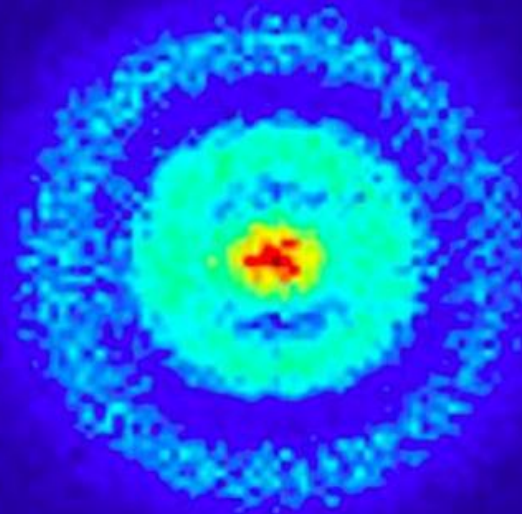




Атом водорода

This is a hydrogen atom.



This photograph shows the atom's electron orbital - the first time we have ever been able to observe the wave function of an atom. To capture this image scientists used a quantum microscope, a device capable of seeing into the quantum realm.

Вопросы

1. Атом Водорода. Модель Бора.
2. Уравнение Шрёдингера для электрона в атоме водорода.
3. Волновые функции электрона в атоме водорода.
4. Энергетические уровни и спектральные переходы в атоме водорода.

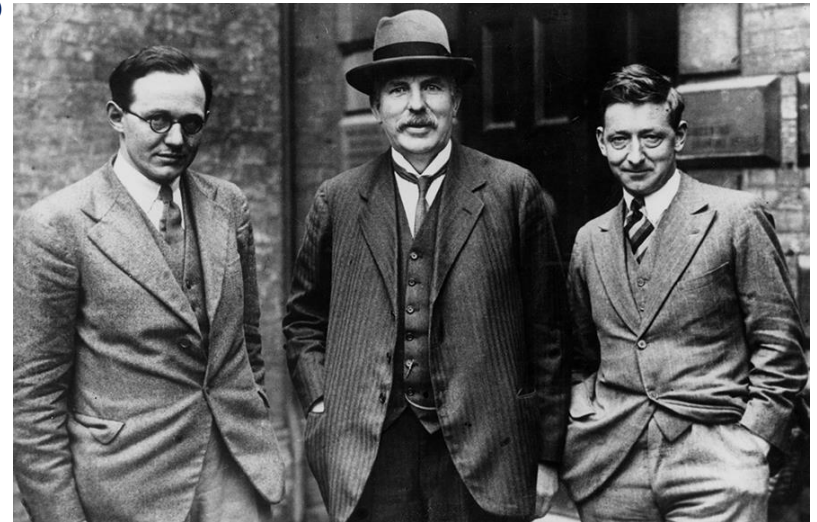
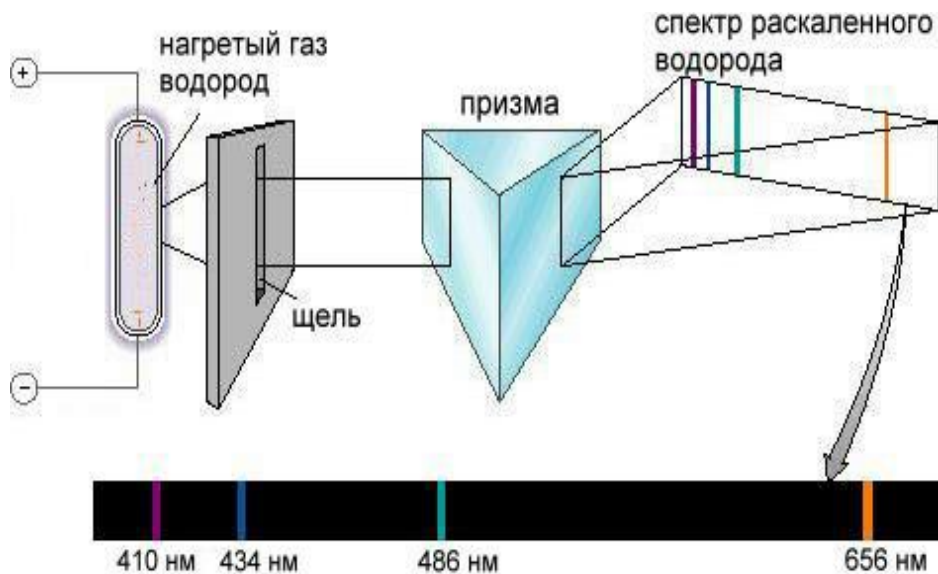
1. Атом водорода. Модель Бора

Атом водорода – простейшая атомная система, содержащая один электрон. Водород – самый распространенный химический элемент во Вселенной.

Модель атома Э. Резерфорда: Вокруг ядра по круговым орбитам движутся электроны – *планетарная модель атома*.

Модель Резерфорда не объясняла факты:

1. Атом устойчив.
2. Спектр излучения дискретный.



1908 год Нобелевская премия по химии

1. Атом водорода. Модель Бора

В основе модели Бора постулаты:

1. Существуют стационарные состояния атома. Им соответствуют орбиты, находясь на которых движущийся электрон не излучает энергию (ЭМ волны).

2. Правило квантования орбит:
в стационарном состоянии атома имеет квантованные значения момента импульса: $L = n\hbar$.

3. Правило частот: при переходе атома из одного стационарного состояния в другое испускается или поглощается квант энергии : $\hbar\nu = E_i - E_j$.



Нильс Бор
(1885-1962)

Нобелевская премия 1922 г

1. Атом водорода. Модель Бора

Недостатки теории Бора

1. Внутреннее противоречие: основывается на квантовых постулатах, но применяются законы классической физики.

2. Не объясняет:

- интенсивность спектральных линий,*
- причину совершения переходов.*

3. Не описывает спектры атома гелия – простейшего атома, следующего за атомом водорода.

2. Уравнение Шрёдингера для электрона в атоме водорода

Уравнение Шрёдингера позволяет получить для атома водорода результаты боровской теории **без привлечения постулатов и условия квантования.**

Квантование энергии и момента импульса возникают как естественные следствия, появляющееся при решении уравнения Шрёдингера, аналогичные причине квантования энергии для частицы в потенциальной яме.

