Государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего профессионального образования Московской области
«Международный университет природы, общества и человека «Дубна»
(Университет «Дубна»)
Факультет естественных и инженерных наук
Кафедра Ядерной физики

Специальный семинар по физике ядра и ядерным реакциям

В.В.Самарин

Атом и центральное поле

Вопросы 5, 6, 7.

2016

Вопрос 5. Атом водорода.

- Движение в центральном поле.
- Атом водорода: волновые функции и уровни энергии

Движение в центральном поле

Решение уравнения Шредингера

$$\Delta\psi + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E + k\frac{e^2}{r}\right)\psi = 0.$$

$$\Delta\psi + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E - U(r)\right)\psi = 0$$

$$\psi_{nlm}(r,\theta,\varphi) = R_{nl}(r)\,Y_{lm}(\theta,\varphi).$$

Здесь r,θ,φ – сферические координаты, l – орбитальное квантовое число $m = m_l$ – магнитное орбитальное квантовое число,

$$m = m_l = 0, \pm 1, \ldots \pm l.$$

Функции $Y_{lm}(\theta,\varphi)$ называются сферическими гармониками (или сферическими функциями), в случае $m = m_l = 0$ они выражаются через так называемые многочлены (полиномы) Лежандра

$$Y_{l0}(\theta) = C_l P_l(\cos\theta).$$

Радиальные части $R_{nl}(r)$ находятся путем решения радиального уравнения Шредингера.

Собственные значения операторов квадрата и проекции момента импульса, квадрата орбитального момента и проекции орбитального момента

$$\hat{M}^2 Y_{lm} = \hbar^2 \hat{L}^2 Y_{lm} = \hbar^2 l(l+1) Y_{lm};\ \hat{M}_z Y_{lm} = \hbar \hat{L}_z = \hbar m_l Y_{lm}$$

Атом водорода: уровни энергии и спектр излучения

$$E_n = -\frac{hcR_H}{n^2} \text{ или } E_n \approx -\frac{13.6}{n^2} \text{ эВ.}$$

Решение уравнения Шредингера

$$\Delta\psi + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E + k\frac{e^2}{r}\right)\psi = 0. \qquad (5.13)$$

дает для состояний электрона в атоме водорода те же энергии (5.3), (5.6), что и модель Бора,

Формула Бальмера для длин волн в видимой и ближней ультрафиолетовой части спектра

$$\frac{1}{\lambda} = R_H\left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2}\right), \; n_2 = n_1 + 1, n_1 + 2, \ldots \; , n_1 = 2$$

