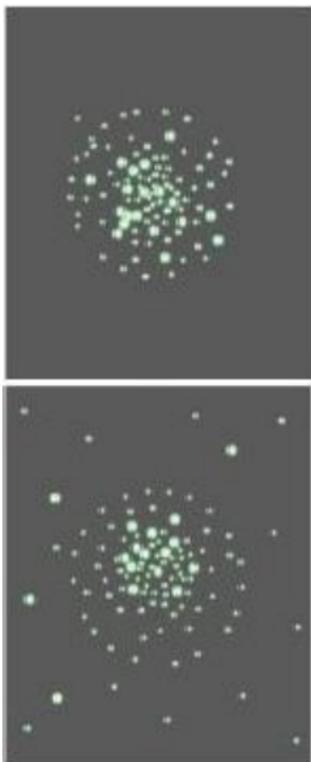


Лекция 12. Боровская модель атома водорода.
Боровский радиус. Энергетические термы.
Спектральные закономерности: серии Лаймана,
Бальмера, Пашена. Частица в
центрально-симметричном поле. Радиальное и
угловое уравнение Шредингера. Спектр энергии и
характер движения частицы. Квантовые числа.
Атом водорода

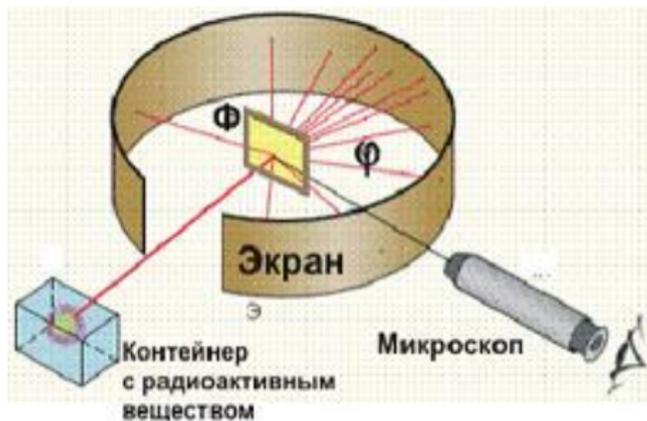
Штыгашев А.А.

Новосибирск, НГТУ

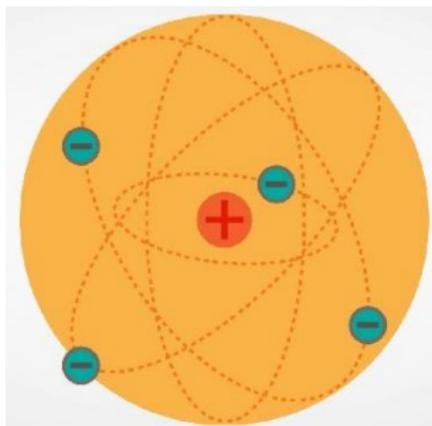
Боровская модель атома водорода



К началу 20-го века не было понимания, что такое атом, пока в известных опытах Резерфорда 1909 по рассеянию альфа-частиц (ядро атома гелия) на атомах золота (использовалась фольга из золота) не обнаружилось рассеяние на большие углы.



Для объяснения результатов Резерфорд предложил планетарную модель атома: тяжелое положительно заряженное ядро, в котором сосредоточена практически вся масса атома и вращающиеся вокруг ядра электроны.



Согласно законам электродинамики **ускоренно** ($E \sim \ddot{p}$) движущийся заряд **излучает** электромагнитные волны.

Раз электрон движется вокруг ядра, то он движется с центростремительным **ускорением** и атом **должен излучать** → энергия электрона должна уменьшаться → радиус орбиты электрона непрерывно уменьшаться и **электрон падает на ядро**.

Эта проблема устойчивости атома в рамках классической физики нерешаема.

Для решения проблемы устойчивости Бор Н. использовал квантовые представления. Им были сформулированы постулаты:

- 1. Атомы могут длительное время находиться в определенных стационарных состояниях. Энергии стационарных состояний образуют дискретный спектр энергии.
- 2. При переходе атома из начального n -го состояния в конечное m -е состояние ($E_n > E_m$) происходит излучение кванта света, причем

$$\omega = (E_n - E_m)/\hbar \quad (1)$$

Правила квантования

Для **круговых** орбит электронов в атоме стационарными являются орбиты, при движении по которым момент импульса \mathbf{L} электрона равен целому числу приведенных постоянных Планка \hbar

$$L_n = mv_n r_n = n\hbar \quad (2)$$

где n называется **квантовым числом**,

Рассмотрим боровскую модель атома водорода, которая состоит из положительно заряженного протона и электрона.

Для атома водорода или водородоподобных атомов или одновалентного иона потенциальная энергия электрона в поле ядра есть

$$U = -\frac{1}{4\pi\epsilon} \frac{Zq^2}{r_n} \quad (3)$$

Согласно второму закону Ньютона $m\mathbf{a} = \mathbf{F}$

$$m \frac{v_n^2}{r_n} = \frac{1}{4\pi\epsilon} \frac{Zq^2}{r_n^2}. \quad (4)$$

Найдем кинетическую энергию

$$E_K \equiv m \frac{v_n^2}{2} = \frac{1}{4\pi\epsilon} \frac{Zq^2}{2r_n} \quad (5)$$

С другой стороны, полная энергия частицы в n -м состоянии есть

$$E_n = E_K + U = \frac{1}{4\pi\epsilon} \frac{Zq^2}{2r_n} - \frac{1}{4\pi\epsilon} \frac{Zq^2}{r_n} = -\frac{1}{4\pi\epsilon} \frac{Zq^2}{2r_n} < 0 \quad (6)$$

