

Белорусский национальный технический университет

Кафедра «Техническая физика»

Лаборатория оптики и атомной физики

Лабораторная работа № 320д

«Атом водорода в квантовой механике»

Авторы учебной программы и составители методических указаний:

Сидорик В. В., Трухан Е. П.

Минск 2012

Цель работы:

1. Изучить теорию атома водорода по Бору.
2. Изучить закономерности в спектре атома водорода.
3. Ознакомиться с квантовомеханической моделью атома водорода:
 - а) уравнение Шредингера для атома водорода;
 - б) радиальное распределение плотности вероятности электронного облака в атоме водорода;
 - в) угловое распределение плотности вероятности электронного облака в атоме водорода.

Краткая теория атома водорода.

Одна из важнейших закономерностей строения атомных спектров - их серийная структура. Линии линейчатого спектра атомов водорода могут быть объединены в определенные закономерно построенные группы - серии. Длины волн всех линий, принадлежащих к одной серии, могут быть описаны довольно простой формулой, которая называется серийной формулой.

Атом водорода и сходные с ним ионы (модель водородоподобного атома) состоят из ядра с зарядом $+Ze$ и одного электрона с зарядом $-e$ где Z - порядковый номер элемента в периодической системе элементов Д.И.Менделеева.

Кулоновская сила f взаимодействия между ядром и электроном играет роль центростремительной силы, равной для круговой орбиты

$$\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} = \frac{m_e v^2}{r}, \quad (1)$$

где m_e - масса электрона, r - радиус орбиты, v - скорость электрона на орбите.

В электрическом поле ядра электрон обладает потенциальной энергией

$$U = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}. \quad (2)$$

Полная энергия электрона равна сумме потенциальной U и кинетической W_k энергий. С учетом (1) и (2) и знаков в этих выражениях

$$E = U + W_k = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} + \frac{m_e v^2}{2} = -\frac{Ze^2}{8\pi\epsilon_0 r}. \quad (3)$$

Согласно представлениям классической электродинамики, вращающийся по орбите электрон возбуждает вокруг себя переменное электромагнитное поле, распространяющееся в пространстве со скоростью света. Иначе говоря,

ускоренно движущийся электрон при своем вращении вокруг ядра должен излучать и вследствие этого терять часть энергии. Таким образом, согласно классической механике, энергия электрона всё время уменьшается. Из формулы (3) следует, что меньшему значению энергии (с учетом знака) соответствует меньший радиус. В результате электрон должен "упасть" на ядро. Из формулы (1) следует, что с уменьшением радиуса орбиты скорость движения электрона возрастает, т.е. период обращения уменьшается. Это должно привести к непрерывному увеличению частоты излучаемых электромагнитных волн, и атом должен излучать непрерывный (сплошной) спектр. Однако в действительности атом - устойчивая система, и может излучать лишь линейчатый спектр. Выход из создавшегося противоречивого положения был предложен Бором.

Теория водородоподобного атома по Бору.

Основываясь на гипотезе Планка о квантовом характере излучения и поглощения, Бор сформулировал законы, описывающие состояние движения электронов в атоме в виде определенных постулатов, которые дают объяснение экспериментальным данным. Постулаты эти таковы:

1) Электрон в атоме может вращаться только по строго определенным стационарным орбитам, радиусы которых определяются из условия

$$p_n = m_e v_n r_n = n \frac{h}{2\pi} = n\hbar, \quad (4)$$

где p_n - момент импульса электрона на n -ой орбите; n - главное квантовое число, принимающее положительные целые значения $1, 2, \dots, \infty$ и определяющее принадлежность электрона к той или иной орбите; h - постоянная Планка. Все другие орбиты "запрещены". Таким образом, Бор постулировал, что энергия электрона в атоме может принимать строго определенные дискретные значения E_1, E_2, \dots, E_n .

2) Вращаясь по стационарным орбитам, электрон не излучает и не поглощает электромагнитных волн.

3) Излучение происходит лишь при переходе электрона из стационарного состояния с большим значением энергии E_k в другое стационарное состояние с меньшим значением энергии E_i . При этом излучается квант энергии (фотон) строго определенной частоты. Излучение атома монохроматично, и частота определяется фундаментальным соотношением (условие частот Бора)

$$\nu = \frac{E_k - E_i}{h}. \quad (5)$$

Из соотношения (5) следует, что излучение происходит при переходе электрона с внешних орбит на внутренние. Если же электрон переходит с внутренних орбит на внешние, то энергия поглощается.