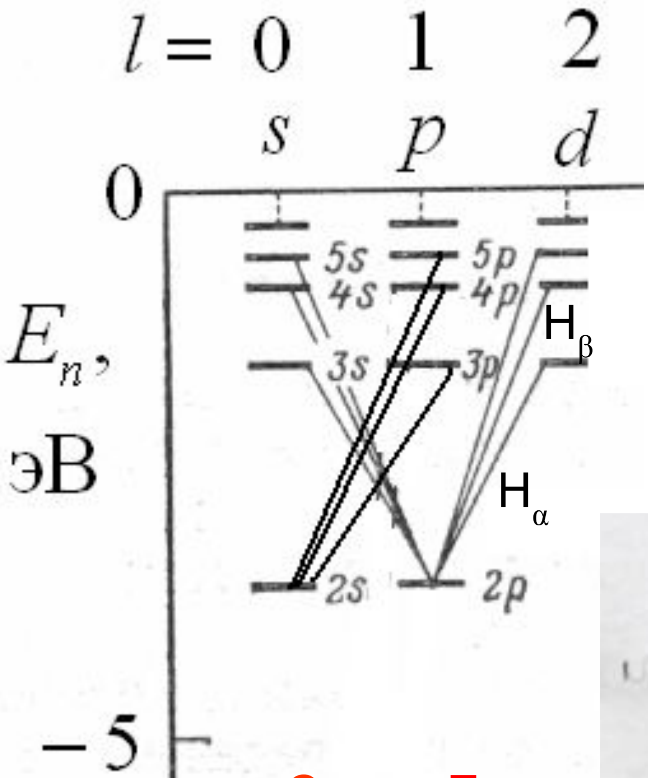
постоянная Ридберга

$$R_H = \frac{\mu e^4}{8ch^3\varepsilon_0^2}$$

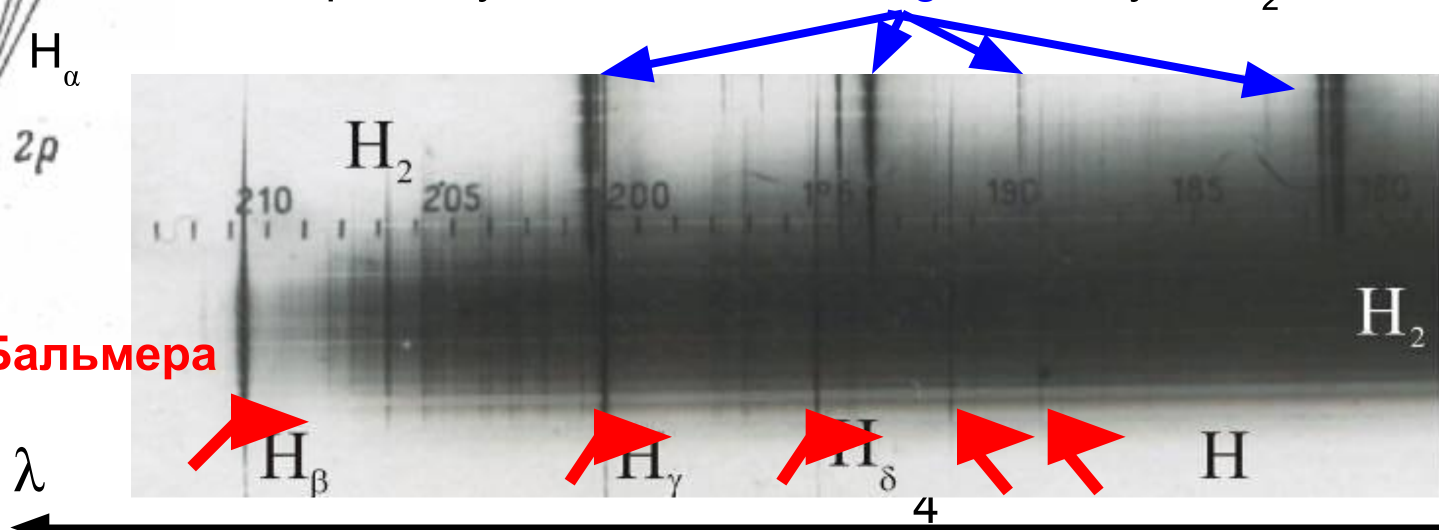
приведенная масса электрона и протона

$$\mu = \frac{m_e m_p}{m_e + m_p} = \frac{m_e}{1 + m_e/m_p} \approx m_e$$

Спектры излучения атомов H, Hg и молекулы H_2



Серия Бальмера



Атом водорода: спектральные серии, уровни энергии и волновые функции

$$E(n) = -\frac{1}{n^2}\frac{e^2}{2a_Б};\ a_Б = \frac{\hbar^2}{me^2}, n = 1, 2, ...$$

или $E_n \approx -\frac{13.6}{n^2}$ эВ.

n – главное квантовое число

Правила отбора при испускании и поглощении света

$$\Delta l = \pm 1$$

Решение уравнения Шредингера

$$\Delta\psi + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E + k\frac{e^2}{r}\right)\psi = 0. \qquad (5.13)$$

дает для состояний электрона в атоме водорода те же энергии (5.3), (5.6), что и модель Бора, и волновые функции $\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi)$, называемые атомными орбиталями (АО)

$$\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi). \qquad (5.14)$$

Здесь r, θ, φ – сферические координаты, $m = m_l$ – магнитное орбитальное квантовое число, l – орбитальное квантовое число $\quad l = 0, 1, 2, ...\ n-1$

$$m = m_l = 0, \pm 1, \ldots \pm l. \qquad (5.15)$$

Функции $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ называются сферическими гармониками (или сферическими функциями), в случае $m = m_l = 0$ они выражаются через так называемые многочлены (полиномы) Лежандра

$$Y_{l0}(\theta) = C_l P_l(\cos\theta). \qquad (5.16)$$

Радиальные части $R_{nl}(r)$ находятся путем решения радиального уравнения Шредингера. Для атома водорода они имеют следующие свойства:

$$R_{nl}(r) = C_n r^{n-1} \exp\left(-\frac{r}{na_0}\right),\ l = n-1, \qquad (5.17)$$

$$R_{nl}(r) \to C_{nl} r^{n-1} \exp\left(-\frac{r}{na_0}\right),\ r \to \infty, 0 \le l \le n-1. \qquad (5.18)$$

У состояний с максимальным $l = n - 1$, которым соответствуют круговые боровские орбиты, радиальная плотность вероятности обнаружения электрона на расстоянии r от ядра

$$p(r) = r^2 R_{nl}^2(r), \qquad (5.19)$$

максимальна на расстоянии от ядра

$$r_n = a_0 n^2, \qquad (5.20)$$

равном радиусу соответствующей орбиты (5.5).