Из (??) и (3) найдем радиус орбиты r_n электрона

$$r_n = \frac{4\pi\epsilon\hbar^2}{mq^2} \frac{n^2}{Z} \quad (7)$$

Радиус первой боровской орбиты равен

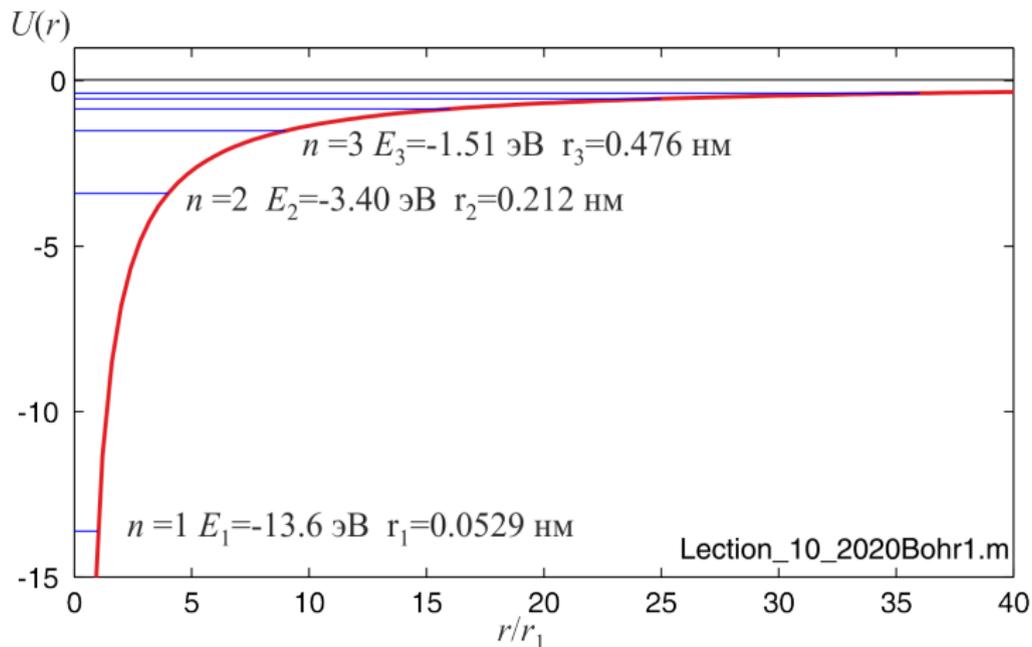
$$r_1 = \frac{4\pi\epsilon\hbar^2}{mq^2} = 0.529 \cdot 10^{-10} \text{ м} \quad (8)$$

$$r_n = r_1 \frac{n^2}{Z} \quad (9)$$

Энергия стационарных состояний

Подставляя (7) и (6), получаем

$$E_n = -\frac{mZ^2q^4}{32\pi^2\varepsilon^2\hbar^2} \frac{1}{n^2} \quad (10)$$



Спектральные закономерности атома водорода

Существует два вида излучения материального тела

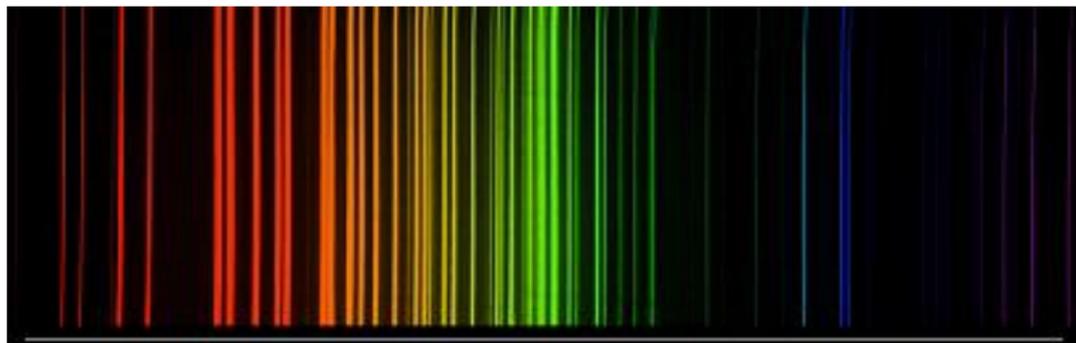
- **тепловое излучение**
- **нетепловое излучение**

Нетепловое излучение называется люминесценцией

Люминесценция – это излучение, представляющее собой избыток над тепловым излучением тела и продолжающееся в течении времени, значительно превышающее период световых колебаний

Спектральный анализ – совокупность методов определения элементного и молекулярного состава и строения веществ.

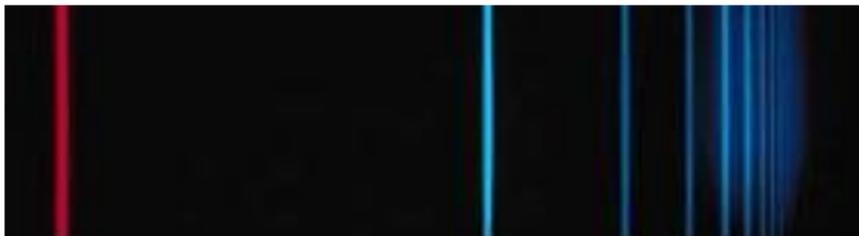
Спектр (spectrum-представление, образ) совокупность всех значений какой-либо физической величины, характеризующей систему или процесс.



Основа спектрального анализа – спектроскопия атомов и молекул. Эмиссионный спектральный анализ проводят по спектрам испускания возбужденных атомов, ионов и молекул.

Во второй половине 19 века эмиссионный анализ излучения атомов и в первую очередь атомов водорода имел фундаментальное значение для Естествознания, поскольку считалось, что открытие законов образования эмиссионных линейчатых спектров поможет понять внутреннюю структуру атомов.

Так были установлены сначала 4 линии излучения атома водорода: 656, 486, 434, 410 нм и были затрачены колоссальные усилия связать эти линии излучения с периодическими движениями чего-то внутри атома.



Линии серии Бальмера слева направо: H_α , H_β , H_γ , H_δ , ...

Формула Бальмера

$$\lambda = \Lambda \frac{m^2}{m^2 - 2^2}, \quad \Lambda = 3.645 \cdot 10^{-10} \text{ м}, \quad m = 3, 4, 5, \dots \quad (11)$$

Бальмер предсказал существование линии видимой части спектра с длиной волны 396.965 нм, которую обнаружили позже, а также указал границы серии линий, т.е. длина волны излучения не может быть больше 656 нм и меньше 364 нм.