Решая совместно (1) и (4) получаем для радиусов стационарных орбит и скоростей электрона на этих орбитах следующие выражения:

$$r_n = \frac{\hbar^2 4\pi\epsilon_0}{m_e Z e^2} \cdot n^2, \quad (6)$$

$$v_n = \frac{Z e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar} \cdot \frac{1}{n}. \quad (7)$$

Энергия стационарного состояния из (3)

$$E_n = -\frac{m_e Z^2 e^4}{8\epsilon_0^2 \hbar^2} \cdot \frac{1}{n^2}. \quad (8)$$

Из формулы (8) следует, что квантовое число n определяет энергию электрона в атоме, так как остальные величины в формуле постоянны.

В общем случае атомная система, состоящая из ядра и одного электрона, переходя из стационарного состояния, характеризующегося главным квантовым числом n_k , в состояние с главным квантовым числом n_i , испускает по условию частот Бора спектральные линии с частотами

$$\nu_{ki} = \frac{m_e Z^2 e^4}{8\epsilon_0^2 \hbar^3} \cdot \left(\frac{1}{n_i^2} - \frac{1}{n_k^2} \right) = R Z^2 \left(\frac{1}{n_i^2} - \frac{1}{n_k^2} \right), \quad (9)$$

где постоянная величина

$$R = \frac{m_e e^4}{8\epsilon_0^2 \hbar^3} \quad (10)$$

называется постоянной Ридберга.

Так как, по определению $\nu = c/\lambda$, то

$$\frac{c}{\lambda_{ik}} = R Z^2 \left(\frac{1}{n_i^2} - \frac{1}{n_k^2} \right). \quad (11)$$

Этот закон - один из самых точных в физике. Из него прежде всего и следует, что, все линии спектра могут быть объединены в серии. Серией называется совокупность спектральных линий, описываемых формулой (11) при $n_i = const$

т.е. серия возникает при переходе электрона с вышележащих орбит на орбиту с заданным квантовым числом $n_k = n_i + 1, n_i + 2, n_i + 3, \dots, n_i + \infty$.

Формулу (11) можно представить в виде

$$\frac{1}{\lambda_{ik}} = T_i - T_k, \quad (12)$$

где $T_i = E_i / hc$, $T_k = E_k / hc$ - сериальные термы, пропорциональные значениям энергии атома с точностью до некоторой аддитивной постоянной. В этой связи приобретает физический смысл и постоянная Ридберга R - это число, пропорциональное энергии атома в основном состоянии.

В спектр испускания водорода входит несколько серий, расположенных в различных областях спектра:

а) серия Лаймана - крайняя ультрафиолетовая область

$$\frac{1}{\lambda_{1k}} = \frac{R}{c} \left(\frac{1}{1^2} - \frac{1}{n_k^2} \right) = R' \left(\frac{1}{1^2} - \frac{1}{n_k^2} \right),$$

где $n_i = 1$, $n_k = 2, 3, \dots, \infty$, а величину R' также называют постоянной Ридберга;

б) серия Бальмера - видимая и близкая ультрафиолетовая области

$$\frac{1}{\lambda_{2k}} = R' \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n_k^2} \right),$$

где $n_i = 2$, $n_k = 3, 4, \dots, \infty$;

в) серия Пашена - инфракрасная область спектра

$$\frac{1}{\lambda_{3k}} = R' \left(\frac{1}{3^2} - \frac{1}{n_k^2} \right),$$

где $n_i = 3$, $n_k = 4, 5, \dots, \infty$;

г) серия Брэккета - инфракрасная область спектра

$$\frac{1}{\lambda_{4k}} = R' \left(\frac{1}{4^2} - \frac{1}{n_k^2} \right),$$

где $n_i = 4$, $n_k = 5, 6, \dots, \infty$;

д) серия Пфунда - дальняя инфракрасная область спектра

$$\frac{1}{\lambda_{5k}} = R' \left(\frac{1}{5^2} - \frac{1}{n_k^2} \right)$$

где $n_i = 5$, $n_k = 6, 7, \dots, \infty$.

Схема энергетических уровней атома водорода и соответствующих переходов показана на рис.1.

