
ЛЕКЦИЯ 6

ВОДОРОДОПОДОБНЫЙ АТОМ

1. Жесткий ротатор

Двухатомная молекула является **ротатором**. Движение ротатора квантуется. Решим задачу квантового ротатора. Изобразим его на рисунке (6.1).

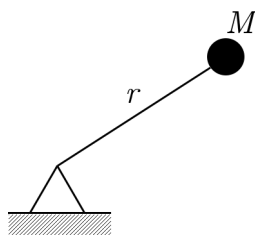


Рис. 6.1

Груз массой M , поставленный на невесомую спицу длиной r , может вращаться, описывая траектории по поверхности сферы.

Энергия груза в классике равна

$$E = \frac{L^2}{2I} = \frac{L^2}{2Mr^2}.$$

Оператор этой энергии имеет вид

$$\hat{E} = \frac{\hat{L}^2}{2Mr^2}.$$

Запишем уравнение Шредингера:

$$\hat{E} = \frac{\hat{L}^2}{2Mr^2}\psi = E\psi.$$

Не известен оператор \hat{L}^2 , но известен оператор импульса:

$$\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}.$$

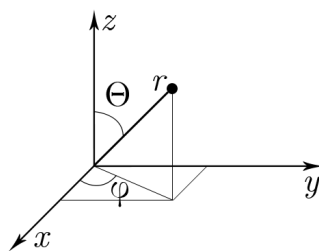


Рис. 6.2

Рассматриваются сферические координаты. Они показаны на рисунке (6.2).

Можно перейти от декартовых координат к сферическим.

В сферических координатах имеем:

$$\hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi}.$$

2. Оператор проекции момента импульса на ось z

Найдем собственные значения оператора момента импульса:

$$\begin{aligned} \hat{L}_z \psi &= L_z \psi, \\ \Rightarrow -i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial \phi} &= L_z \psi, \\ \Rightarrow \frac{d\psi}{\psi} &= -\frac{L_z}{i\hbar} d\phi. \end{aligned}$$

Собственная волновая функция равна

$$\Rightarrow \psi = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left\{i \left(\frac{L_z}{\hbar} \phi\right)\right\}.$$

Так как квадрат модуля волновой функции — это функция распределения вероятностей, можно записать **необходимые условия для волновой функции**. Функция должна быть **непрерывной, конечной, гладкой и однозначной**. В данном случае все условия выполняются, кроме однозначности.

Запишем необходимое условие на однозначность:

$$\frac{L_z}{\hbar} \cdot 2\pi = m \cdot \pi \Rightarrow L_z = m\hbar,$$

где $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \pm l$.

m принимает $(2l + 1)$ значения, и $m_{\max} = l$

Поймем это графически. Для этого нарисуем картину (6.3).

Ось z обозначается исходя из задачи.

Сделаем два замечания.

Первое — как видно из рисунка, проекция момента импульса всегда меньше самого значения.

Второе — если проекция момента импульса на ось z определена, то проекции на другие оси не определены. Если бы они нашлись, то это было бы нарушением **соотношения неопределенностей**.

! Конспект не проходил проф. редактуру, создан студентами и, возможно, содержит смысловые ошибки. Следите за обновлениями на lectoriy.mipt.ru.

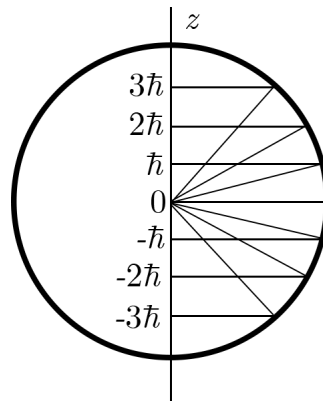


Рис. 6.3

3. Энергия ротатора

Найдем правило квантования квадрата момента импульса:

$$\overline{L^2} = \overline{L_x^2} + \overline{L_y^2} + \overline{L_z^2} = 3\overline{L_z^2} \Rightarrow \hat{L}^2 = 3\hat{L}_z^2 \Rightarrow \hat{L}_z^2 = \hbar^2 \frac{l^2 + (l-1)^2 + \dots + (-l)^2}{2l+1}.$$

Вспомним формулу для суммы ряда:

$$\sum_1^l n^2 = \frac{l(l+1)(2l+1)}{6},$$

$$\Rightarrow \hat{L}_z^2 = \frac{\hbar^2}{3} l(l+1),$$

$$E_l = \frac{\hat{L}^2}{2Mr^2} = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2Mr^2} = \frac{\hbar^2}{2I} l(l+1).$$

Задача 5.11. Переход между тремя последовательными уровнями энергии в двухатомной молекуле

В опытах с равными молекулами измерялись энергии перехода между тремя последовательными уровнями энергии вращательной полосы двухатомной молекулы. Найти квантовые числа l этих уровней и момент инерции I молекулы в этих случаях.