Результаты решения уравнения Шрёдингера определяют возможные стационарные состояния электрона в атоме водорода, для которых пространственные составляющие волновых функции имеют **форму трехмерных стоячих волн.**

Никаких орбит! Электронные “облака”!

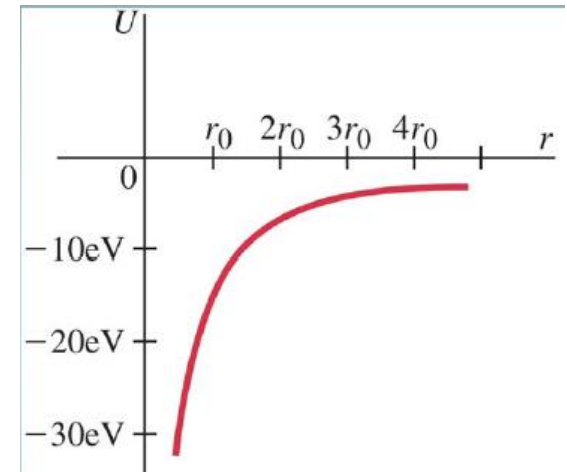
2. Уравнение Шрёдингера для электрона в атоме водорода

В электростатическом приближении
энергия взаимодействия электрона
с ядром (протон) равна:

$$U(r) = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r}$$

Стационарное уравнение Шрёдингера
для электрона в декартовых координатах,
связанных с протоном:

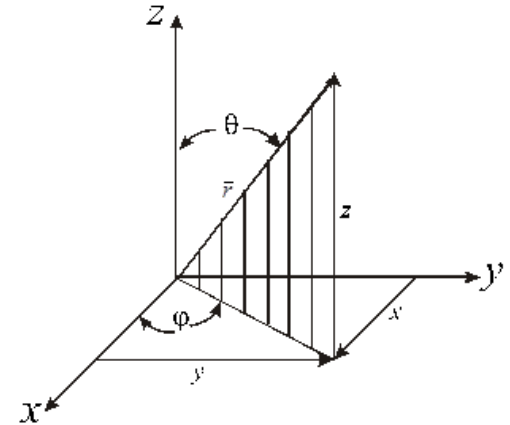
$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} \right) - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r} \psi = E\psi,$$



$$\hat{H}\psi = E\psi$$

2. Уравнение Шрёдингера для электрона в атоме водорода

Так как система обладает центральной симметрией, переходят к сферическим координатам, характеризуя положение электрона по отношению к ядру радиусом вектором $\vec{r}$, полярным углом θ и азимутальным углом ϕ .



$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) \Psi - \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) \Psi + U(r) \Psi = E \Psi$$

Решение уравнения представляется в виде произведения трех функций:

$$\psi(r, \theta, \phi) = R(r) \Theta(\theta) \Phi(\phi).$$

А само уравнение Шрёдингера разделяется на три независимых уравнения – для радиальной, полярной и азимутальной функций.

2. Уравнение Шрёдингера для электрона в атоме водорода

Вид функций и значения фундаментальных величин, характеризующих состояние электрона, **определяются четверкой квантовых чисел**: n, l, m_l, m_s .

Главное квантовое число n определяет значение энергии электрона:

$$E_n = -\frac{m}{2\hbar^2} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \frac{1}{n^2}, (n = 1, 2, 3, \dots)$$

Орбитальное квантовое число l определяет значение модуля орбитального момента импульса электрона:

$$L = \hbar \sqrt{l(l+1)}, (l = 0, 1, 2, 3, \dots, n-1)$$

Магнитное орбитальное квантовое число m_l определяет значение проекции орбитального момента импульса электрона:

$$L_z = m_l \hbar, (m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l)$$

Магнитное спиновое квантовое число m_s определяет значение проекции собственного момента импульса (спина) электрона:

$$L_{sz} = m_s \hbar, (m_s = \pm \frac{1}{2})$$

2. Уравнение Шрёдингера для электрона в атоме водорода

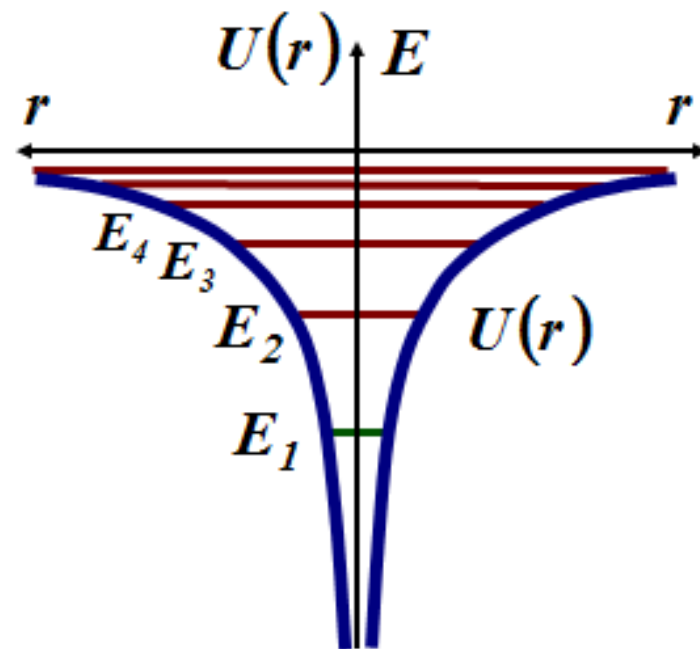
Так как энергия состояния в атоме водорода зависит только от значения главного квантового числа n , то любой энергетический уровень имеет **$2n^2$ кратное вырождение**.

Одной и той же энергии состояния при этом соответствует **$2n^2$**

возможных **волновых функций**

с разными течениями l, m_l, m_s

(следовательно, и с разными значениями L, L_z, L_{sz}).



3. Волновые функции электрона в атоме водорода

Решениями уравнения Шрёдингера для атома водорода являются волновые функции, имеющие форму трехмерных стоячих волн («электронные облака»).