Преобразуем формулу Бальмера к современному виду

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{1}{\Lambda} \frac{m^2 - 2^2}{m^2} = \frac{1}{\Lambda} \left(1 - \frac{2^2}{m^2} \right) = \frac{4}{\Lambda} \left(\frac{1}{2^2} - \frac{2}{m^2} \right) \quad (12)$$

$$\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{2^2} - \frac{2}{m^2} \right) \quad (13)$$

где $R = 1.0973732 \cdot 10^7 \text{ м}^{-1}$ - постоянная Ридберга.

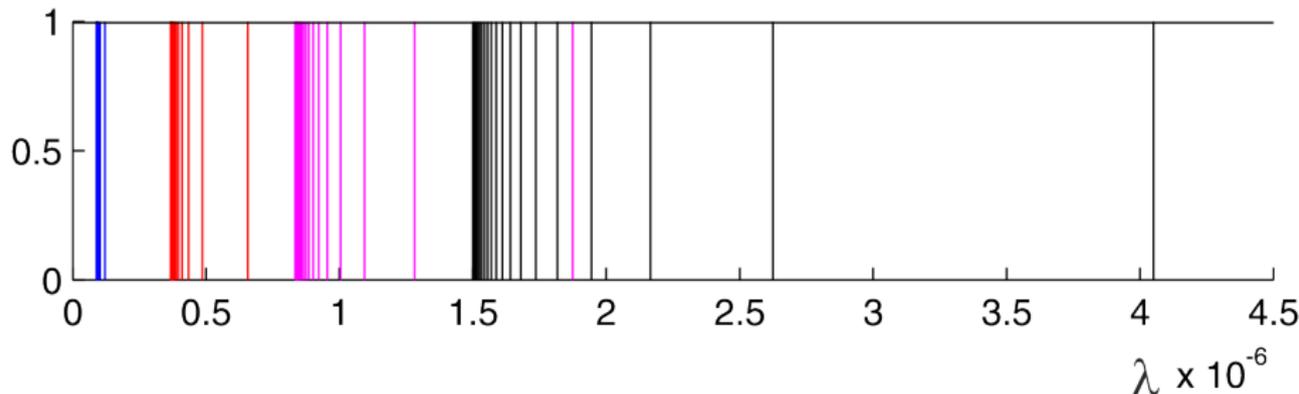
Позднее были открыты в УФ части спектра линии серии Лаймана

$$\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{1^2} - \frac{1}{m^2} \right) \quad (14)$$

и линии

$$\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right) \quad (15)$$

серии Пашена ($n = 3$), Брекета ($n = 4$), Пфундта ($n = 5$) в ИК части спектра излучения атома водорода.



Комбинационный принцип

В 1908 году Ритц сформулировал комбинационный принцип: частоту любой спектральной линии некоторого элемента можно выразить в виде разности двух спектральных термов, каждый из которых характеризуется целым числом

$$\omega_{nm} = T(n) - T(m) \quad (16)$$

где $T(n) = 2\pi cR/n^2$ - спектральный терм.

Комбинационный принцип утверждает, что все линии в спектре атомов могут быть представлены комбинацией термов, но не все комбинации соответствуют линиям в спектре. Некоторые комбинации термов запрещены.

Правила, по которым определяются какие комбинации возможны, а какие запрещены, называются **правилами отбора**.

Итак, по постулату Бора атома водорода все спектральные линии получаются в результате переходов

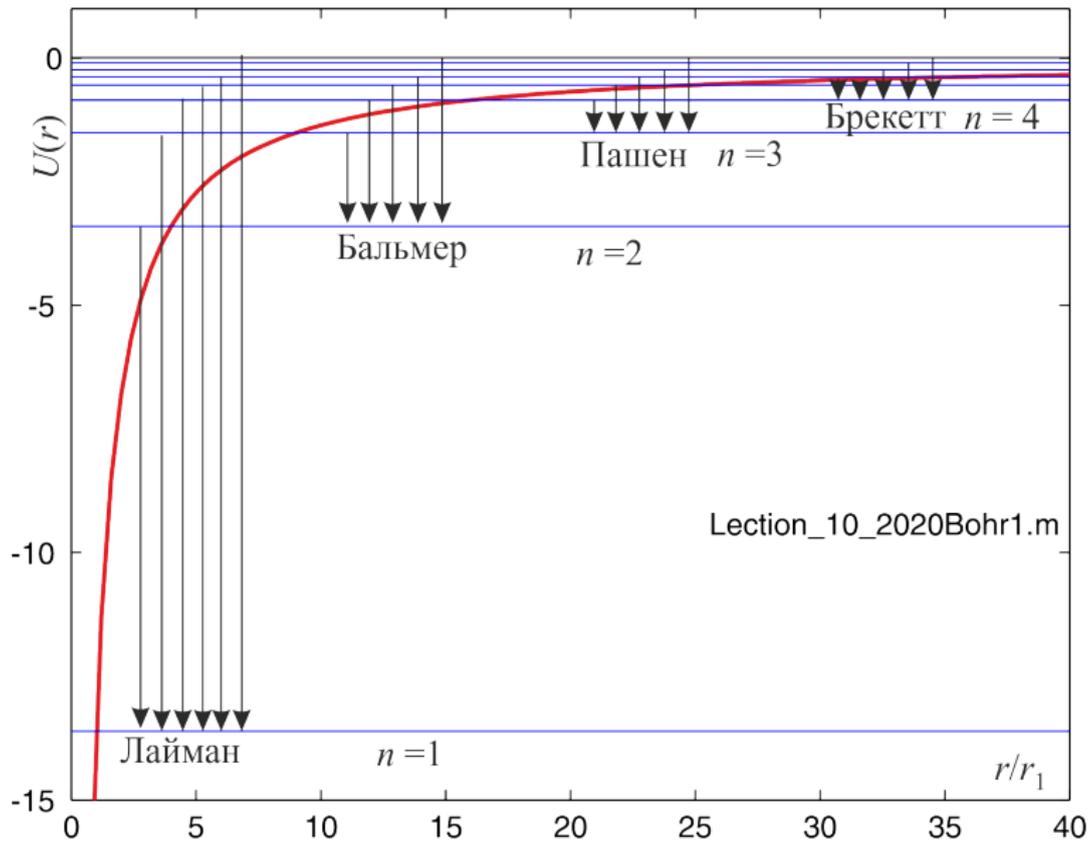
$$\hbar\omega_{nm} = E_n - E_m \quad (17)$$