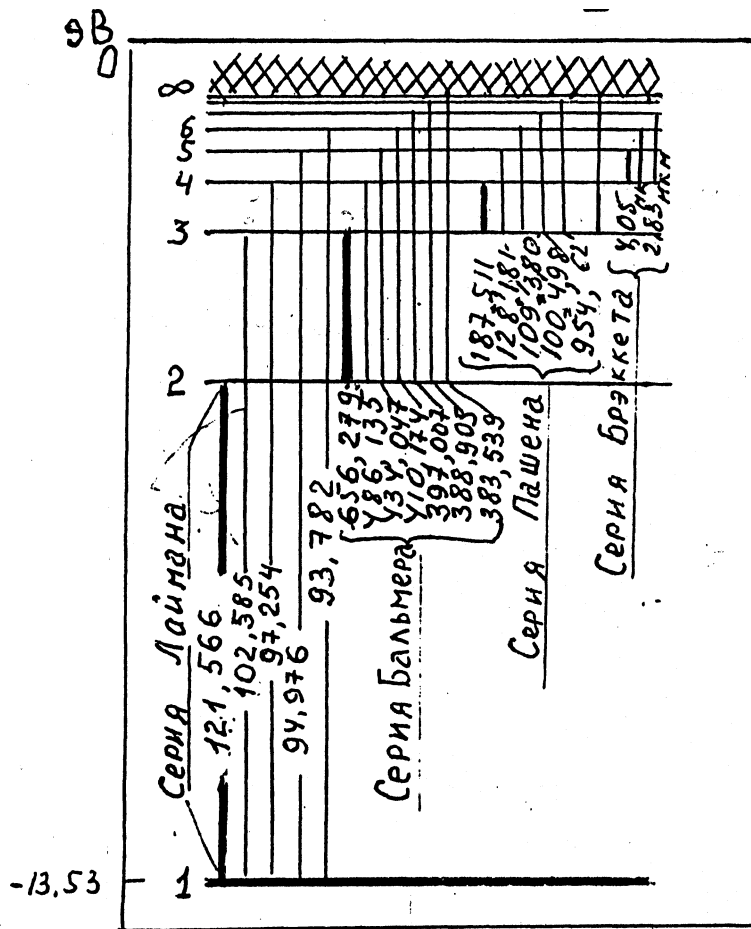


Рис. 1. Схема энергетических уровней атома водорода.

Как видно из рисунка, головным линиями каждой серии являются линии, частоты которых могут быть рассчитаны по формуле:

$$\nu = cR' \left(\frac{1}{n_i^2} - \frac{1}{(n_i + 1)^2} \right). \quad (13)$$

Переходы, обозначенные жирными линиями, соответствуют головным линиям серии и определяются формулой (13). Переходы на заштрихованные уровни соответствуют границе серии и определяются формулой (9), если в ней $n_k = \infty$, т.е. их частоты выразятся формулой

$$\nu = cR' \frac{1}{n_i^2}.$$

Особый интерес представляет определение границы серии Лаймана $\nu_{zp} = cR'$.

Зная частоту граничной линии серии Лаймана, можно определить энергию, необходимую для отрыва электрона от атома водорода, находящегося в нормальном, или основном состоянии с $n_i = 1$. Эта энергия называется энергией ионизации: и вычисляется по формуле:

$$E_{\text{ион}} = h\nu_{\text{зр}} = hcR' . \quad (14)$$

Для водородоподобного атома

$$E_{\text{ион}} = hcR' Z^2 . \quad (15)$$

Таким образом, зная значения констант h , c , R' , Z , можно вычислить энергию ионизации водородоподобного атома по формуле (15) .

Более полное и точное решение задачи о спектральных закономерностях дает квантовая механика.

КВАНТОВОМЕХАНИЧЕСКАЯ ТЕОРИЯ АТОМА ВОДОРОДА.

Для атомной системы, состоящей из ядра с зарядом $+Ze$ и одного электрона, потенциальная энергия определяется по формуле (2), откуда уравнение Шредингера для водородоподобного атома приобретает вид:

$$\Delta\Psi + \frac{2m_o}{\hbar^2} \left(E + \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_o r} \right) \Psi = 0 .$$

Разыскивая решение этого уравнения в виде $\Psi = \Psi_o e^{\frac{i}{\hbar}Et}$, получим, что интересующая нас амплитудная функция Ψ_o удовлетворяет тому же уравнению

$$\Delta\Psi_o + \frac{2m_o}{\hbar^2} \left(E + \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_o r} \right) \Psi_o = 0 . \quad (16)$$

Это уравнение удобнее решать в сферических координатах r , θ , φ , причем решение будем искать в виде произведения двух функций, одна из которых зависит только от радиус-вектора r , а другая - от углов θ и φ :

$$\Psi_o(r, \theta, \varphi) = R(r)Y(\theta, \varphi) . \quad (17)$$

Подставив (17) в (16) и произведя разделение переменных, получим два уравнения, первое из которых определяет радиальную часть решения $R(r)$, а второе - угловую часть $Y(\theta, \varphi)$:

$$\frac{d}{dr}\left(r^2 \frac{dR}{dr}\right) + \frac{2m_0}{\hbar^2}(Er^2 + Ze^2 r)R = \lambda R, \quad (18)$$

$$\frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left(\sin\theta \frac{\partial Y}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2 Y}{\partial\varphi^2} = -\lambda Y, \quad (19)$$

где λ - постоянная величина.