Геометрическая форма электронного облака определяется двумя квантовыми числами – n и l .

Пространственная ориентация облака зависит от m_l .

Т.к. n и l определяют энергию и орбитальный момент электрона, то применяется специальное обозначение для состояний с различными n и l .

Первым стоит значение n , далее – латинская буква (s для $l=0$, p для $l=1$, d для $l=2$

3. Волновые функции электрона в атоме водорода

$n = 1: 1s ;$

$n = 2: 2s, 2p ;$

$n = 3: 3s, 3p, 3d ;$

$n = 4: 4s, 4p, 4d, 4f ;$ и т.д.

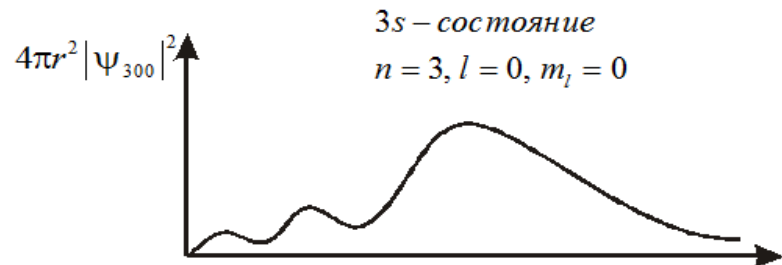
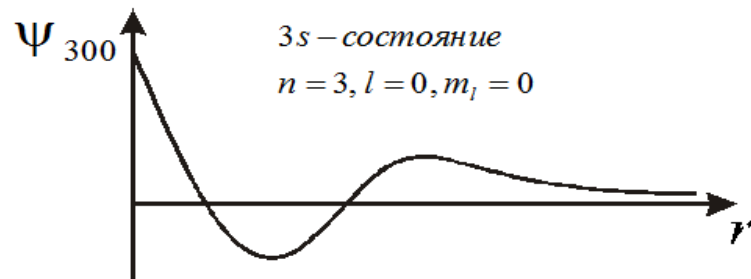
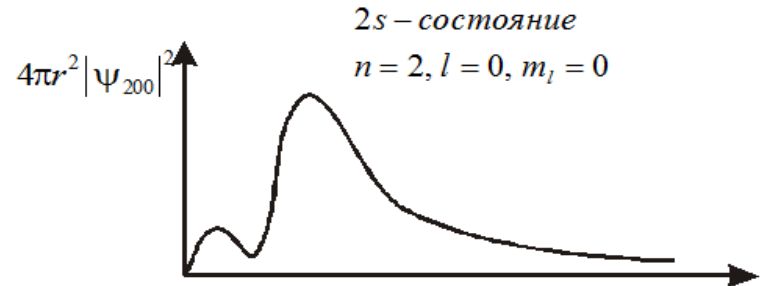
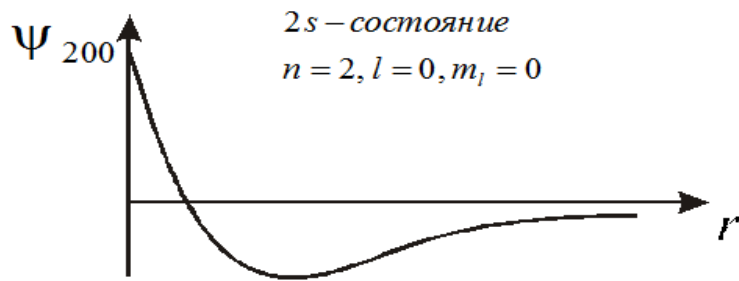
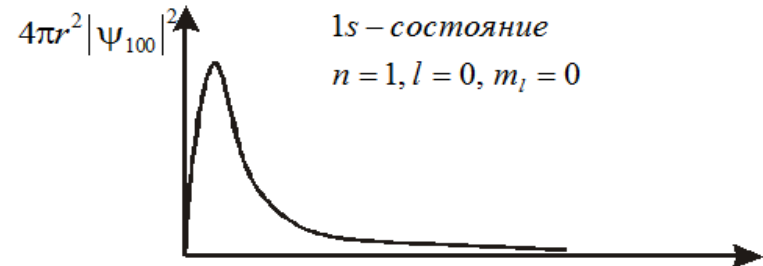
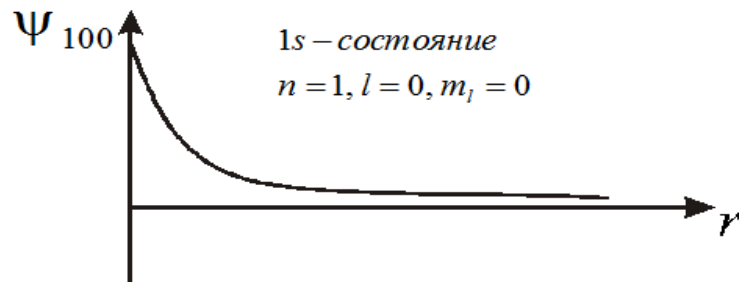
3. Волновые функции электрона в атоме водорода