между стационарными состояниями атома. Учитывая $\omega_{nm} = 2\pi c/\lambda_{nm}$, а E_n дано формулой (10), получаем при

$$\hbar \frac{2\pi c}{\lambda_{nm}} = -\frac{mZ^2q^4}{32\pi^2\varepsilon^2\hbar^2} \frac{1}{n^2} + \frac{mZ^2q^4}{32\pi^2\varepsilon^2\hbar^2} \frac{1}{m^2} \quad (18)$$

$$\frac{1}{\lambda_{nm}} = \frac{mZ^2q^4}{8c\varepsilon_0^2\hbar^3} \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad (19)$$

где размерный множитель перед скобкой численно равен $1.089 \cdot 10^7 \text{ м}^{-1}$, который с точностью 0.7% равен постоянной Ридберга. Различие связано с тем, что в модели атома водорода считалось, что ядро водорода неподвижное, а на самом деле ядро и электрон движутся вокруг их центра масс.



Движение частицы в центрально-симметричном поле

Если потенциальная энергия частицы U зависит только от длины радиус-вектора r , то потенциальная энергия является центрально-симметричной: $U = U(r)$.

Стационарное уравнение Шредингера в трехмерном случае есть

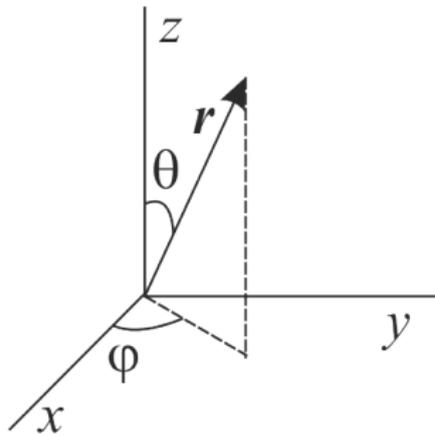
$$\hat{H}\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}), \quad \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U(r) \right) \psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}) \quad (20)$$

или

$$\Delta\psi(\mathbf{r}) + k^2(r)\psi(\mathbf{r}) = 0 \quad (21)$$

где

$$k^2(\mathbf{r}) = \frac{2m}{\hbar^2}(E - U(r)) \quad (22)$$



Перейдем от прямоугольной системы координат к сферической системе координат

$$\begin{aligned} x &= r \cos \varphi \sin \theta \\ y &= r \sin \varphi \sin \theta \\ z &= r \cos \theta \end{aligned} \quad (23)$$

Оператор Лапласа

$$\Delta \equiv \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} = \frac{1}{r^2} \Lambda_r + \frac{1}{r^2} \Lambda_{\theta, \varphi} \quad (24)$$

где

Λ_r - радиальная часть оператора Лапласа;

$\Lambda_{\theta, \varphi}$ - угловая часть оператора Лапласа.

Радиальная часть оператора Лапласа

$$\Lambda_r \equiv \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} \quad (25)$$

Угловая часть оператора Лапласа

$$\Lambda_{\theta, \varphi} \equiv \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \quad (26)$$

Решение ищется в виде произведения

$$\psi(\mathbf{r}) = R(r)Y(\theta, \varphi) \quad (27)$$

При подстановке ВФ в УШ получаем

$$\Lambda_r R(r)Y(\theta, \varphi) + \Lambda_{\theta, \varphi} R(r)Y(\theta, \varphi) + r^2 k^2 R(r)Y(\theta, \varphi) = 0 \quad (28)$$

или

$$Y(\theta, \varphi)(\Lambda_r R(r) + r^2 k^2 R(r)) + R(r)\Lambda_{\theta, \varphi} Y(\theta, \varphi) = 0 \quad (29)$$

Разделим на $R(r)Y(\theta, \varphi)$ и разделим соотношение на две части, получаем

$$\frac{1}{R(r)}(\Lambda_r R(r) + r^2 k^2 R(r)) = -\frac{1}{Y(\theta, \varphi)} \Lambda_{\theta, \varphi} Y(\theta, \varphi) \quad (30)$$

где левая часть зависит только от радиус-вектора r , а угловая часть зависит только от угловых переменных θ, φ , тогда равны они могут ТОЛЬКО константе (обозначим за λ)

Имеем два УШ:

- радиальное УШ

$$\Lambda_r R(r) + r^2 k^2 R(r) = \lambda R(r) \quad (31)$$

- угловое УШ

$$\Lambda_{\theta, \varphi} Y(\theta, \varphi) = -\lambda Y(\theta, \varphi) \quad (32)$$

Радиальное уравнение Шредингера возможно решить только когда определено силовое поле - потенциальная энергия $U(r)$ и энергия E частицы, поэтому отложим его рассмотрение до соответствующего примера.

Угловое УШ не содержит потенциальной энергии частицы, ни энергии частицы, поэтому является универсальным уравнением для дискретного и непрерывных частей спектра энергий частицы в любом потенциальном поле.

Угловое уравнение Шредингера

Угловое УШ решается разделением переменных

$$Y(\theta, \varphi) = P(\theta)\Phi(\varphi) \quad (33)$$

Подставляем (33) в (32) имеем

$$\Lambda_{\theta, \varphi} P(\theta)\Phi(\varphi) + \lambda P(\theta)\Phi(\varphi) = 0 \quad (34)$$

$$\Phi(\varphi) \left(\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} P(\theta) + \lambda \sin^2 \theta P(\theta) \right) + P(\theta) \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \Phi(\varphi) = 0 \quad (35)$$

Разделим соотношение на две части, где одна часть зависит только от полярного угла θ , а другая часть зависит только от азимутального угла φ , тогда равны они могут **ТОЛЬКО** константе, для удобства обозначим константу как μ^2 , следовательно, имеем два уравнения:

- полярное угловое уравнение Шредингера

$$\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} P(\theta) + (\lambda \sin^2 \theta - \mu^2) P(\theta) = 0 \quad (36)$$

- азимутальное угловое уравнение Шредингера

$$-\frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \Phi(\varphi) = \mu^2 \Phi(\varphi) \quad (37)$$

Азимутальное угловое уравнение Шредингера

Азимутальное уравнение имеет решение

$$\Phi(\varphi) = Ae^{i\mu\varphi} \quad (38)$$

Так как ВФ $\psi(r, \theta, \varphi)$ должна быть однозначной функцией своих аргументов, тогда изменение азимутального угла φ на 2π должно приводить к тому же значению $\Phi(\varphi)$, то есть должна быть периодической функцией с периодом 2π : $\Phi(\varphi) = \Phi(\varphi + 2\pi)$.