Функция $Y(\theta, \varphi)$ тоже может быть представлена в виде произведения двух функций, из которых одна зависит только от угла θ , другая - от угла φ :

$$Y = \Theta(\theta)\Phi(\varphi). \quad (20)$$

Подставляя (20) в (19) и произведя разделение переменных, приходим к уравнениям

$$\left[\frac{1}{\Theta \sin\theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin\theta \frac{d\Theta}{d\theta}\right) + \lambda \right] \sin^2\theta = m^2, \quad (21)$$

$$\frac{1}{\Phi} \frac{d^2\Phi}{d\varphi^2} = -m^2, \quad (22)$$

где m - постоянная величина.

Решением уравнения (22) является функция

$$\Phi = Ae^{im\varphi}, \quad (23)$$

где A - постоянная.

Из нормировки функции Φ получаем $A = 1/\sqrt{2\pi}$. Функция (23) непрерывна, конечна и однозначна, если

$$m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (24)$$

Уравнение (21) является уравнением шаровых функций и имеет регулярные решения лишь при условии, что

$$\lambda = l(l+1), \quad (l = 0, 1, 2, \dots) \quad (25)$$

причем $|m| \leq l$. Это требование совместно с (24) приводит к тому, что m может принимать следующие значения:

$$m = l, \quad l-1, \quad \dots, \quad 0, \quad \dots, \quad -l. \quad (26)$$

Нормированные функции $\Theta_{l,m}(\theta)$ имеют вид

$$\Theta_{l,m}(\theta) = \sqrt{\frac{(2l+1)(l-|m|)!}{2(l+|m|)!}} \cdot \sin^m \theta \cdot P_l^{|m|}(\cos \theta), \quad (27)$$

где $P_l^{|m|}(\cos \theta)$ - присоединенные полиномы Лежандра, значения которых для различных l и m приведены в таблице 1.

Таблица 1. Значения присоединенных полиномов Лежандра

l	$ m $	$P_l^{ m }(\cos \theta)$
0	0	1
1	1	1
1	0	$\cos \theta$
2	2	3
2	1	$3 \cos \theta$
2	0	$1/2 \cdot (\cos^2 \theta - 1)$
3	3	15
3	2	$15 \cos \theta$
3	1	$3/2 \cdot (5 \cos^2 \theta - 1)$
3	0	$1/2 \cdot (5 \cos^2 \theta - 3 \cos \theta)$

Уравнение (18) при $\lambda = l(l+1)$ принимает вид:

$$\frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{2m_o}{\hbar^2} \left(Er^2 + Ze^2 r - \frac{l(l+1)\hbar^2}{2m_o} \right) R = 0. \quad (28)$$

При $E < 0$ это уравнение имеет регулярные решения, если E принимает следующие собственные значения:

$$E = -\frac{m_o e^4 Z^2}{8\varepsilon_o^2 \hbar^2 (n' + l + 1)^2}, \quad (29)$$

где n' - целое число. Эти значения совпадают со значениями, вычисленными по теории Бора, причем сумма $n' + l + 1$ играет роль главного квантового числа:

$$n' + l + 1 = n. \quad (30)$$

Так как $n' \geq 0$, то $n \geq l + 1$. Таким образом, квантовая механика подтверждает существование для атома водорода и сходных с ним ионов тех же стационарных состояний, которые давала теория Бора.

Каждое стационарное состояние характеризуется тремя целыми числами n' , l и m , причем энергия зависит от суммы $n' + l$ и не зависит от m . Вместо тройки квантовых n' , l и m можно в силу равенства (30) пользоваться тройкой квантовых чисел n , l и m . Возможные значения квантовых чисел l и m при данном n приведены в таблице 2.

Таблица 2. Возможные значения квантовых чисел

n	l	m
1	0	0
2	0	0
	1	-1,0,+1
3	0	0
	1	-1,0,+1
	2	-2,-1,0,+1,+2
4	0	0
	1	-1,0,+1
	2	-2,-1,0,+1,+2
	3	-3,-2,-1,0,+1,+2,+3
5	0	0
	1	-1,0,1
	2	-2,-1,0,+1,+2
	3	-3,-2,-1,0,+1,+2,+3
	4	-4,-3,-2,-1,0,+1,+2,+3,+4

Все стационарные состояния с одним n имеют одну и ту же энергию. Такие состояния называются вырожденными. При данном главном квантовом числе n существует n^2 возможных состояний с одинаковой энергией E_n .