Наборы квантовых чисел и волновые функции электрона

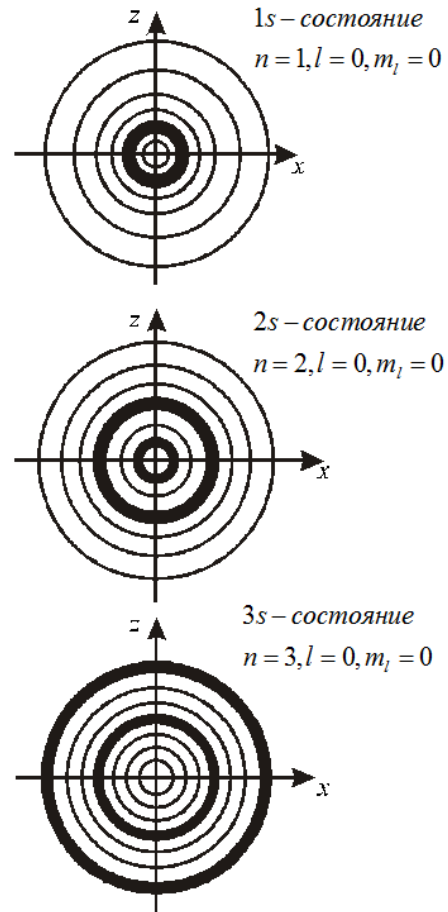
<i>Уровень энергии</i>	<i>Волновая функция</i>	<i>Квантовые числа</i>		
E_n	$\psi_{n,l,m}$	n	l	m
E_1	$\psi_{1,0,0}$	1	0	0
E_2	$\psi_{2,0,0}$	2	0	0
	$\psi_{2,1,-1}$	2	1	-1
	$\psi_{2,1,0}$	2	1	0
	$\psi_{2,1,1}$	2	1	1
E_3	$\psi_{3,0,0}$	3	0	0
	$\psi_{3,1,-1}$	3	1	-1
	$\psi_{3,1,0}$	3	1	0
	$\psi_{3,1,1}$	3	1	1
	$\psi_{3,2,-2}$	3	2	-2
	$\psi_{3,2,-1}$	3	2	-1
	$\psi_{3,2,0}$	3	2	0
	$\psi_{3,2,1}$	3	2	1
	$\psi_{3,2,2}$	3	2	2

3. Волновые функции электрона в атоме водорода

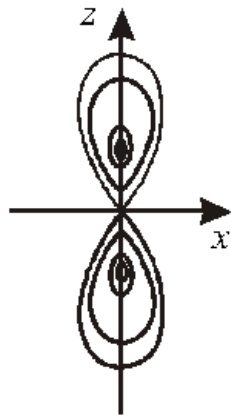
Наиболее простые волновые функции s состояний ($l=0$)



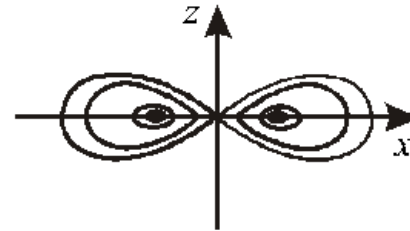
3. Волновые функции электрона в атоме водорода



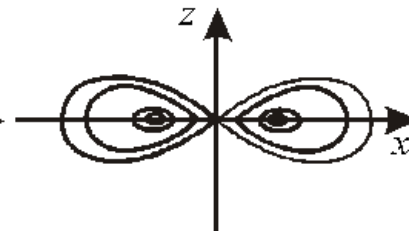
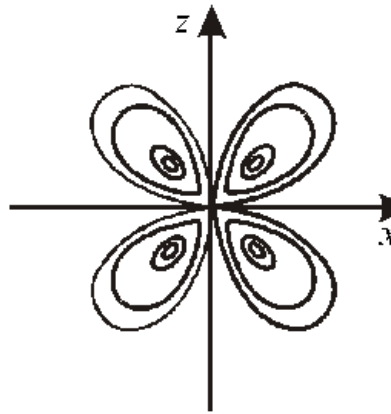
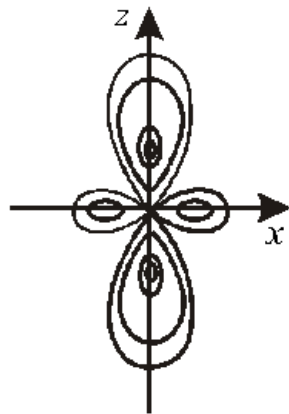
3. Волновые функции электрона в атоме водорода