Сферические гармоники и полиномы Лежандра: пример расчета в Maple

Функции $Y_{lm}(\theta,\varphi)$ называются сферическими гармониками (или сферическими функциями), в случае $m = m_l = 0$ они выражаются через так называемые многочлены (полиномы) Лежандра

$$Y_{l0}(\theta) = C_l P_l(\cos\theta). \qquad (5.16)$$

В программе Maple есть возможность получать явный вид полиномов Лежандра и строить угловые диаграммы для плотности вероятности $|Y_{l0}(\theta)|^2$ (см. рис. П6.2).

```
> with(orthopoly);P(2,x);
```

$$[G, H, L, P, T, U]$$

$$\frac{3}{2}x^2 - \frac{1}{2}$$

```
> plot([P(2,cos(t)),t,t=0..2*Pi],coords=polar,scaling=CONSTRAINED);
```

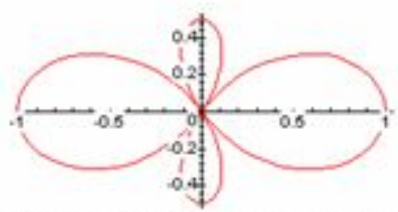
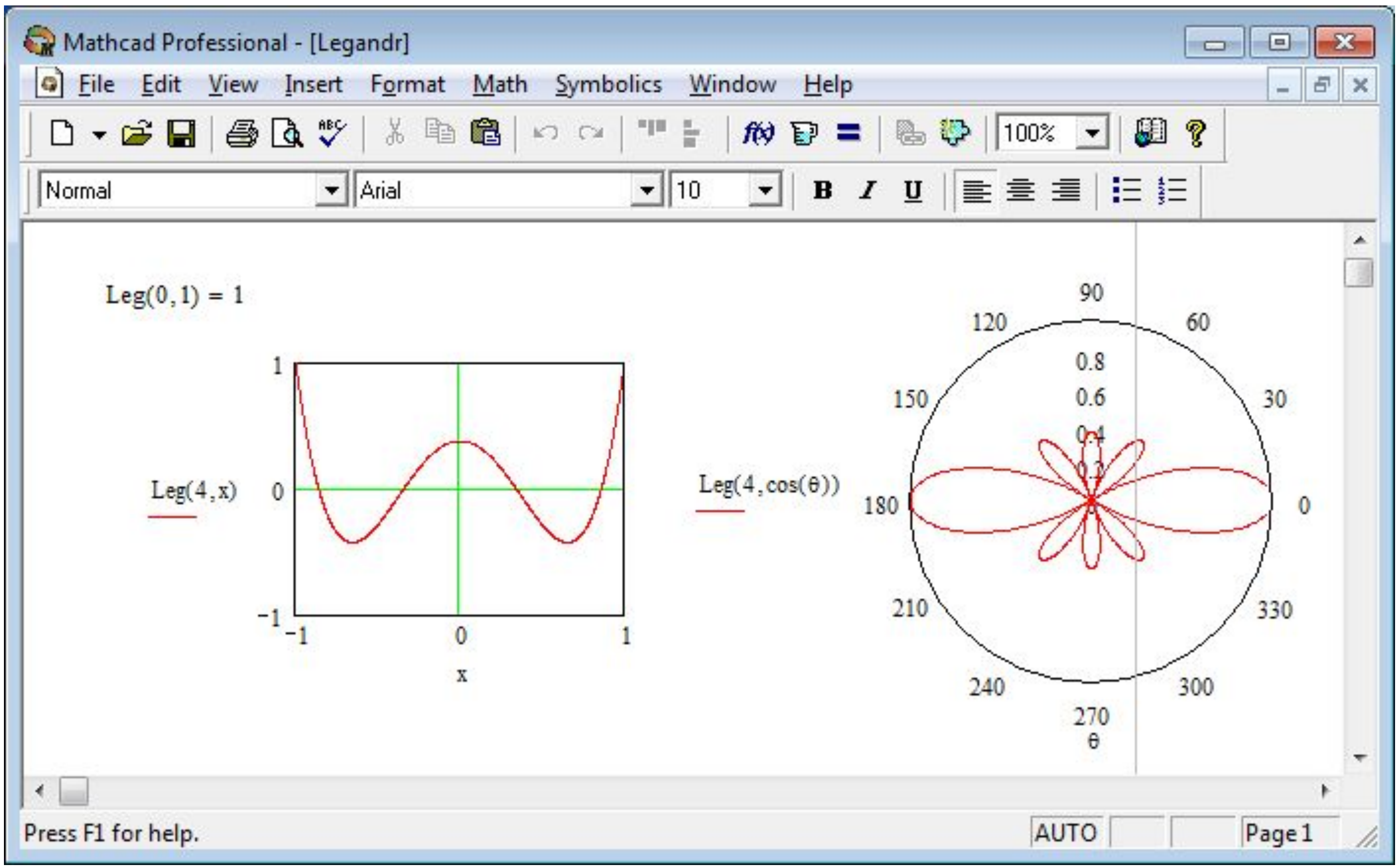