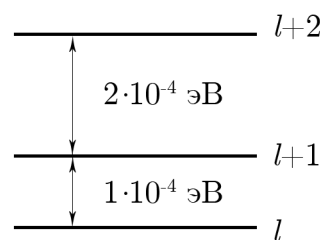


Рис. 6.4

Решение.

! Для подготовки к экзаменам пользуйтесь учебной литературой. Об обнаруженных неточностях и замечаниях просьба писать на pulsar@phystech.edu

!

Конспект не проходил проф. редактуру, создан студентами и, возможно, содержит смысловые ошибки.
Следите за обновлениями на lectoriy.mipt.ru.

4

$$\begin{aligned}\epsilon_{l+1} - \epsilon_l &= 1 \cdot 10^{-4}, \\ \epsilon_{l+2} - \epsilon_{l+1} &= 2 \cdot 10^{-4}, \\ \Rightarrow \frac{\epsilon_{l+2} - \epsilon_{l+1}}{\epsilon_{l+1} - \epsilon_l} &= 2 = \frac{(l+2)(l+3) - (l+1)(l+2)}{(l+1)(l+2) - (l)(l+1)} = \frac{l+2}{l+1} = 2, \\ &\Rightarrow l = 0, \\ \Delta\epsilon = 10^{-4} \text{ эВ} = \epsilon_1 - \epsilon_0 &= \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2I} = \frac{\hbar^2}{I}, \\ \Rightarrow I &= 7 \cdot 10^{-39} \text{ э} \cdot \text{см}^2.\end{aligned}$$

!

Для подготовки к экзаменам пользуйтесь учебной литературой.
Об обнаруженных неточностях и замечаниях просьба писать на
pulsar@phystech.edu

! Конспект не проходил проф. редактуру, создан студентами и, возможно, содержит смысловые ошибки. Следите за обновлениями на lectoriy.mipt.ru.

Задача 5.13. Переход между ротационными уровнями молекул хлора

Какова максимальная длина волны СВЧ-излучения, с помощью которой можно вызвать переход между ротационными уровнями молекул хлора? Расстояние между ядрами атомов в молекуле Cl_2 равно $a = 2 \cdot 10^{-8}$ см. Относительная атомная масса изотопа хлора $A = 35$.

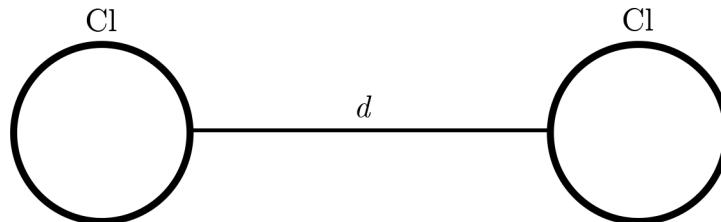


Рис. 6.5

Решение.

$$\epsilon_l = \frac{\hbar^2}{2I} l(l+1).$$

Нарисуем энергетические уровни. Это проделано на рисунке (6.6).

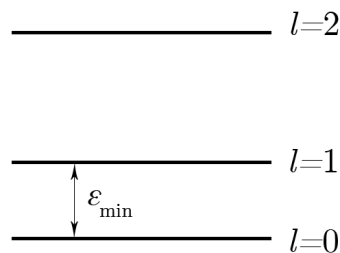


Рис. 6.6

$$\lambda_{\max} = \frac{hc}{\epsilon_{\min}}, \quad \epsilon_{\min} = \frac{\hbar^2}{I}.$$

Момент инерции равен

$$I = \mu d^2,$$

где μ — это приведенная масса.

$$I = \frac{M}{2} d^2,$$

$$\lambda_{\max} = \frac{2\pi\hbar c M d^2}{2\hbar^2} = \frac{\pi c M d^2}{\hbar},$$

где $M = 35 \cdot 1,6 \cdot 10^{-24}$ г.

$$\lambda_{\max} = 2,1 \text{ см.}$$

! Для подготовки к экзаменам пользуйтесь учебной литературой. Об обнаруженных неточностях и замечаниях просьба писать на pulsar@phystech.edu



Конспект не проходил проф. редактуру, создан студентами и, возможно, содержит смысловые ошибки. Следите за обновлениями на lectoriy.mipt.ru.