Уравнение (28) является радиальным уравнением, которое описывает поведение волновой функции в зависимости от расстояния от протона. Его решение, т.е. радиальные собственные функции, имеет вид:

$$R_{n,l} = e^{-nr} r^l L_{nl}(r), \quad (31)$$

где n - любое отличное от нуля положительное целое число и l - орбитальное квантовое число. Число n - главное квантовое число. $L_{nl}(r)$ - полином Лагерра. Из свойств полиномов Лагерра следует, что решения для уравнения (31) существуют только когда $n \geq l + 1$. После решения всех уравнений мы получили

систему трех квантовых чисел для простой модели атома водорода, которые связаны между собой следующим образом:

полное (или главное) квантовое число $n = 1, 2, 3, \dots$;

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

магнитное квантовое число $m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$.

Итак, уравнение Шредингера для атома водорода имеет общее решение

$$\Psi_{n,l,m_l} = [e^{-nr} r^l L_{nl}(r)] [P_{l,m_l} \cos \theta] A e^{im_l \varphi}. \quad (32)$$

Функция Ψ_{n,l,m_l} в общем случае является комплексной. Если Ψ_{n,l,m_l}^* - функция, комплексно сопряженная Ψ_{n,l,m_l} , то величина

$$p = \Psi_{n,l,m_l}^* \cdot \Psi_{n,l,m_l} \quad (33)$$

представляет собой вероятность на единицу объёма, или плотность вероятности обнаружения электрона в данной точке пространства относительно центра ядра протона. Обозначим через $dV = r^2 \sin \theta dr d\theta d\varphi$ элемент объёма в сферических координатах и потребуем, чтобы выполнялось соотношение

$$\int_{\varphi=0}^{2\pi} \int_{\theta=-\pi}^{\pi} \int_{r=0}^{\infty} \Psi_{n,l,m_l}^* \cdot \Psi_{n,l,m_l} dV = 1,$$

которое представляет собой условие нормировки, утверждающее, что электрон действительно находится где-то в пространстве вокруг протона. Умножая плотность вероятности на заряд электрона, мы получим распределение плотности заряда в атоме.

В общем случае распределение плотности вероятности обнаружения частицы $\Psi^* \Psi$ зависит от трех координат r , θ и φ , как от квантовых чисел n , l и m_l . Каждое состояние характеризуется своим, отличающимся от других, распределением плотности вероятности. Радиальная часть волновой функции (см. уравнение 31) действительна и не зависит от угловых координат θ и φ и от магнитного квантового числа m_l . Плотность вероятности обнаружения частицы в данной точке вдоль радиуса равна

$$p_r = R_{n,l}^* \cdot R_{n,l}. \quad (34)$$

Элемент объёма, зависящий только от радиуса, представляет собой сферическую оболочку, ограниченную двумя концентрическими

сферическими поверхностями радиусами r и $r + dr$. Этот объем dV_r равен $4\pi r^2 dr$, и радиальная вероятность обнаружения частицы в объеме dV_r получается равной

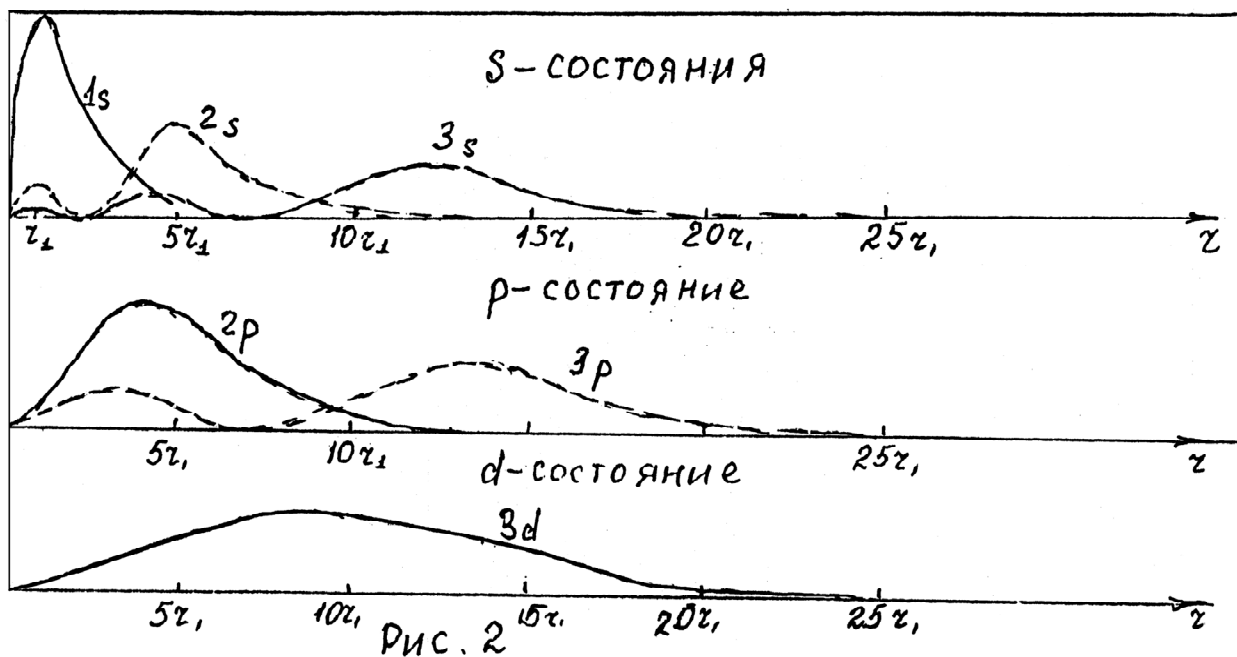
$$P_r = R_{n,l}^* \cdot R_{n,l} \cdot dV_r = 4\pi r^2 R_{n,l}^2 dr, \quad (35)$$