Рис. П6.2. Построение угловой диаграммы для плотности вероятности $|Y_{20}(\theta)|^2$ с помощью программы Maple

Сферические гармоники и полиномы Лежандра: пример расчета в MathCAD

Функции $Y_{lm}(\Theta, \varphi)$ называются сферическими гармониками (или сферическими функциями), в случае $m = m_l = 0$ они выражаются через так называемые многочлены (полиномы) Лежандра

$$Y_{l0}(\Theta) = C_l P_l(\cos\Theta). \qquad (5.16)$$



Атом водорода: радиальные волновые функции

$$\psi_{nlm}(r,\theta,\varphi) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta,\varphi) \qquad R = \rho^l e^{-\rho/2} w(\rho) \qquad \rho = \frac{2r}{n}$$

$$w = F(-n + l + 1,\ 2l + 2,\ \rho)$$

вырожденная гипергеометрическая функция

$$F(\alpha,\gamma,z) = 1 + \frac{\alpha}{\gamma}\frac{z}{1!} + \frac{\alpha(\alpha+1)}{\gamma(\gamma+1)}\frac{z^2}{2!} + \dots,$$

$$P1(k,\alpha) := \prod_{m=0}^{k-1}(m+\alpha) \qquad Fg(\alpha,\gamma,z) := 1 + \sum_{k=1}^{-\alpha}\left(\frac{P1(k,\alpha)}{P1(k,\gamma)}\right)\cdot\frac{z^k}{k!}$$

$$F1(\alpha,\gamma,z) := 1 + \alpha\cdot\frac{z}{\gamma\cdot 1} \qquad F2(\alpha,\gamma,z) := 1 + \alpha\cdot\frac{z}{\gamma\cdot 1} + \frac{\alpha\cdot(\alpha+1)\cdot z^2}{\gamma\cdot(\gamma+1)\cdot 2!}$$

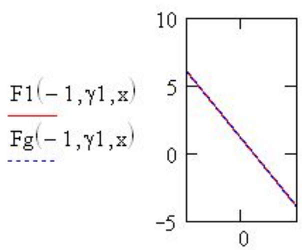
$$R(n,L,r) := \left(\frac{r\cdot 2}{n}\right)^L\cdot\exp\left(\frac{-r}{n}\right)\cdot Fg\left[(-n+L+1),(2\cdot L+2),\frac{r\cdot 2}{n}\right]$$

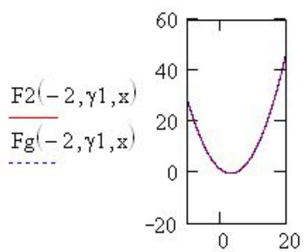
$$P1(k,\alpha) := \prod_{m=0}^{k-1}(m+\alpha) \qquad \alpha 1 := -2 \qquad \gamma 1 := 2$$