Это условие приводит к требованию быть целым числом константе $\mu = m$, где $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$, которое называется **магнитным квантовым** числом, т.е.

$$\Phi(\varphi) = Ae^{im\varphi} \quad (39)$$

Азимутальное угловое уравнение Шредингера

Амплитуда A находится из условия

$$\int_0^{2\pi} |\Phi(\varphi)|^2 d\varphi = 1, \quad |A|^2 \int_0^{2\pi} d\varphi = 1 \quad |A|^2 2\pi = 1 \rightarrow A = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \quad (40)$$

$$\Phi(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi} \quad (41)$$

Полярное угловое уравнение Шредингера

Упростим полярное уравнение (36), используя подстановку $\eta = \cos \theta$, тогда $d\eta = -\sin \theta d\theta$ и полярное уравнение (36) принимает вид

$$\frac{\partial}{\partial \eta} (1 - \eta^2) \frac{\partial}{\partial \eta} P + \left(\lambda - \frac{m^2}{1 - \eta^2} \right) P(\eta) = 0 \quad (42)$$

где $-1 \leq \eta \leq 1$. Для обеспечения конечности и непрерывности ВФ $P(\eta)$ постоянная λ должна быть неотрицательным целым числом равным

$$\lambda = l(l + 1) \quad (43)$$

где $l = 0, 1, 2, 3, \dots$ и называется **орбитальным квантовым** числом, а решения (42) есть ортогональные полиномы Лежандра $P_l^m(\cos \theta)$, явный вид которых мы выписывать не будем.

При заданном орбитальном числе l , магнитное квантовое число m может принимать значения из диапазона от $-l$ до l , всего $2l + 1$ значений магнитного квантового числа m .

Решения уравнения Шредингера

Квантовое состояние частицы в сферически-симметричном силовом поле описывается ВФ (27), являющимися

- решениями радиального УШ, требующем определения $U(r)$

$$\frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} R(r) + \left(r^2 \frac{2m}{\hbar^2} (E - U(r)) - l(l+1) \right) R(r) = 0 \quad (44)$$

- решениями полярного уравнения (42) и азимутальной ВФ (41).

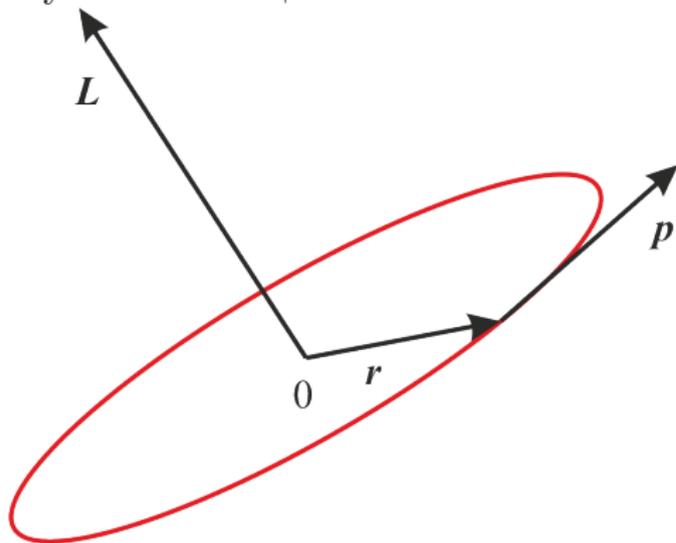
Радиальное уравнение Шредингера

Преобразуем (44):

$$\frac{\partial^2}{\partial r^2} R(r) + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} R(r) + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E - U(\mathbf{r}) - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m r^2} \right) R(r) = 0 \quad (45)$$

Момент импульса частицы

Если частица движется в центрально-симметричном поле или отсутствуют внешнее силовое поле (система изолирована), то момент импульса частицы относительно полюса O сохраняется.



$$\mathbf{L} = \text{const.} \quad (46)$$

где

$$\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p} \quad (47)$$

и проекции \mathbf{L} равны

$$\begin{aligned} L_x &= yp_z - zp_y, \\ L_y &= zp_x - xp_z, \\ L_z &= xp_y - yp_x, \end{aligned} \quad (48)$$

Закон сохранения момента импульса системы отражает физическую эквивалентность всех направлений в пространстве.

В классической механике момент импульса частицы складывается из собственного момента и орбитального момента.

Собственный момент импульса частицы или системы частиц (тела) определяется относительно центра масс частицы (системы).

Орбитальный момент существует только при перемещении системы в пространстве.

У отдельной материальной точки собственный момент импульса отсутствует, и материальная точка может характеризоваться **только орбитальным моментом импульса**.

В квантовой механике момент импульса частицы

$$\hat{L}_x = \frac{\hbar}{i} \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right), \quad (49)$$

$$\hat{L}_y = \frac{\hbar}{i} \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right), \quad (50)$$

$$\hat{L}_z = \frac{\hbar}{i} \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right), \quad (51)$$

из-за ограничений соотношения неопределенностей определяется только для одной из компонент оператора момента импульса, например, \hat{L}_z , и квадратом модуля собственного значения оператора момента импульса \hat{L}^2 (где $\hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2$), следовательно, **положение момента импульса в пространстве принципиально не наблюдаемо!** Но измеримо в статистическом смысле.

Момент импульса частицы в сферических координатах

Проекции момента импульса частицы в сферических координатах

$$\hat{L}_x = -\frac{\hbar}{i} \left(\sin \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + \operatorname{ctg} \theta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right), \quad (52)$$

$$\hat{L}_y = \frac{\hbar}{i} \left(\cos \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} - \operatorname{ctg} \theta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right), \quad (53)$$

$$\hat{L}_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi}. \quad (54)$$

В отличие от момента импульса классической частицы, где существенно положение полюса θ и длина радиус-вектора \mathbf{r} , **момент импульса квантовой частицы зависит только от углов θ, φ** , и поэтому называется **угловым или вращательным моментом импульса**.