или

$$P_r = e^{-2nr} r^{2(l+1)} L_{n,l}^2(r) 4\pi dr.$$

Радиальная плотность заряда определяется произведением заряда электрона на эту вероятность.

На рис. 2 графически показано изменение радиальной вероятности P_r в зависимости от расстояния вдоль радиуса, выраженного в единицах r_1 ($r_1 = 0,53 \cdot 10^{-10}$ м - радиус Бора).



Для состояния $1s$ ($n=1, l=0$) уравнение (35) принимает вид:

$$P_r = R_{1,0}^* \cdot R_{1,0} \cdot dV_r = R_{1,0}^2 dV_r = e^{-2r} r^2 A_0^2 4\pi dr.$$

Отметим, что если $r=0$, то $P_r=0$; максимальная вероятное достигается, когда $r=r_1=0,53 \cdot 10^{-10}$ м, что соответствует радиусу орбиты для основного состояния, вычисленному по теории Бора. Когда $r \rightarrow 5r_1$, P_r становится очень малой величиной и стремится к нулю.

В состоянии $2s$ ($n=2, l=0$) радиальная вероятность равна

$$P_r = e^{-4r} r^2 (A_0 + A_1 r)^2 4\pi dr,$$

И $P_r = 0$ при $r = 0$. Теперь наблюдаются два максимума, один при $r = r_1$ и другой при $r = 5r_1$, причем второй больше, чем первый.

Радиальная вероятность для $3s$ - состояния ($n = 3, l = 0$) равна:

$$P_r = e^{-6r} r^2 (A_0 + A_1 r + A_2 r^2)^2 4\pi dr.$$

Здесь мы имеем три максимума - при $r = r_1, 4r_1, 12r_1$ причем последний максимум наибольший.

Электроны, находящиеся в $2p$ - состоянии, имеют максимальную радиальную вероятность вблизи $4r_1$, а электроны в $3p$ - состоянии имеют максимальную радиальную вероятность вблизи $2r_1$ и $12r_1$. Отметим, что в каждом случае можно выделить наибольший максимум. Вероятность обнаружения электронов на одном из этих расстояний вдоль радиуса здесь максимальная, и, таким образом, мы располагаем правилом размещения электронов в определенных оболочках вокруг ядра. Однако имеется определенная вероятность размещения электрона и на таких расстояниях, которые отличаются от предсказанных Бором.

В любом случае, вероятность обнаружения электрона при $r = 0$ равна нулю. Константы A_0, A_1, A_2, \dots можно определить из условия нормировки:

$$\frac{1}{4\pi} \int_{r=0}^{\infty} R_{n,l}^* \cdot R_{n,l} \cdot dV_r = \frac{1}{4\pi} \int_{r=0}^{\infty} R_{n,l}^2 \cdot dV_r = 1. \quad (36)$$

Плотность вероятности обнаружения электрона в некоторой точке пространства равна:

$$p = R_{n,l}^* R_{n,l} \Theta_{l,m_l}^* \Theta_{l,m_l} \Phi_{m_l}^* \Phi_{m_l}, \quad (37)$$

но, поскольку

$$\Phi_{m_l}^* \Phi_{m_l} = A^* e^{-im_l\varphi} A e^{im_l\varphi} = A^* A = const, \quad (38)$$

плотность вероятности в этом случае не зависит от φ . Плотность вероятности определяется произведением зависящей от радиуса плотности вероятности $p_r = R_{n,l}^2$ и плотности вероятности, зависящей от θ , $p_\theta = \Theta_{l,m_l}^* \Theta_{l,m_l}$. Поскольку Θ_{l,m_l} зависит от l и m_l , так же как и θ , значение p_θ различно для различных состояний, определяемых квантовыми числами l и m_l . В таблице 3 приведены некоторые нормированные функции Θ_{l,m_l} для различных сочетаний l и m_l .