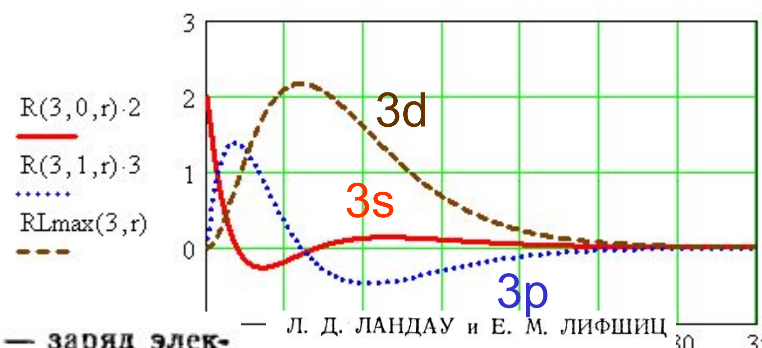
$$RLmax(n,r) := \left(\frac{r\cdot 2}{n}\right)^{n-1}\cdot\exp\left(\frac{-r}{n}\right)$$

$$Fg(\alpha,\gamma,z) := 1 + \sum_{k=1}^{-\alpha}\left(\frac{P1(k,\alpha)}{P1(k,\gamma)}\right)\cdot\frac{z^k}{k!}$$

ненормированные волновые функции







*) Если $m = 9{,}11\cdot 10^{-28}$ г есть масса электрона, а $\alpha = e^2$ (e — заряд электрона), то кулоновы единицы совпадают с так называемыми *атомными единицами*. Атомная единица длины

$$\hbar^2/me^2 = 0{,}529\cdot 10^{-8}\ \text{см}$$

(так называемый *боровский радиус*). Атомная единица энергии равна

$$me^4/\hbar^2 = 4{,}36\cdot 10^{-11}\ \text{эрг} = 27{,}21\ \text{эВ}$$

(половину этой величины называют *ридбергом*, Ry). Атомная единица заряда есть $e = 4{,}80\cdot 10^{-10}$ эл.-стат. единиц. Переход в формулах к атомным единицам производится, формально, положив $e = 1$, $m = 1$, $\hbar = 1$.

Л. Д. ЛАНДАУ и Е. М. ЛИФШИЦ

ТОМ III

КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА

НЕРЕЛЯТИВИСТСКАЯ ТЕОРИЯ

Атом водорода: радиальные волновые функции

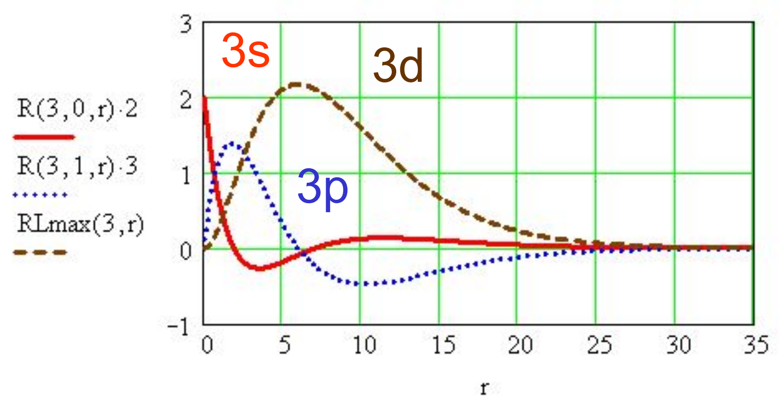
$$\psi_{nlm}(r,\theta,\varphi) = R_{nl}(r)\Upsilon_{lm}(\theta,\varphi) \qquad R = \rho^l e^{-\rho/2} w(\rho) \qquad \rho = \frac{2r}{n}$$

$$w = F(-n + l + 1,\ 2l + 2,\ \rho)$$

вырожденная гипергеометрическая функция

$$F(\alpha,\ \gamma,\ z) = 1 + \frac{\alpha}{\gamma}\frac{z}{1!} + \frac{\alpha(\alpha+1)}{\gamma(\gamma+1)}\frac{z^2}{2!} + \dots,$$

ненормированные волновые функции




```
> Pg:=(k,a)->product((m+a),m=0..k-1);
```

$$Pg := (k,a) \to \prod_{m=0}^{k-1} (m+a)$$

```
> Fg:=(a,g,z)->1+sum(Pg(k,a)/Pg(k,g)*z^k/k!,k=1..-a);
```

$$Fg := (a,g,z) \to 1 + \left(\sum_{k=1}^{-a} \frac{\mathrm{Pg}(k,a)\,z^k}{\mathrm{Pg}(k,g)\,k!}\right)$$

