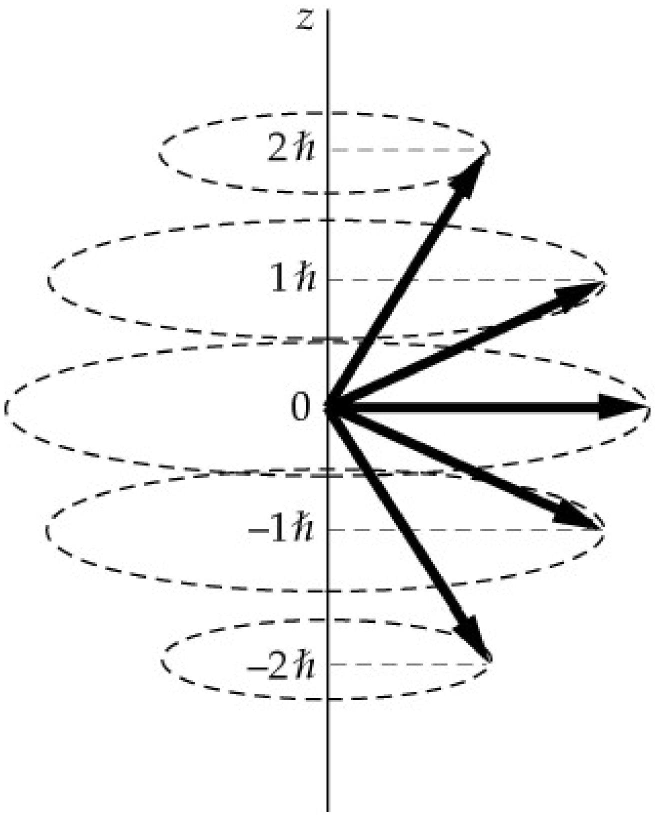
$$E_2 \Rightarrow L = 0; \sqrt{2}\hbar$$

$$E_3 \Rightarrow L = 0; \sqrt{2}\hbar; \sqrt{6}\hbar$$

Проекция момента импульса *на некоторое выделенное направление определяется магнитным квантовым числом* ***m*** *:*

$$\boxed{L_z = m\hbar}$$

$$|L_z| \le |\vec{L}| \Rightarrow |m\hbar| \le \hbar\sqrt{l(l+1)} \Rightarrow \max|m| = l \quad \Longrightarrow \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots \pm \ell$$



Т.о, проекция момента импульса на некоторое выделенное направление принимает дискретные значения.
(пространственное квантование)

Например, электрон в атоме водорода в ***этом*** *квантовом состоянии*

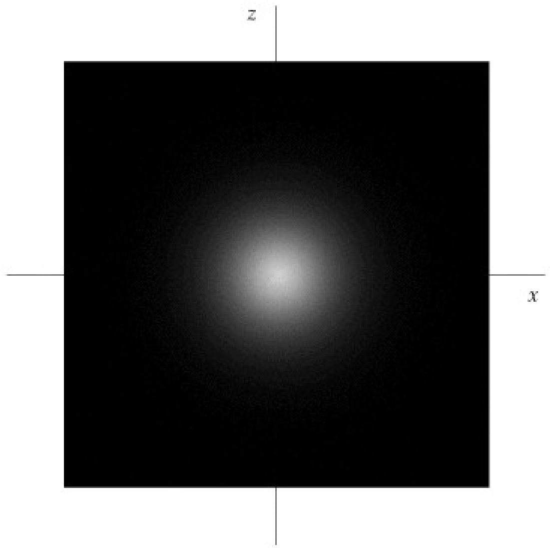
$$n = 3$$

$$\ell = 2$$

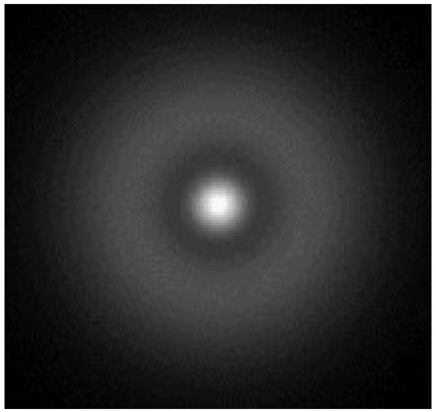
$$m = 0, \pm 1, \pm 2$$

может иметь 5 значений для проекции момента импульса на заданное направление.