4. Водородоподобный атом

Потенциал в водородоподобном атоме нарисован на рисунке (6.7).

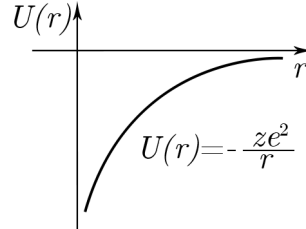


Рис. 6.7

Z (или z) — число протонов в ядре.

Запишем уравнение Шредингера в сферических координатах (r, θ, ϕ) :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[\Delta_r \psi + \frac{1}{r^2} \Delta_{\theta, \phi} \psi \right] - \frac{Ze^2}{r} \psi = E \psi.$$

Для угловой части можно записать:

$$\Delta_{\theta, \phi} \psi = -l(l+1) \psi.$$

Это было получено из

$$\hat{L}^2 \psi = L^2 \psi \hbar^2 l(l+1) \psi.$$

Тогда уравнение Шредингера записывается так:

$$-\frac{\hbar^2}{2mr^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{\hbar^2}{2mr^2} l(l+1) - \frac{Ze^2}{r} \psi = E \psi.$$

Решение будет иметь вид

$$\psi_{n,l}(r, \theta, \phi) = A e^{-\kappa_n r} \cdot r^l \left(\sum_{i=0}^{n-l-1} a_{l+1+i} r^i \right) Y_{\theta, \phi}.$$

Для орбитального квантового числа l можно записать:

$$l = 0, 1, 2, \dots, n-1.$$

Для κ_n можно записать:

$$\kappa_n = \frac{m^2 Z^2 e^4}{\hbar^4 n^2},$$

где n — главное квантовое число.

$$n = 1, 2, 3, \dots$$

$$E_n = -\frac{mZ^2 e^4}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2}.$$



Для подготовки к экзаменам пользуйтесь учебной литературой. Об обнаруженных неточностях и замечаниях просьба писать на pulsar@phystech.edu

! Конспект не проходил проф. редактуру, создан студентами и, возможно, содержит смысловые ошибки. Следите за обновлениями на lectoriy.mipt.ru.

Соответствующие радиусы будут равны:

$$r_n = \frac{m\hbar^2}{mZe^2}n^2.$$

Запишем некоторые константы.

Комптоновская длина волны электрона равна

$$\lambda = \frac{\hbar}{mc}.$$

Постоянная тонкой структуры (безразмерная величина) равна

$$\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} = \frac{1}{137}.$$

Тогда для энергии дискретных уровней и соответствующих радиусов можно записать (это проделано для атома водорода):

$$\epsilon_n = -\frac{mc^2}{2}\alpha^2 \frac{1}{n^2},$$

$$r_n = \frac{\hbar^2}{me^2} = \frac{\lambda e}{\alpha}.$$

5. Электроны в атоме водорода

Рассмотрим вид волновой функции в атоме водорода.

Волновая функция основного состояния атома водорода имеет вид:

$$\psi_1 = \frac{1}{\sqrt{\pi r_1^3}} e^{-\frac{r}{r_1}}.$$

Первая волновая функция представлена на рисунке (6.8).

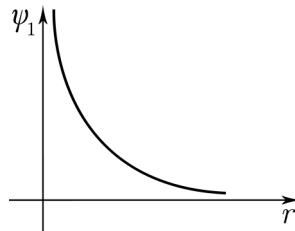


Рис. 6.8

А вероятность обнаружения электрона (квадрат модуля волновой функции) представлена на рисунке (6.9).

Как видно из рисунка, наиболее вероятное расстояние есть **боровский радиус** — первый разрешенный радиус в атоме водорода. Но это не означает, что электрон все время находится на расстоянии боровского радиуса; он даже может войти в ядро. Момент

! Для подготовки к экзаменам пользуйтесь учебной литературой. Об обнаруженных неточностях и замечаниях просьба писать на pulsar@phystech.edu



Конспект не проходил проф. редактуру, создан студентами и, возможно, содержит смысловые ошибки. Следите за обновлениями на lectoriy.mipt.ru.