Поскольку $\Theta_{l,m_l}^* \Theta_{l,m_l}$ не зависит от φ , то график зависимости $p_\theta = \Theta_{l,m_l}^* \Theta_{l,m_l}$ от θ в каждом случае обладает вращательной симметрией относительно оси z .

Таблица 3.

Состояние	l	m_l	Θ_{l,m_l}
s	0	0	$\Theta_{0,0} = 1/\sqrt{2}$
p	1	0	$\Theta_{1,0} = \sqrt{3/2} \cos \theta$
p	1	± 1	$\Theta_{1,\pm 1} = \sqrt{3/4} \sin \theta$
d	2	0	$\Theta_{2,0} = \sqrt{5/8}(3 \cos^2 \theta - 1)$
d	2	± 1	$\Theta_{2,\pm 1} = \sqrt{15/4} \sin \theta \cos \theta$
d	2	± 2	$\Theta_{2,\pm 2} = \sqrt{15/16} \sin^2 \theta$

Для s - состояния ($l=0$, $m_l=0$) существует только один энергетический уровень. Соответствующий полином Лежандра в таблице 3 равен: $\Theta_{0,0} = 1/\sqrt{2}$, и $p_\theta = \Theta_{0,0}^* \Theta_{0,0} = 1/2$. Если построить в полярных координатах график зависимости p_θ от угла θ , то мы получим сферу радиуса $1/2$, как показано на рис. 3а. Отрезок прямой, соединяющей начало координат с точкой на графике, имеет длину, равную $\Theta_{l,m_l}^* \Theta_{l,m_l}$ и представляет собой плотность вероятности обнаружения электрона в направлении этой прямой. Фигуры, изображенные на рис. 3, показывают распределение полной плотности вероятности, определяемой угловой плотностью вероятности (так как угловая вероятность p_θ воздействует на радиальную вероятность p_r , модулируя ее).

В p - состоянии, когда $m_l = 0$, полином Лежандра равен $\Theta_{1,0} = \sqrt{3/2} \cos \theta$ при зависящей от θ плотности вероятности, определяемой как $p_\theta = 3/2 \cdot \cos^2 \theta$.

На рис. 3б распределение плотности вероятности имеет вид двух лепестков с максимумом при $\theta = 0$ и минимумом при $\theta = \pm\pi/2$. Эти лепестки симметричны относительно оси z . Аналогично, если $m_l = \pm 1$, то расположение плотности вероятности $p_\theta = 3/4 \cdot \sin^2 \theta$ опять имеет вид двух лепестков (рис.3в), но развернутых на 90° относительно расположения, полученного при $m_l = 0$. Вероятность максимальна, когда $\theta = \pm\pi/2$, и равна нулю в вертикальном направлении, т.е. когда $\theta = 0$ или $\theta = \pi$.

Теория Бора не дает условий обнаружения электрона в положениях, указанных на рис. 2, 3. Тем не менее, для случаев $l=n-1$ отмечается определенное соответствие. В частности, из рис.2 следует, что наиболее вероятное положение электрона точно соответствует радиусу в атоме Бора.