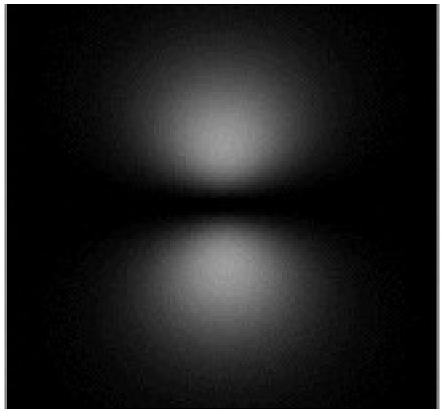
$$n = 1$$
$$\ell = 0$$
$$m = 0$$



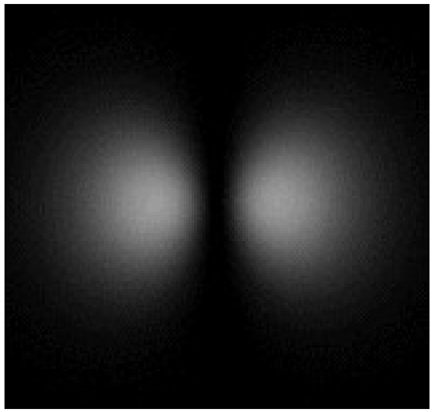
$n = 2;\ \ell = 0;\ m = 0$

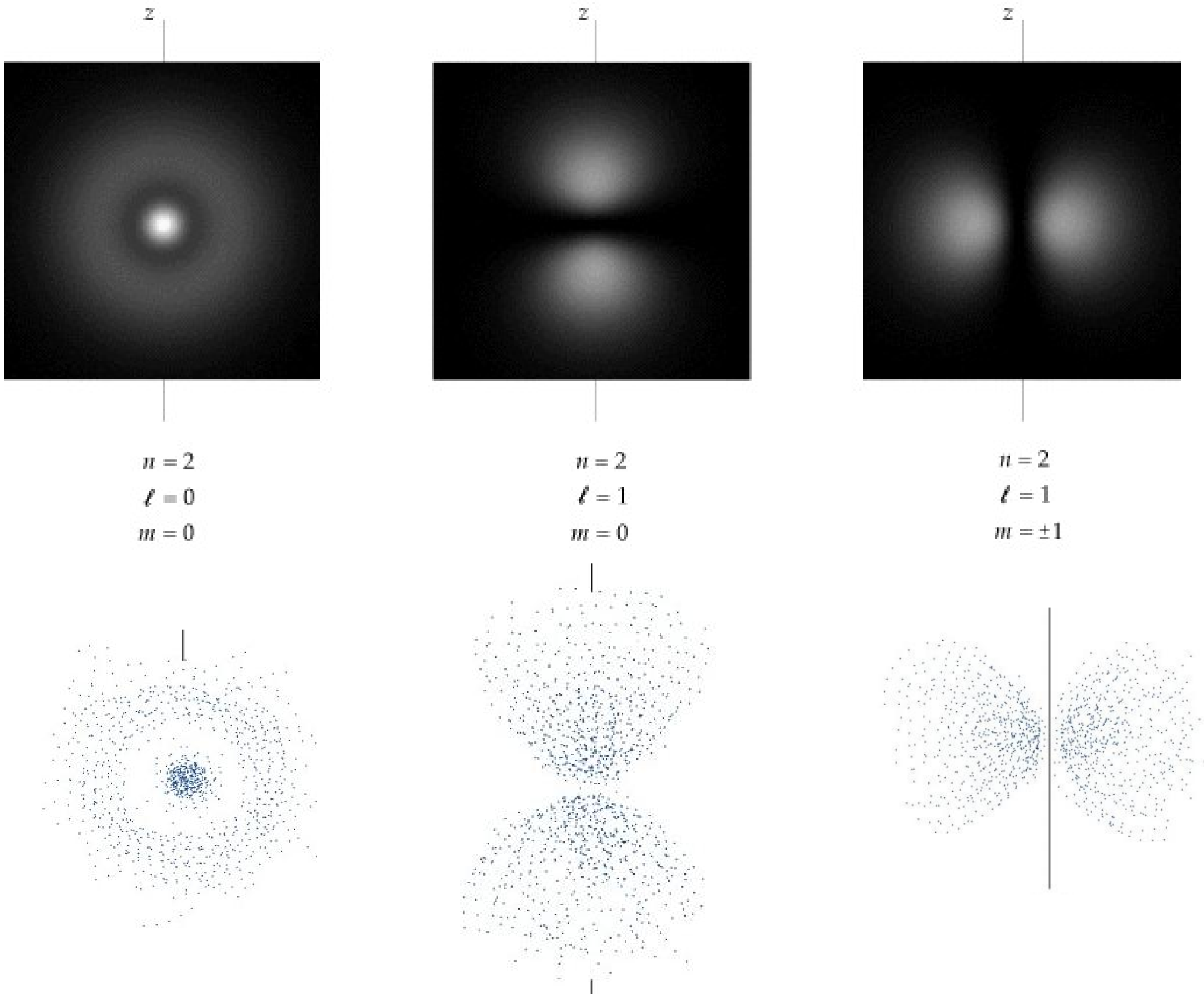


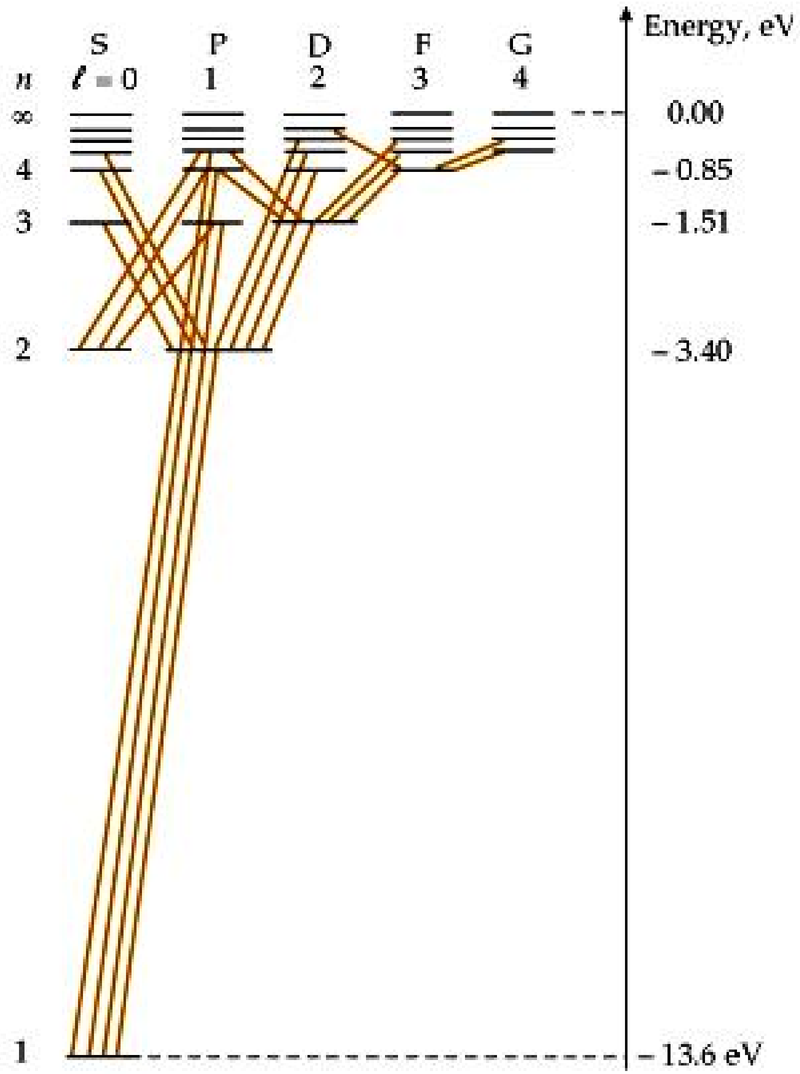
$n = 2;\ \ell = 1;\ m = 0$