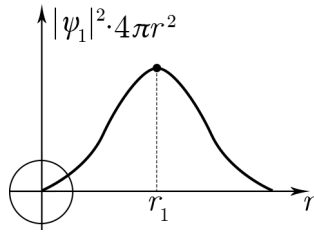


Рис. 6.9

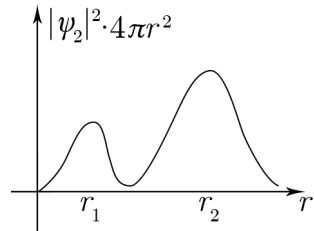


Рис. 6.10

импульса электрона в основном состоянии равен нулю. Это означает, что электрон равномерно размазан по ядру в основном состоянии.

Квадрат модуля второй волновой функции представлен на рисунке (6.10).

Задача 4.7. Среднее расстояние электрона от ядра

Найти среднее расстояние $\langle r \rangle$ электрона от ядра в $1S$ -состоянии водородоподобного атома.

Решение.

$$\psi_1 = \frac{1}{\sqrt{\pi r_1^3}} e^{-\frac{r}{r_1}},$$

$$\langle r \rangle = \int_0^{\infty} \psi^* r \psi 4\pi r^2 dr = \frac{1}{(\sqrt{\pi r_1^3})^2} \int_0^{\infty} e^{-\frac{2r}{r_1}} r^3 dr = \frac{3}{2} r_1.$$

6. Состояние электрона

Появились два квантовых числа.

Нарисуем таблицу соответствия спектроскопических обозначений к орбитальному квантовому числу:

| | | | | | |
|---|----------|----------|----------|----------|----------|
| | <i>S</i> | <i>P</i> | <i>D</i> | <i>F</i> | <i>G</i> |
| 1 | 0 | 1 | 2 | 3 | 4 |

Нарисуем таблицу этих квантовых чисел и других свойств состояний



Для подготовки к экзаменам пользуйтесь учебной литературой. Об обнаруженных неточностях и замечаниях просьба писать на pulsar@phystech.edu

! Конспект не проходил проф. редактуру, создан студентами и, возможно, содержит смысловые ошибки.
Следите за обновлениями на lectoriy.mipt.ru.

| n | l | m_l | Состояние | Кратность вырождения | Всего состояний |
|-----|-----|-------------------|-----------|----------------------|-----------------|
| 1 | 0 | 0 | 1S | 1 | 1 |
| 2 | 0 | 0 | 2S | 1 | 4 |
| | 1 | 0, ± 1 | 2P | 3 | |
| 3 | 0 | 0 | 3S | 1 | 9 |
| | 1 | 0, ± 1 | 3P | 3 | |
| | 2 | 0, $\pm 1, \pm 2$ | 3D | 5 | |

Как видно из таблицы, кратность вырождения равна n^2 . То есть в этих состояниях (на этих уровнях) энергия одинакова. На самом деле, кратность вырождения равна $2n^2$. При последних рассуждениях не был учтен спин.

! Для подготовки к экзаменам пользуйтесь учебной литературой.
Об обнаруженных неточностях и замечаниях просьба писать на pulsar@phystech.edu



Конспект не проходил проф. редактуру, создан студентами и, возможно, содержит смысловые ошибки. Следите за обновлениями на lectoriy.mipt.ru.

Задача. Удаление наружных электронов лития

Полная энергия ионизации (работа по удалению всех трех электронов из нормального состояния на бесконечность) атома лития ${}^6_3\text{Li}$ составляет $E_{\text{иониз}} = 203,4$ эВ. Найти энергию ионизации нейтрального атома лития по превращению его в ион ${}^6_3\text{Li}^{2+}$. Энергия ионизации атома водорода равна $E_{\text{иониз}}(H) = 13,59$ эВ.

Решение.

Требуется найти работу по удалению двух наружных электронов из нормального состояния в бесконечность. ${}^6_3\text{Li}^{2+}$ — это водородоподобный атом, потому что он имеет только один электрон.