Собственные функции и собственные значения оператора проекции момента импульса \hat{L}_z найдем из условия

$$\hat{L}_z \psi = L_z \psi \quad (55)$$

тогда

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi} \psi = L_z \psi \quad (56)$$

Разделяя переменные, мы получаем обыкновенное дифференциальное уравнение первого порядка с разделяющимися переменными

$$\frac{d\psi}{\psi} = i \frac{L_z}{\hbar} d\varphi \quad (57)$$

интегрируя которое, получаем

$$\psi = A \exp \left(i \frac{L_z}{\hbar} \varphi \right) \quad (58)$$

ВФ ψ должна быть однозначной функцией своих аргументов:
 $\psi(\varphi) = \psi(\varphi + 2\pi)$.

Это условие приводит к требованию:

$$i\frac{L_z}{\hbar}\varphi = i\frac{L_z}{\hbar}(\varphi + 2\pi) \rightarrow \frac{L_z}{\hbar}2\pi = 2\pi m. \quad (59)$$

Тогда:

$$L_z = \hbar m \quad (60)$$

где $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$, называется **МАГНИТНЫМ КВАНТОВЫМ ЧИСЛОМ**.

$$\psi = Ae^{im\varphi} \quad (61)$$

Собственная функция (61) оператора проекции момента импульса \hat{L}_z не является собственной функцией для \hat{L}_x и \hat{L}_y , поэтому \hat{L}_x и \hat{L}_y не могут измерены одновременно с \hat{L}_z . Рассмотрим $|\hat{L}^2|$.

Это не квадрат длины L^2 , который принципиально не измерим, а **собственное значение** оператора квадрата $\hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2$:

$$\hat{L}^2\psi = L^2\psi \quad (62)$$

Решение задачи на собственное значение (62) приводит к результату

$$L^2 = \hbar^2 l(l + 1) \quad (63)$$

где $l = 0, 1, 2, \dots$ - орбитальное квантовое число.

Операторы \hat{L}^2 и \hat{L}_z коммутируют, поэтому измеримы одновременно. Проекция отрезка на некоторое направление не может быть больше длины отрезка, то магнитное квантовое число ограничено

$$-l \leq m \leq l$$

- всего таких состояний $2l + 1$.

Вернемся к модели атома водорода, электрон которого находится в центрально-симметричном поле вида

$$U(r) = -\frac{1}{4\pi\epsilon} \frac{Zq^2}{r} \quad (64)$$

Решение стационарного уравнения Шредингера (20) есть

$$\psi(\mathbf{r}) = \psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad (65)$$

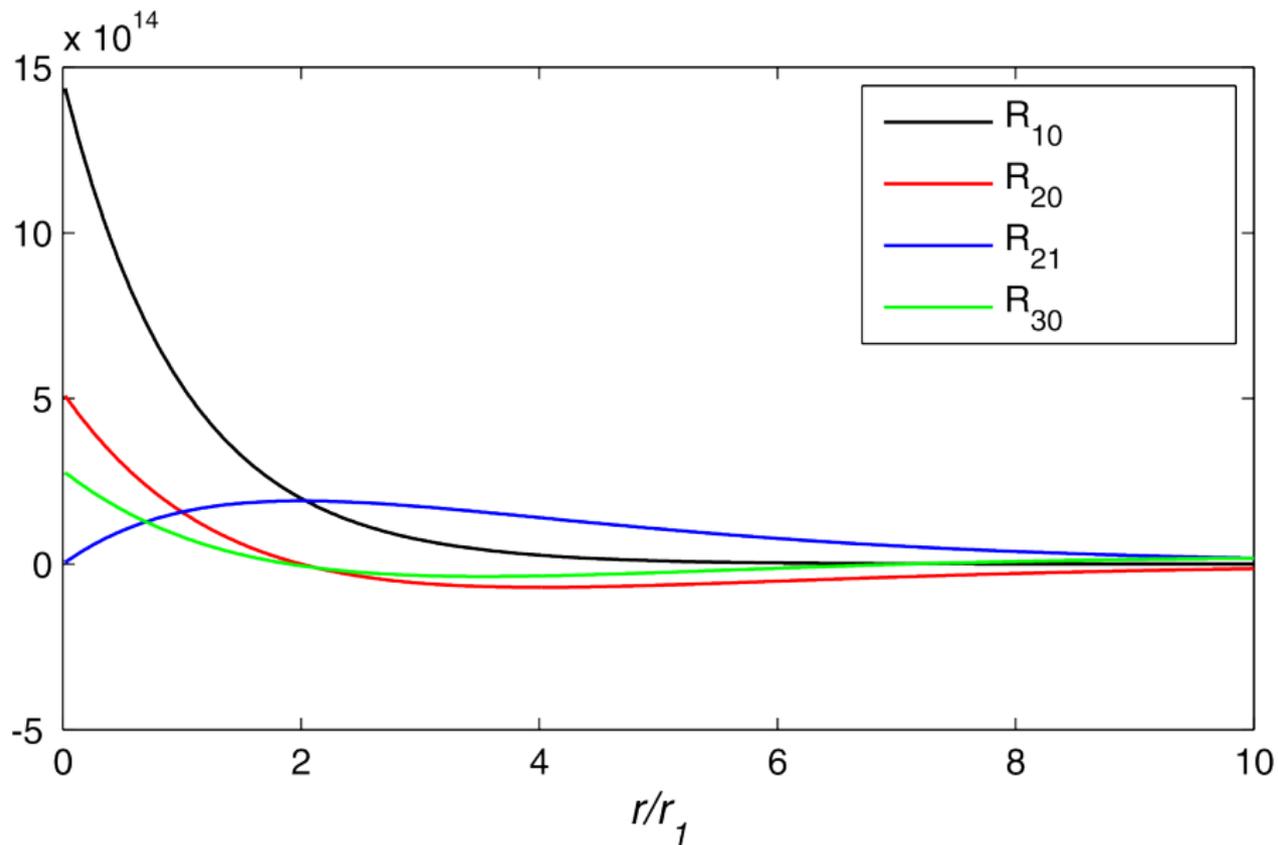
где $R_{nl}(r)$ - радиальная волновая функция, а $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ - угловая волновая функция стационарного состояния, n, l, m - квантовые числа, характеризующие стационарное состояние.