$n = 2;\ \ell = 1;\ m = \pm 1$



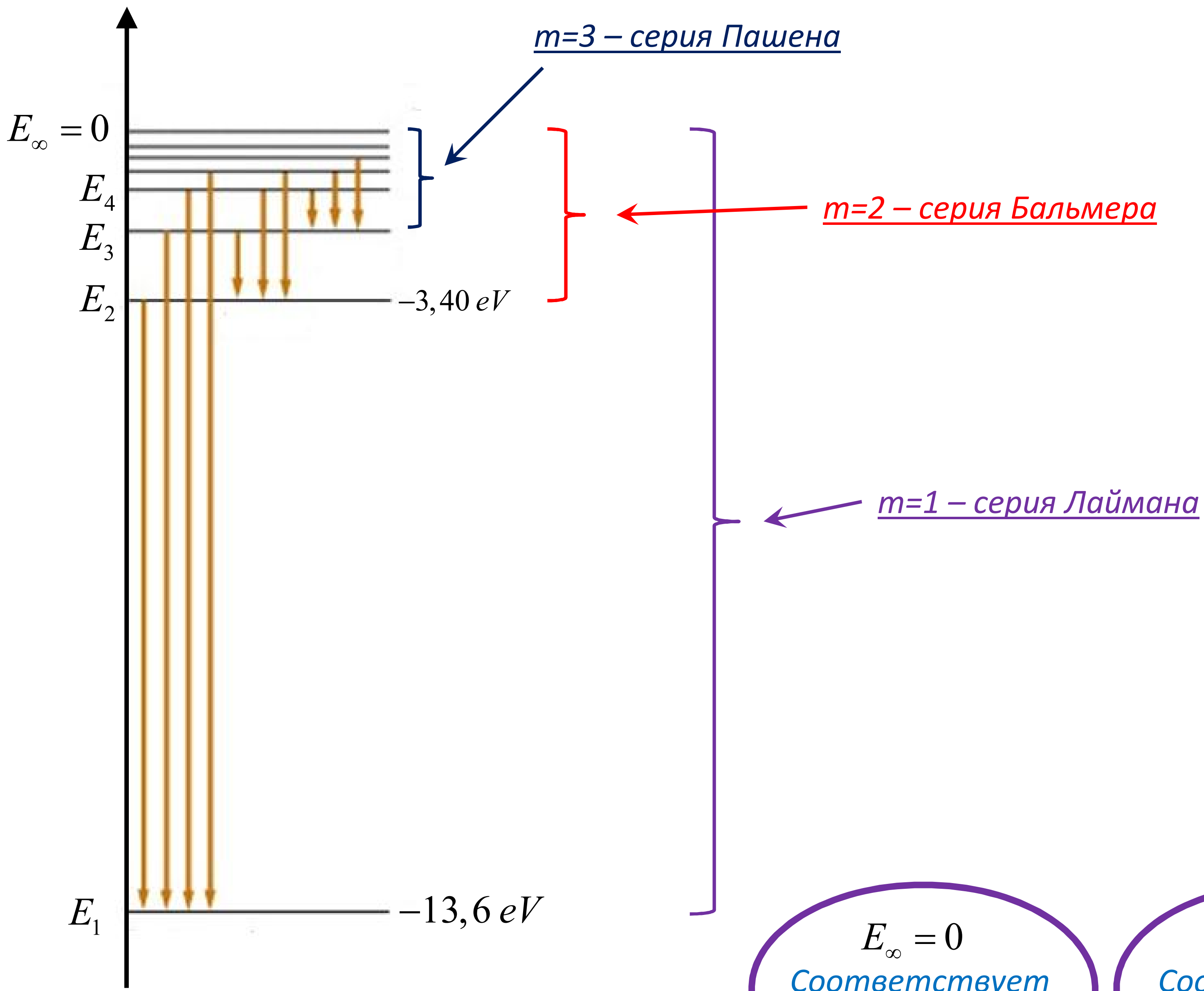

z
z
z
n = 2
ℓ = 0
m = 0
n = 2
ℓ = 1
m = 0
n = 2
ℓ = 1
m = ±1



Правила отбора:

$$\Delta\ell = \pm 1$$
$$\Delta m = 0, \pm 1$$

1s – основное состояние электрона в атоме водорода



$E_\infty = 0$
Соответствует электрону….

$E>0$
Соответствует электрону….

$$E_{nlm}$$

Сильные электрические поля – снятие вырождения – ***эффект Штарка.***

Сильные магнитные поля – снятие вырождения – ***эффект Зеемана.***