Если ионизируем Li^{++} окончательно, то энергия, затрачиваемая на это, будет равна

$$E_{\text{иониз}}(\text{Li}^{++}) = 13,59 \cdot Z^2 = 13,59 \cdot 3^2 = 122,3 \text{ эВ.}$$

Следовательно, искомая работа по удалению двух наружных электронов будет равна

$$A = 203,4 - 122,3 = 81,1 \text{ эВ.}$$

7. Переходы

Исследуем переходы в атоме водорода.

Нарисуем эти переходы. Они представлены на рисунке (6.11).



Рис. 6.11

Высоковозбужденные состояния не нарисованы. Существуют **серия Лаймана**, **серия Бальмера**, **серия Пашена**.

Запишем **формулу Бальмера**

$$\frac{1}{\lambda_{2m}} = \frac{A}{hc} \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{m^2} \right).$$

Задача. Спектры первого порядка на дифракционной решётке

В спектрах некоторых звезд наблюдаются до сорока линий водородной серии Бальмера. При каком наименьшем числе штрихов дифракционной решетки можно разрешить эти линии спектра первого порядка?

Решение.

$$\epsilon_n = -\frac{me^4}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2},$$



Для подготовки к экзаменам пользуйтесь учебной литературой. Об обнаруженных неточностях и замечаниях просьба писать на pulsar@phystech.edu

11 ! Конспект не проходил проф. редактуру, создан студентами и, возможно, содержит смысловые ошибки. Следите за обновлениями на lectoriy.mipt.ru.

где $\frac{me^4}{2\hbar^2} = R_y = 13,6 \text{ эВ}$.

$$d\epsilon_n = d\left(-\frac{R_y}{n^2}\right) = \frac{2R_y}{n^3}\Delta n = \hbar\Delta\omega,$$

при $n \gg 1$.

Энергия ионизации с $n = 2$ (работа, затрачиваемая при перемещении электрона с уровня $n = 2$ до бесконечности) равна

$$\hbar\omega = R_y \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{\infty^2}\right) = \frac{R_y}{4},$$

$$\frac{\Delta\omega}{\omega} = \frac{\frac{2R_y}{n^3}}{\frac{R_y}{4}} = \frac{8}{n^3} = \frac{\Delta\lambda}{\lambda}.$$

Разрешающая способность дифракционной решетки равна

$$R = \frac{\lambda}{\Delta\lambda} = \frac{n^3}{8} = \frac{40^3}{8} = 8000 = m \cdot N = 8000.$$

Задача 4.45. Электронный переход

В атоме гелия один из электронов замещен мюоном. Оценить энергию электронного ($3P-2S$)-перехода в таком атоме.

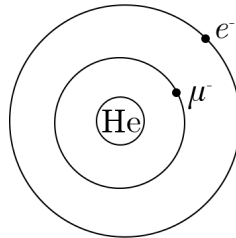


Рис. 6.12

Решение.

Мюон (μ^-) — это аналог электрона, который в 206 раз тяжелее электрона. Такой атом называется мезоатомом.

Посчитаем радиус мюона

$$r_\mu = \frac{\hbar^2}{Zm_\mu e^2} = 10^{-11} \text{ см},$$

так как $m_\mu = 206m_e$.

$$\frac{1}{\lambda_{32}} = R_\infty \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{3^2}\right) = \frac{5}{36}R_\infty,$$

$$R_\infty = \frac{R_y}{hc} = \frac{m_e e^4}{4\pi\hbar^3 c} = 109737,3 \text{ см}^{-1},$$

! Для подготовки к экзаменам пользуйтесь учебной литературой. Об обнаруженных неточностях и замечаниях просьба писать на pulsar@phystech.edu

! Конспект не проходил проф. редактуру, создан студентами и, возможно, содержит смысловые ошибки.
Следите за обновлениями на lectoriy.mipt.ru.

12

$$R_H = \frac{\mu e^4}{4\pi\hbar^3 c} = 109677,6 \text{ см}^{-1},$$

где $\mu = \frac{m_e m_p}{m_e + m_p}$ — это приведенная масса.

$$\Rightarrow \epsilon_{3 \rightarrow 2} = 1,89 \text{ эВ.}$$

! Для подготовки к экзаменам пользуйтесь учебной литературой.
Об обнаруженных неточностях и замечаниях просьба писать на
pulsar@phystech.edu