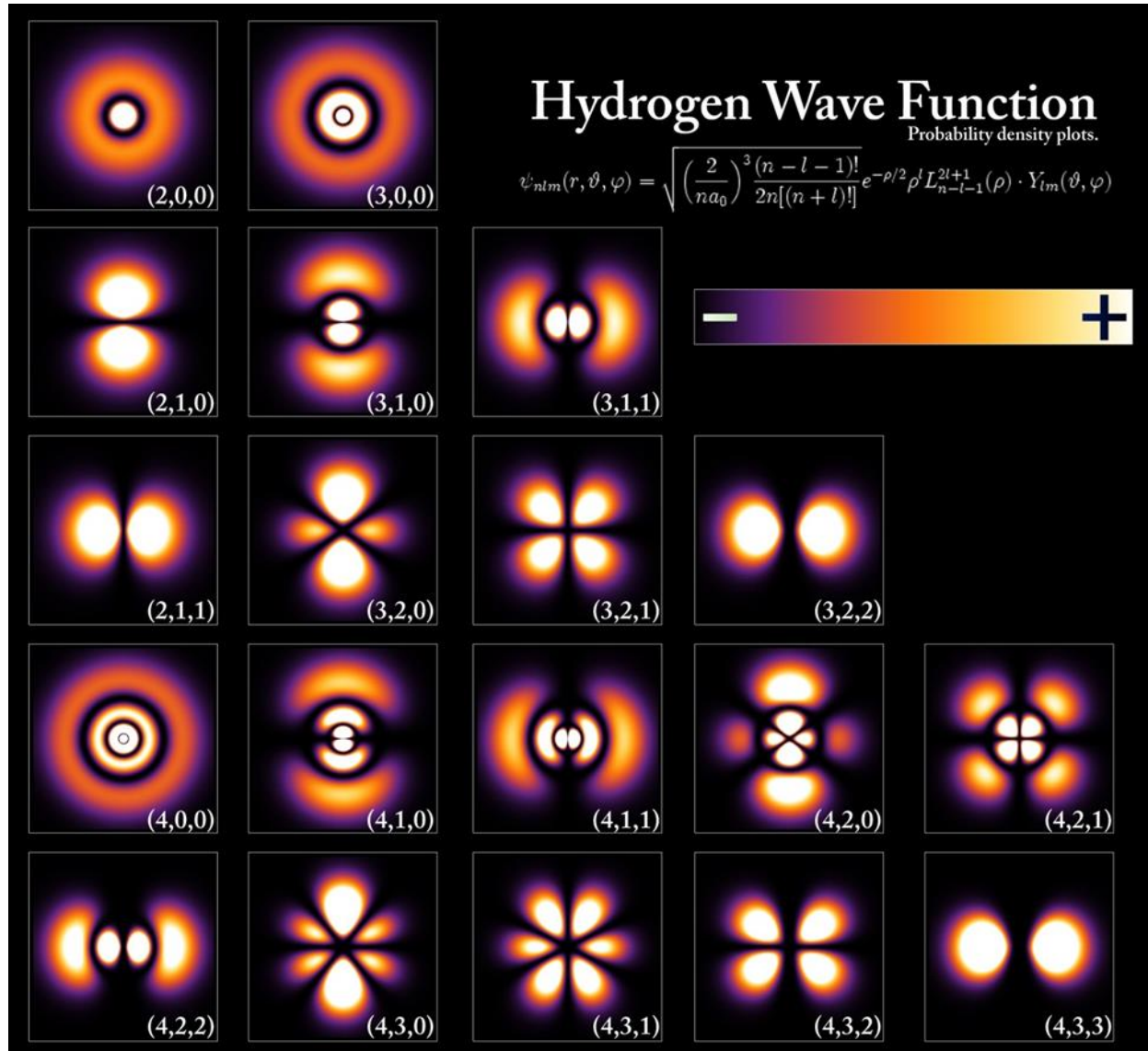
$2p$ -состояния
 $n=2, l=1$



$3d$ -состояния
 $n=3, l=2$

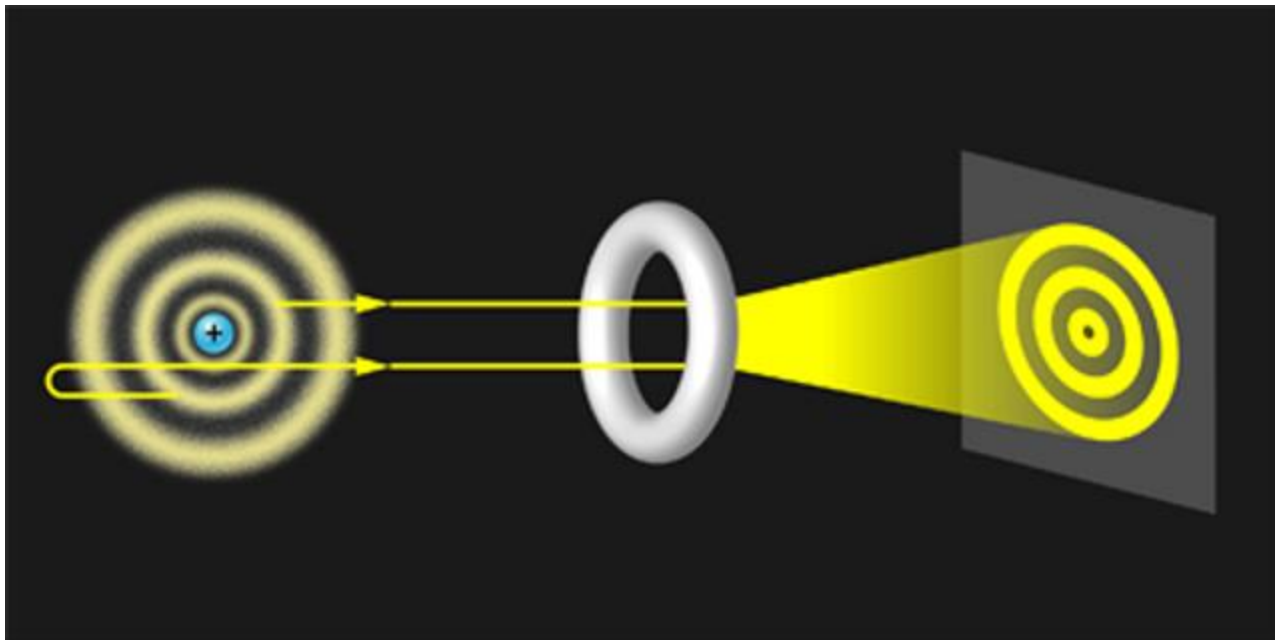


3. Волновые функции электрона в атоме водорода



3. Волновые функции электрона в атоме водорода

Объединенная группа ученых из Германии, Греции, Нидерландов, США и Франции получила своеобразные снимки атома водорода. На этих изображениях, полученных при помощи фотоионизационного микроскопа, видно распределение «электронной плотности», которое совпадает с результатами теоретических расчетов.



3. Волновые функции электрона в атоме водорода

Фотоионизационный метод

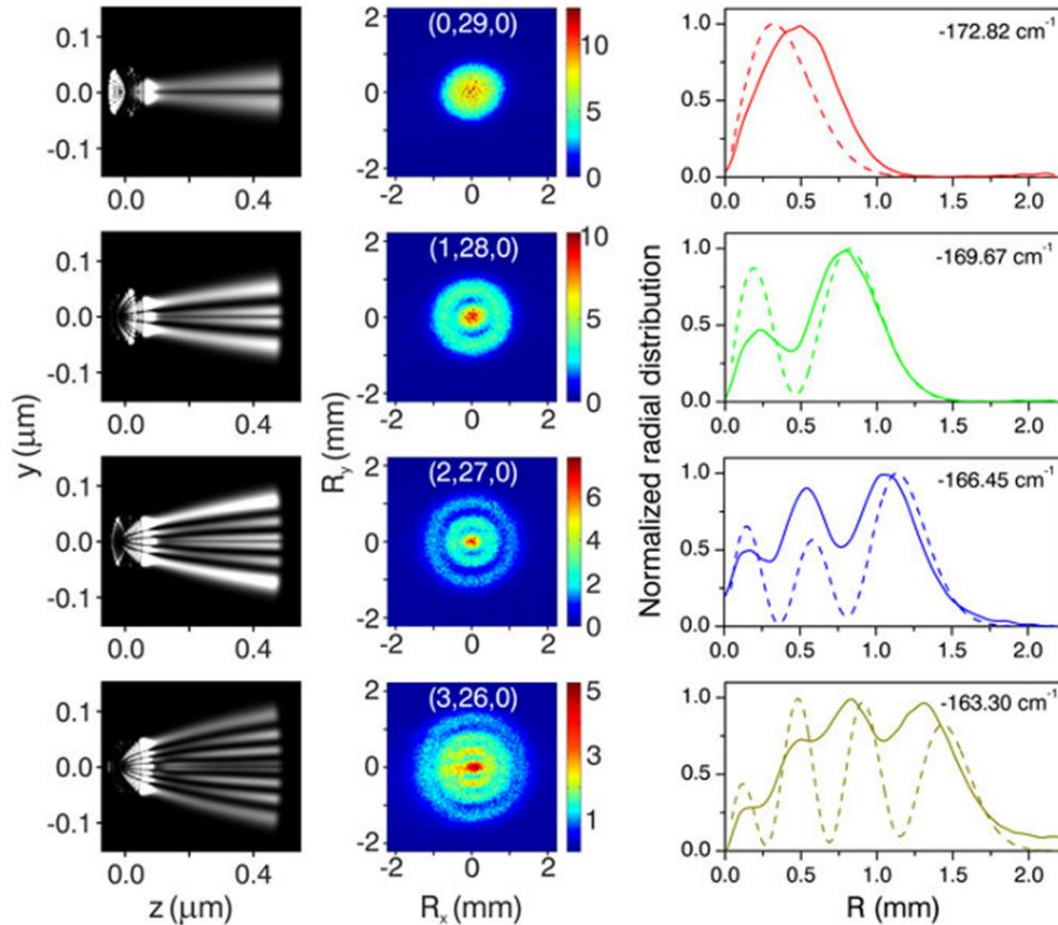
Суть метода заключается в последовательной ионизации атомов водорода за счет ЭМ облучения.