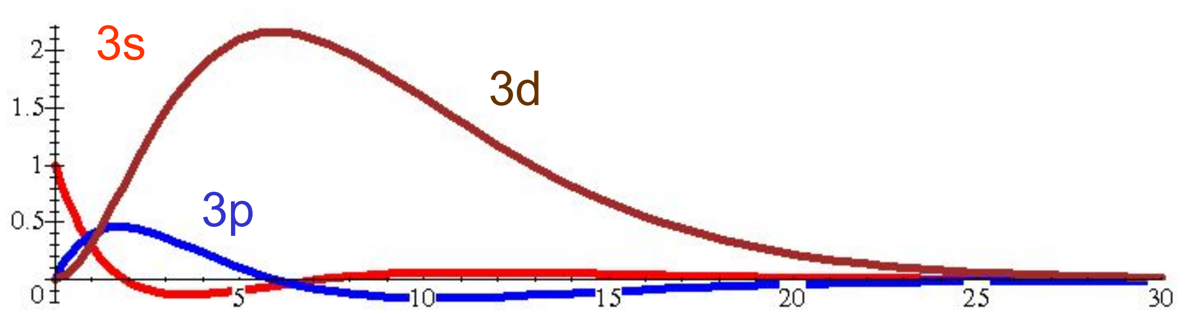
```
> Rf:=(n,LL,r)->(2*r/n)^LL*exp(-r/n)*Fg(-n+LL+1,2*LL+2,2*r/n);
```

$$Rf := (n,LL,r) \to \left(2\frac{r}{n}\right)^{LL} \mathbf{e}^{\left(-\frac{r}{n}\right)} \mathrm{Fg}\left(-n+LL+1,\ 2\,LL+2,\ 2\frac{r}{n}\right)$$

```
> n:=3;LL:=0;plot([Rf(n,0,r),Rf(n,1,r),Rf(n,2,r)],r=0..30,color=[red,blue,brown],
  thickness=5,font=[SYMBOL,12]);
```