Угловая волновая функция частицы в центральном симметричном силовом поле не зависит от явного вида потенциальной энергии частицы и может быть представлена в виде

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) = A_{lm} P_l^m(\theta) e^{im\varphi} \quad (66)$$

Радиальное уравнение Шредингера для атома водорода и водородо-подобных систем

$$\frac{d^2}{dr^2} R_{nl}(r) + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} R_{nl}(r) + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E + \frac{1}{4\pi\epsilon} \frac{Zq^2}{r_n} - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m r^2} \right) R_{nl}(r) = 0 \quad (67)$$



При $E > 0$ спектр энергий электрона в атоме непрерывный, задача ставится как задача рассеяния электрона кулоновским центром (ядром).

При $E < 0$ спектр электрона в атоме дискретный и соответственно решается задача определения энергии и ВФ стационарных состояний в атоме, E_n совпадают с соответствующим результатом Бора и определяется главным квантовым числом n

$$E_n = -\frac{mZ^2q^4}{32\pi^2\varepsilon^2\hbar^2} \frac{1}{n^2} = -\frac{13.6}{n^2} \text{ эВ} \quad (68)$$

Как показано выше, при орбитальном движении электрона вокруг ядра сохраняется полный механический момент \hat{L}^2 импульса электрона относительно ядра и одна из его проекций на некоторое направление, традиционно выбирают \hat{L}_z .

Результаты действия \hat{L}^2 и \hat{L}_z на угловую волновую функцию

$$\hat{L}^2 Y_{lm}(\theta, \varphi) = \hbar^2 l(l+1) Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad (69)$$

$$\hat{L}_z Y_{lm}(\theta, \varphi) = \hbar m Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad (70)$$

где

- l - орбитальное квантовое число, $l = 0, 1, 2, \dots, n - 1$;
- m - магнитное квантовое число, $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$;

Как показывает эксперимент, в отсутствие внешних полей состояние электрона в атоме, определяется тремя квантовыми числами.

Для атома водорода квантовые числа изменяются:

- $n = 1, 2, 3, \dots$
- $l = 0, 1, 2, \dots, n - 1$
- $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$

Таблица: Орбитальное квантовое число

l	0	1	2	3	4	5	6	7
	s	p	d	f	g	h	i	k

n	l	m	ψ_{nlm}	
1	0	0	ψ_{100}	$Ae^{-\rho}$
2	0	0	ψ_{200}	$B_2(1 - \rho/2)e^{-\rho/2}$
2	1	1	ψ_{211}	$-0.5B_2e^{-\rho/2}\rho \sin \theta e^{i\varphi}$
2	1	0	ψ_{210}	$0.5B_2e^{-\rho/2}\rho \cos \theta$
2	1	-1	$\psi_{21\bar{1}}$	$0.5B_2e^{-\rho/2}\rho \sin \theta e^{-i\varphi}$
3	0	0	ψ_{300}	$B_3e^{-\rho/3}(1 - 2\rho/3 + 2\rho^2/27)$
3	1	1	ψ_{311}	$B_{311}e^{-\rho/3}(\rho - \rho^2/6) \sin \theta e^{i\varphi}$
3	1	0	ψ_{310}	$B_{310}e^{-\rho/3}(\rho - \rho^2/6) \cos \theta$
3	1	-1	$\psi_{31\bar{1}}$	$B_{311}e^{-\rho/3}(\rho - \rho^2/6) \sin \theta e^{-i\varphi}$
3	2	2	ψ_{322}	$2B_{322}e^{-\rho/3}\rho^2 \sin^2 \theta e^{i2\varphi}$
3	2	1	ψ_{321}	$B_{322}e^{-\rho/3}\rho^2 \cos \theta \sin \theta e^{i\varphi}$
3	2	0	ψ_{320}	$B_{320}e^{-\rho/3}\rho^2(2 \cos^2 \theta - 1)$
3	2	-1	$\psi_{32\bar{1}}$	$B_{322}e^{-\rho/3}\rho^2 \cos \theta \sin \theta e^{-i\varphi}$
3	2	-2	$\psi_{32\bar{2}}$	$2B_{322}e^{-\rho/3}\rho^2 \sin^2 \theta e^{-i2\varphi}$

Постоянные (смотри таблицу выше)

$$A = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{r_1} \right)^{3/2} \quad (71)$$

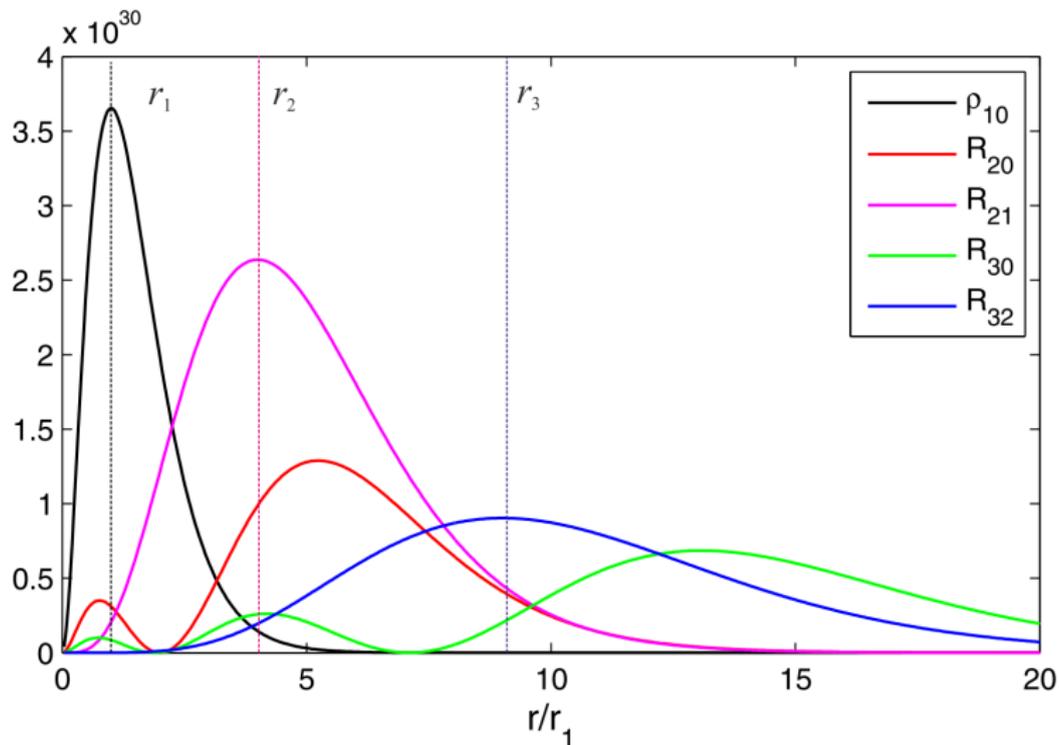
$$B_2 = \frac{1}{\sqrt{8}} A, \quad B_3 = \frac{1}{\sqrt{27}} A, \quad B_{311} = \frac{1}{27} A \quad (72)$$