Выбитые фотонами электроны направляются на чувствительную матрицу через положительно заряженное кольцо.

Положение электрона в момент столкновения с матрицей отражает положение электрона в момент ионизации атома.

Заряженное кольцо, отклоняющее электроны в сторону, играет роль линзы и с его помощью изображение увеличивается в миллионы раз.

3. Волновые функции электрона в атоме водорода



A. S. Stodolna, A. Rouzée, F. Lépine, S. Cohen, F. Robicheaux, A. Gijbbersen, J. H. Jungmann, C. Bordas, and M. J. J. Vrakking, "Hydrogen Atoms under Magnification: Direct Observation of the Nodal Structure of Stark States," *Phys. Rev. Lett.* 110, 213001 (2013).

4. Энергетические уровни и спектральные переходы в атоме водорода

Спектром электромагнитного излучения называется совокупность электромагнитных волн разной частоты (длины волны), излучаемых или поглощаемых атомами (молекулами) данного вещества в процессе перехода из одних энергетических состояний в другие. В первом случае называют **спектром излучения вещества**, во втором – **спектром поглощения вещества**.

Для видимого диапазона спектр и спектральные цвета можно **визуально регистрировать на экране** после прохождения светового пучка через призму или другую преломляющую систему, осуществляющую пространственное перераспределение компонент светового потока, характеризующихся разными значениями длин волн.

Различают линейчатый, полосатый и сплошной спектры.

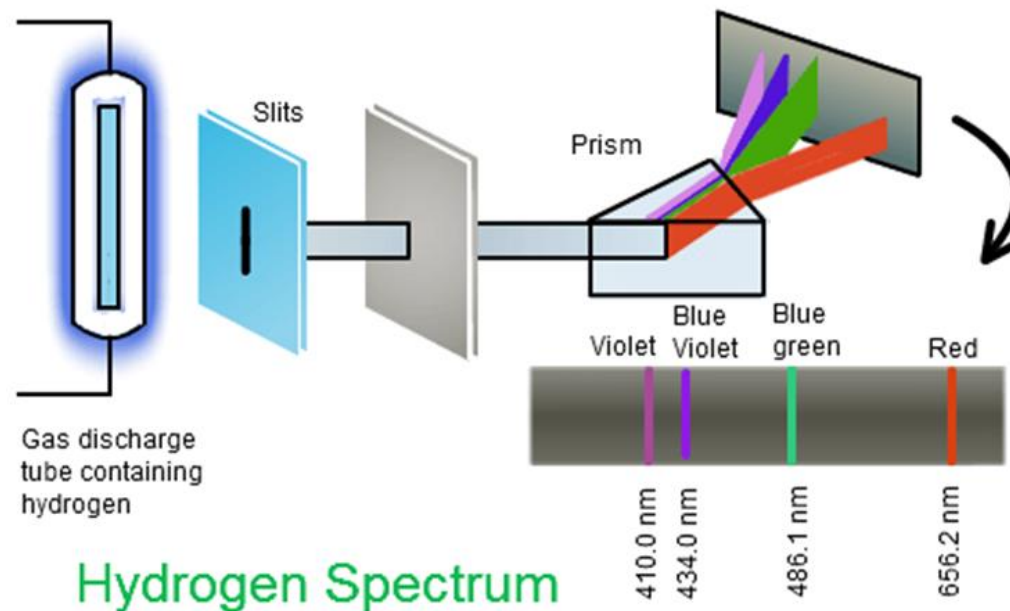
Линейчатый спектр характерен для излучения атомарных газов.

Полосатый спектр характерен для излучения молекулярных газов.

Сплошной спектр характерен для нагретых твердых тел.