$$n := 3$$

$$LL := 0$$



Атом водорода: волновые функции

$$\psi_{nlm}(r,\theta,\varphi) = R_{nl}(r)\Upsilon_{lm}(\theta,\varphi)$$

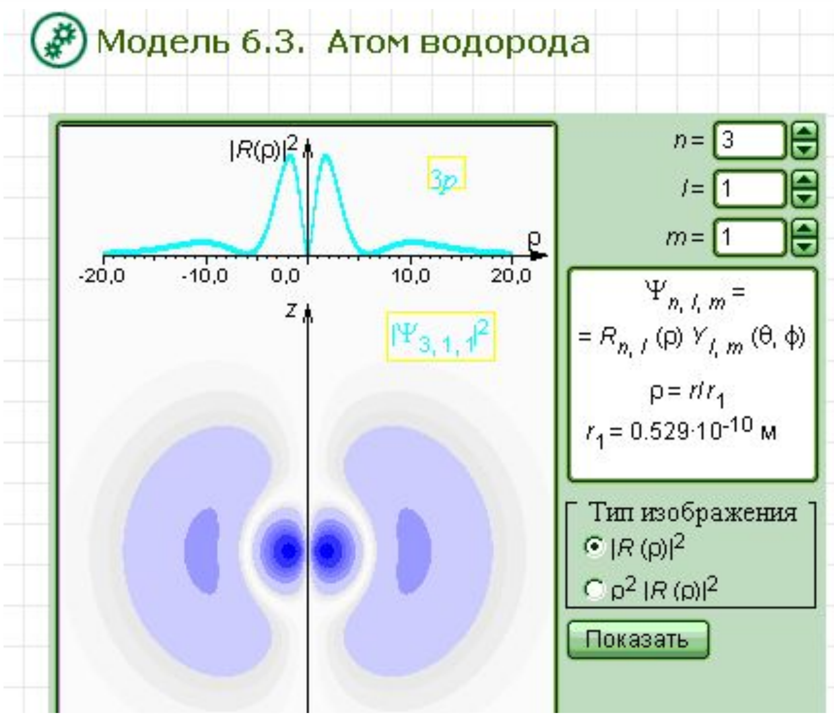
Пример: 3*p*, *n*=3, *l*=1, *m*$_l$=0

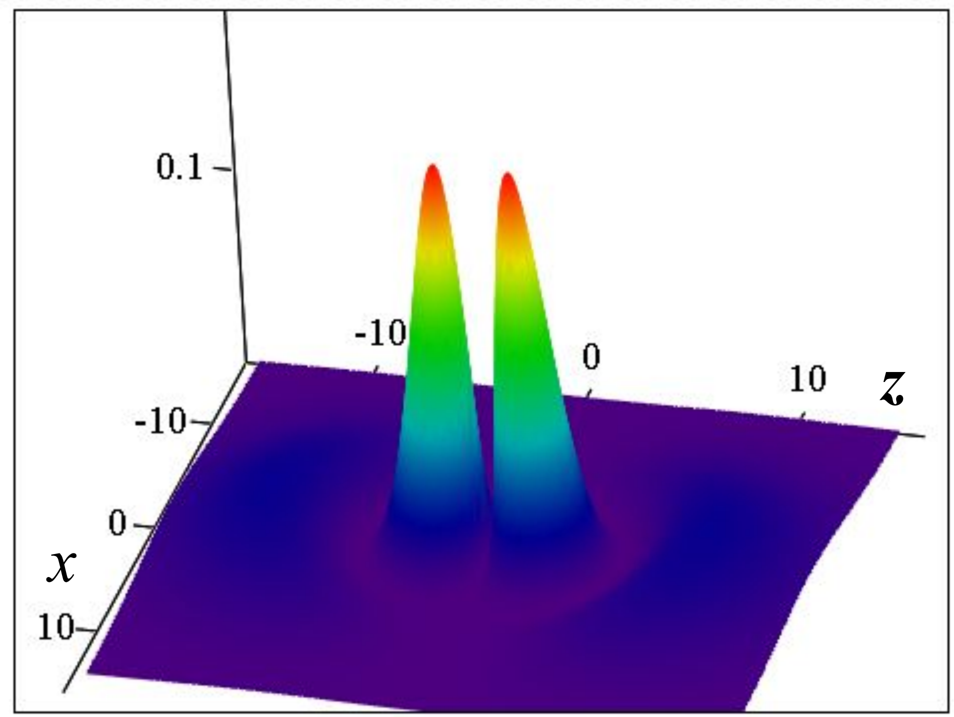
$$R_{nl}(r) = C_n r^{n-1}\exp\left(-\frac{r}{na_0}\right),\ l = n-1,$$

$$R_{nl}(r) \to C_{nl} r^{n-1}\exp\left(-\frac{r}{na_0}\right),\ r\to\infty,\ 0\le l\le n-1.$$

$n1 := 3 \quad L1 := 1$

$$pd(x,z) := \left(R\left(n1, L1, \sqrt{x^2+z^2}\right)\cdot Leg\left(1, \frac{z}{\sqrt{x^2+z^2}}\right)\right)^2$$





pd

Атом водорода: волновые функции

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

$$R_{nl}(r) = C_n r^{n-1}\exp\left(-\frac{r}{na_0}\right),\ l = n-1,$$

$$R_{nl}(r) \to C_{nl} r^{n-1}\exp\left(-\frac{r}{na_0}\right),\ r\to\infty,\ 0\le l\le n-1.$$

Пример: 3*p*, *n*=3, *l*=1, m_l=0

$$\mathbf{n1} := 3 \qquad \mathbf{L1} := 1$$

$$\mathbf{pd(x,z)} := \left(\mathbf{R}\left(\mathbf{n1},\mathbf{L1},\sqrt{\mathbf{x}^2+\mathbf{z}^2}\right)\cdot\mathbf{Leg}\left(1,\frac{\mathbf{z}}{\sqrt{\mathbf{x}^2+\mathbf{z}^2}}\right)\right)^2$$

```
> n:=3;LL:=1;Pd:=(n,L,x,z)->(Rf(n,LL,sqrt(x*x+z*z))*P(LL,z/sqrt(x*x+z*z)))^2;
```

$$n := 3$$

$$LL := 1$$

$$Pd := (n,L,x,z) \to \mathrm{Rf}\left(n,LL,\sqrt{x^2+z^2}\right)^2 \mathrm{P}\left(LL,\frac{z}{\sqrt{x^2+z^2}}\right)^2$$

```
> plot3d(Pd(n,LL,x,z),x=-15..15,z=-15..15,grid=[100,100]);
```