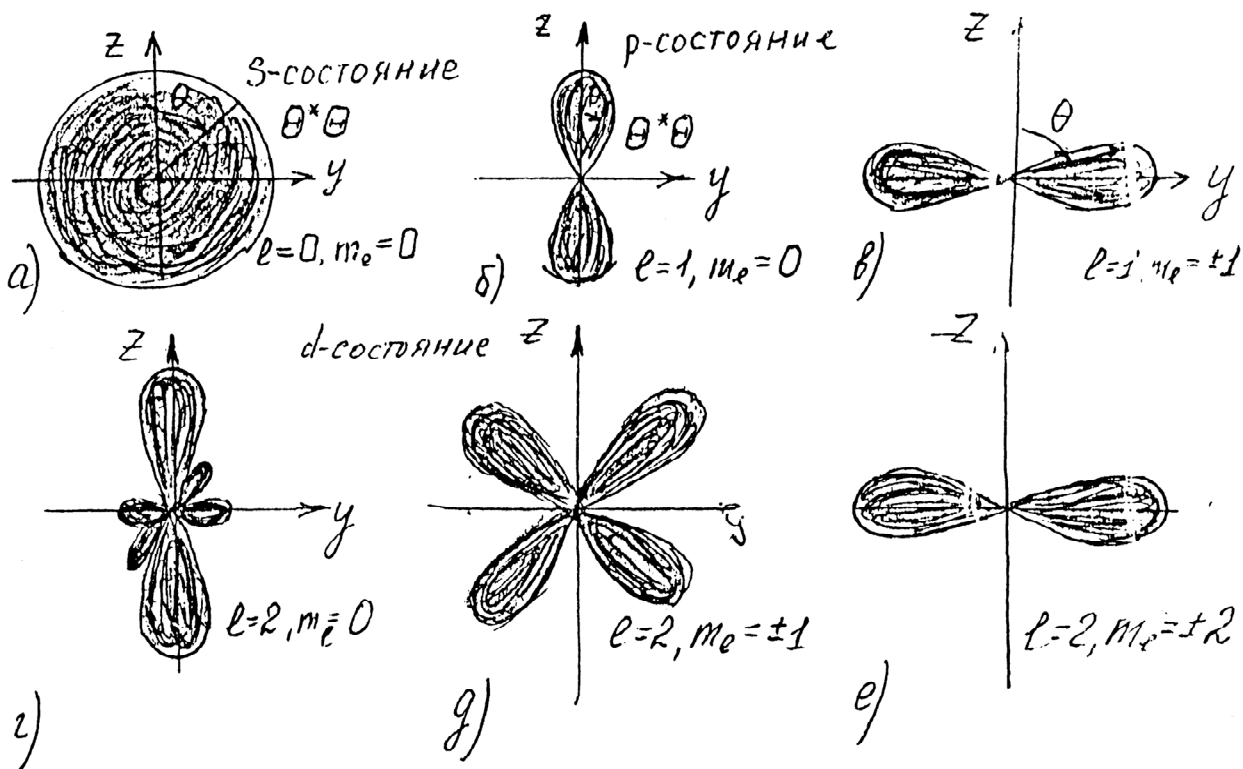


Рис 3

ПОРЯДОК ВЫПОЛНЕНИЯ РАБОТЫ.

Задание 1. Зарисовать взаимное расположение электрона, ядра и характер движения электрона в атоме водорода по теории Бора. Рассчитать радиус первой боровской орбиты на основании постулатов Бора, для чего решить систему уравнений:

$$m_e \cdot v \cdot r = \hbar, \quad (1)$$

$$\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} = \frac{m_e v^2}{r}. \quad (2)$$

Уравнение (1) выражает условие стационарных орбит по теории Бора, а уравнение (2) выражает 2-ой закон Ньютона для движения электрона в кулоновском поле ядра атома водорода (протона). Сделайте вывод о характере движения электрона в атоме.

Задание 2. Изучите, как описывается поведение электрона в атоме водорода согласно квантовой механике. Для этого запишите в рабочую тетрадь уравнение Шрёдингера для атома водорода и его решение.

Задание 3. Изучите, какие физические величины определяют квантовые числа n , l и m . Какие значения они могут иметь? Зарисуйте таблицу квантовых чисел в рабочую тетрадь.

Задание 4. Изучите и зарисуйте в тетрадь потенциальную кривую атома водорода и его энергетическую диаграмму. Наберите на клавиатуре квантовые числа nm (набирайте без запятой), соответствующие максимальной длине волны в серии Бальмера. Рассчитайте эту длину волны (формула (11)).

Задание 5. По энергетической диаграмме водорода определите, на каком уровне надо перевести электрон в атоме водорода, чтобы в спектре наблюдались только три спектральные линии. Наберите номер уровня на клавиатуре. Рассчитайте эти длины волн по серийной формуле (11).

Задание 6. Изучить радиальные и угловые распределения плотности вероятности нахождения электрона в атоме водорода:

а) s - состояние ($l=0$): 1) зарисовать угловую и радиальную функции распределения плотности вероятности; 2) записать положение максимумов плотности вероятности; 3) вычислить положение максимума для состояния $1s$,

используя приведенную формулу. Для этого решить уравнение $\frac{d(R^2 \cdot r^2)}{dr} = 0$.

б) p - состояние ($l=1$): 1) зарисовать функции распределения; 2) записать положения максимумов плотности вероятности; 3) задать возможные значения квантового числа для p - состояния (см. таблицу 2 для квантовых чисел) и зарисовать график углового распределения плотности вероятности (форму электронного облака) при возможных значениях этих квантовых чисел.

Примечание. Когда на экране дисплея появляется запись "L, M (да, нет)", отвечайте - "да" "Д", "d", если не все, возможные при данном l , m вводились. В противном случае "Нет", "н", "Н", "н", "Net", "N".

в) d - состояние ($l=2$). Выполнить то же, что и для p - состояния.

г) f - состояние ($l=3$). Выполнить то же, что и для p - состояния.

д) g - состояние ($l=4$). Выполнить то же, что и для p - состояния.

е) h - состояние ($l=5$). Выполнить то же, что и для p - состояния.