4. Энергетические уровни и спектральные переходы в атоме водорода

Регистрация видимого диапазона спектра излучения атомарного водорода



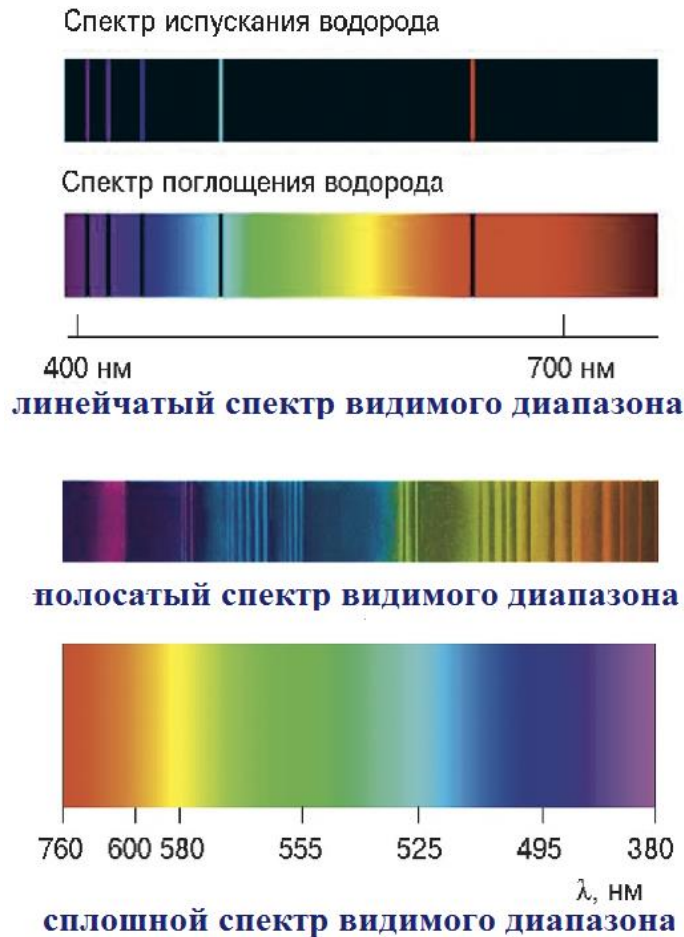
На экране наблюдаются отдельные линии, цвет которых определяется длиной волны излучения водорода, находящегося в газоразрядной трубке.

4. Энергетические уровни и спектральные переходы в атоме водорода



4. Энергетические уровни и спектральные переходы в атоме водорода

Визуализация видимого спектра на экране после прохождения светового пучка через призму



4. Энергетические уровни и спектральные переходы в атоме водорода

Все спектральные серии подчиняются известному правилу, которое первоначально было получено эмпирическим путем. В соответствии с этим правилом, частоты излучения для различных линий спектральных серий могут быть найдены по формуле Бальмера

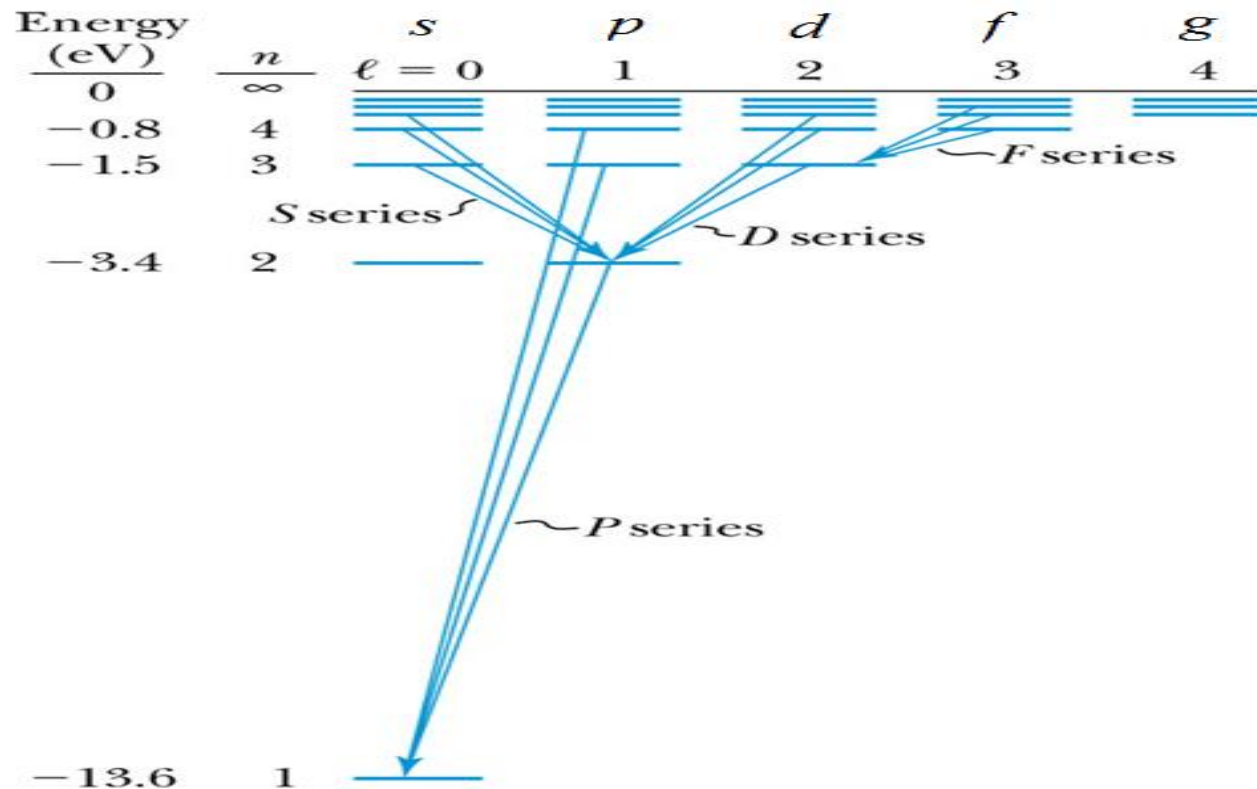
$$\omega = R \cdot \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right)$$

где $R = 2,07 \cdot 10^{16} \text{ c}^{-1}$ — постоянная Ридберга: n_1, n_2 — целые числа. Частоты излучения одной и той же серии получаются при фиксированном значении n_1 и разных значениях n_2 . Например, для серии Лаймана $n_1 = 1$, для серии Бальмера $n_1 = 2$ и т.д. Расчеты показывают, что только серия Бальмера попадает в видимую часть оптического диапазона. Самая большая длина волны этой серии $\lambda_1 = 6593 \text{ Å}$ расположена в красной области видимого спектра. Далее идут $\lambda_2 = 4861 \text{ Å}$ и $\lambda_3 = 4340 \text{ Å}$, принадлежащие синей и фиолетовой областям, а вот $\lambda_4 = 4102 \text{ Å}$ попадает на границу видимой и ультрафиолетовой областей.