$$B_{310} = \frac{2\sqrt{2}}{27} A, \quad B_{322} = \frac{1}{162} A, \quad B_{320} = \frac{1}{81\sqrt{6}} A \quad (73)$$

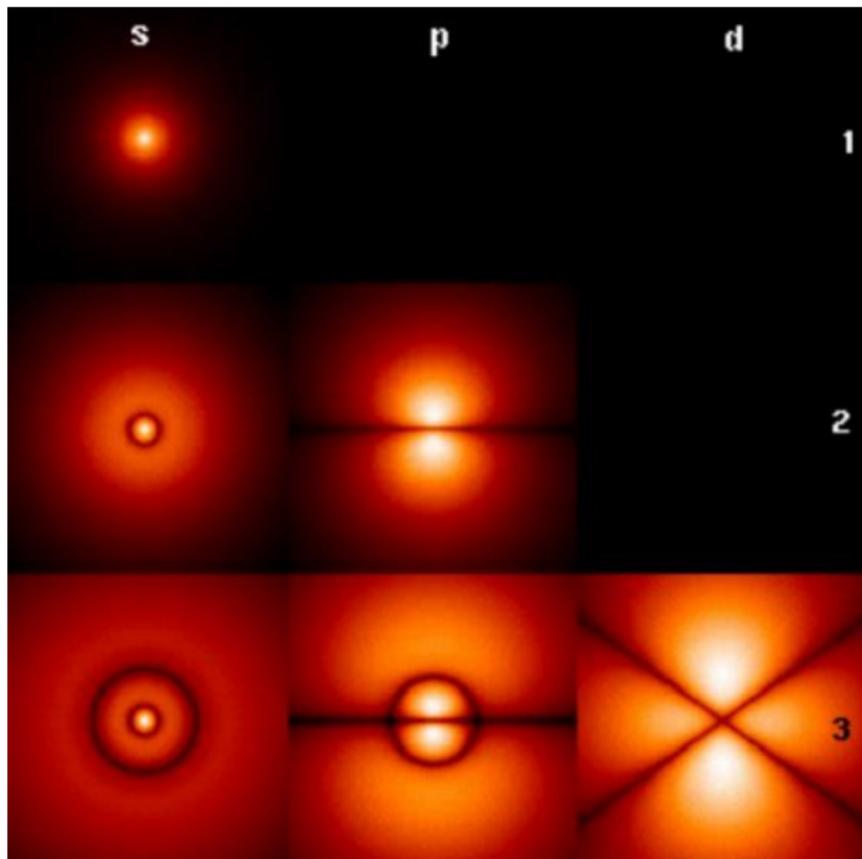
В квантовой механике нет понятия траектории электрона и для наглядности используется представление об электронном облаке, плотность распределения которого пропорциональна плотности вероятности нахождения электрона в окрестности \mathbf{r} .

Вероятность нахождения электрона в шаровом слое от r до $r + dr$:

$$\rho_{nl}(r)dr = |R_{nl}(r)|^2 r^2 \int_0^\pi d\theta \sin \theta \int_0^{2\pi} d\varphi |Y_{lm}(\theta, \varphi)|^2 \equiv A_{ml} |R_{nl}(r)|^2 r^2 dr \quad (74)$$



Максимумы $\rho_{nl}(r)$, соответствующие состояниям $n, l = n - 1$ совпадают с радиусами боровских круговых орбит.

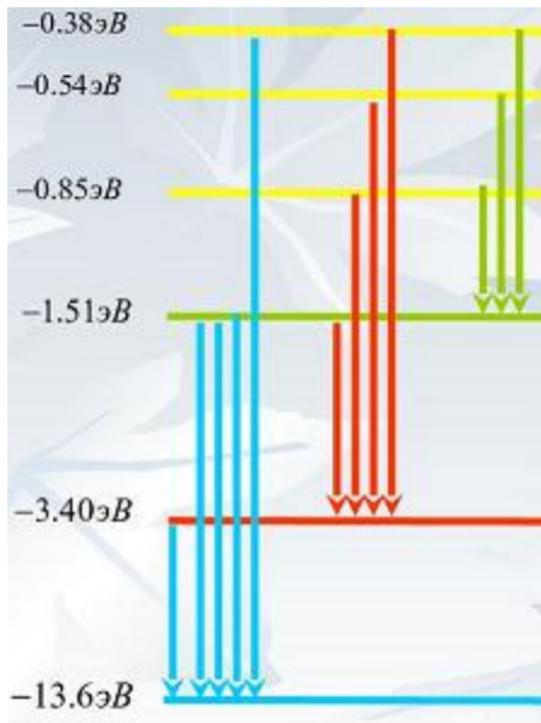


Электронные облака (распределение вероятности нахождения электрона около ядра) атома водорода

$$dP_{nlm}(\mathbf{r}) =$$

$$= \rho_{nl}(\mathbf{r}) dx dy dz$$

ТЕСТ 12



Определите цвет переходов на схеме энергетических уровней атома водорода, соответствующий серии Лаймана.