4. Энергетические уровни и спектральные переходы в атоме водорода

Правило отбора для спектральных переходов

$$\Delta l = \pm 1$$



4. Энергетические уровни и спектральные переходы в атоме водорода

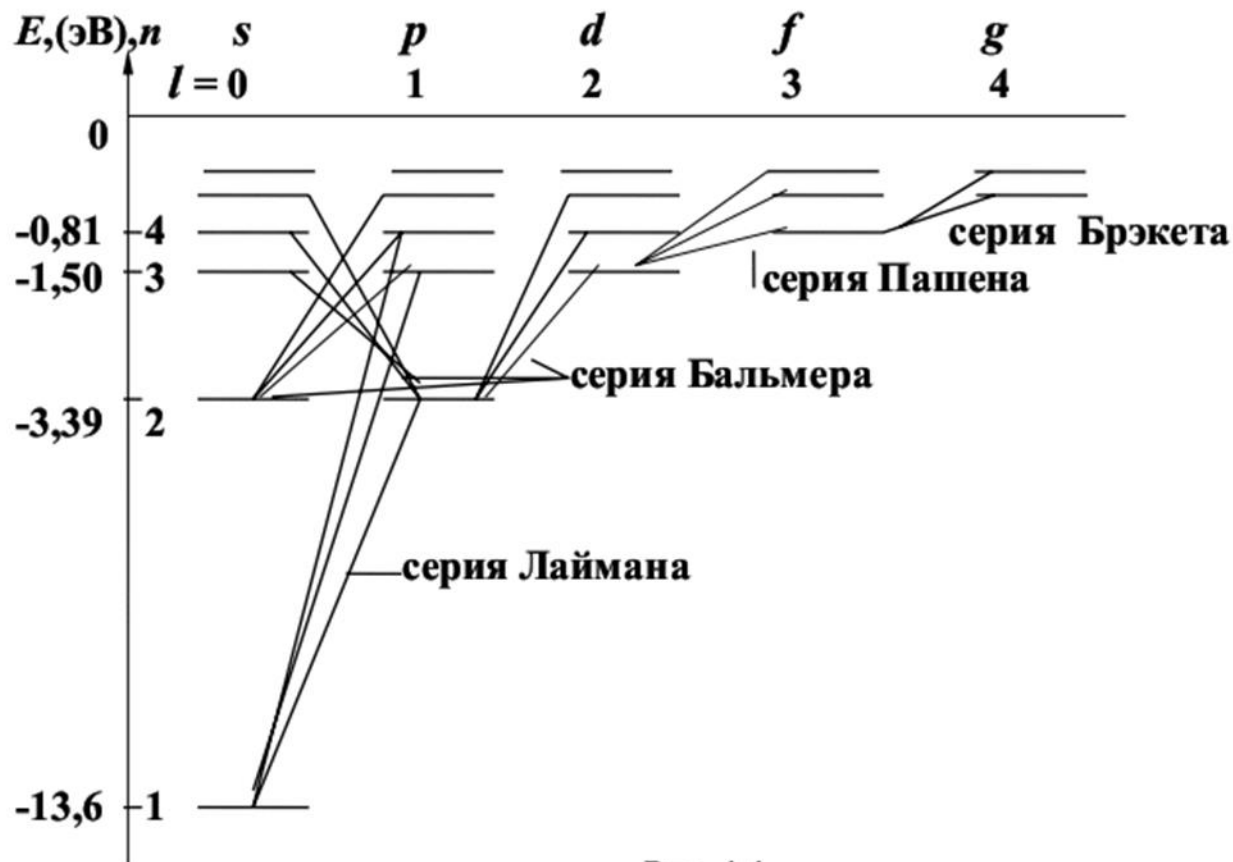


Рис. 4.4

4. Спектральные переходы в атоме водорода

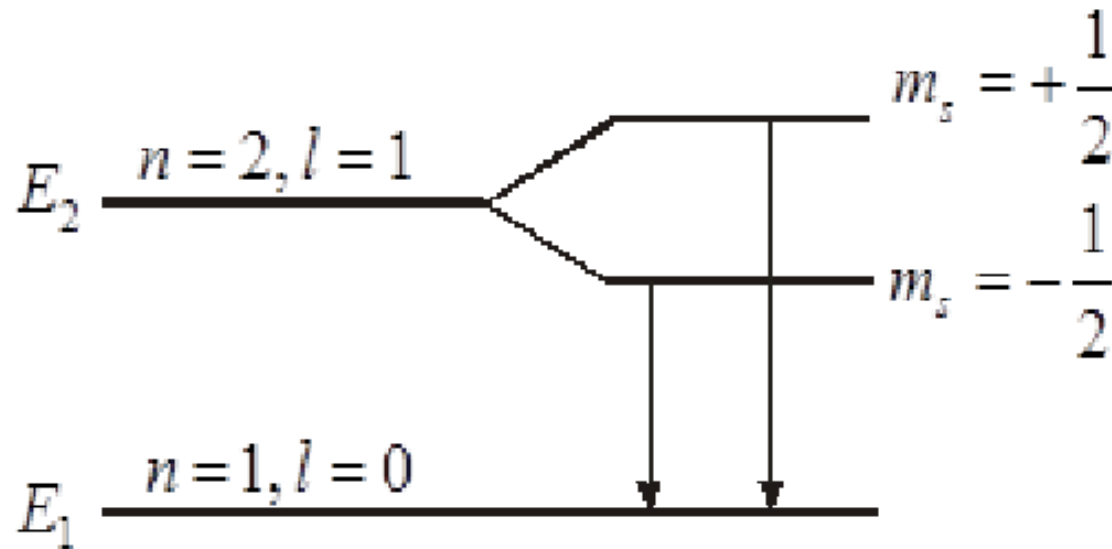
Формула Бальмера очень просто получается из квантово-механической модели атома водорода.

$$\omega = \frac{me^4}{32\pi^2\epsilon_0^2\hbar^3} \cdot \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right)$$

Полученное выражение дает значения частот, с большой точностью совпадающие с результатами эмпирической формулы Бальмера. Таким образом, квантово-механическая модель очень надежно предсказывает все спектральные серии атома водорода. Однако возможности модели этим не ограничиваются. Она позволяет объяснить еще целый ряд явлений, связанных с электронными состояниями и переходами между ними.

4. Энергетические уровни и спектральные переходы в атоме водорода

Спин-орбитальное расщепление уровней



Спасибо за внимание!