

Раздел V. Атомная и ядерная физика.

Глава 5. Атомы.

1. Атом водорода.

Электрон в атоме водорода обладает точными значениями 4 физических величин.

Энергия:

$$E_n = -\frac{Ry}{n^2} \quad Ry = \frac{me^4}{2\hbar^2} = 13,6 \text{ эВ}$$

$n = 1, 2, 3, \dots$ - главное квантовое число

Величина момента импульса:

$$L_\ell = \hbar \sqrt{\ell(\ell+1)}$$

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

Проекция момента импульса:

$$L_{zm} = \hbar m$$

$m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm \ell$ - магнитное квантовое число

Проекция спина:

$$L_{Sz} = \hbar m_s$$

$m_s = \pm \frac{1}{2}$ - спиновое квантовое число

Таким образом, каждое квантовое состояние электрона характеризуется 4 квантовыми числами n, ℓ, m, m_s .

Волновые функции, описывающие эти состояния

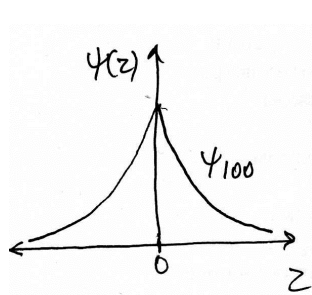
$\Psi_{n\ell m m_s}$, являются решениями стационарного уравнения Шредингера.

$$\hat{H}\Psi_{n\ell m m_s} = E_n \Psi_{n\ell m m_s}; \quad \hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta - \frac{e^2}{r}$$

И одновременно собственными функциями

операторов: $\hat{L}^2, \hat{L}_Z, \hat{L}_{SZ}$.

Так основное состояние описывается функцией



$$\Psi_{100}(r) = \sqrt{\frac{1}{\pi a^3}} e^{-\frac{r}{a}}$$
$$a = \frac{\hbar^2}{me^2} = 0,5 \cdot 10^{-8} \text{ см} - \text{радиус Бора}$$

Кратность вырождения по энергии $2n^2$.

$$\begin{array}{ccc} \Psi_{100 \pm \frac{1}{2}} & 2 \cdot 1^2 & \Psi_{200 \pm \frac{1}{2}} \\ & & \Psi_{211 \pm \frac{1}{2}} \quad 2 \cdot 4 = 2 \cdot 2^2 \\ & & \Psi_{210 \pm \frac{1}{2}} \\ & & \Psi_{21-1 \pm \frac{1}{2}} \end{array}$$

При испускании и поглощении света энергия кванта равна $\hbar\omega = E_n - E_m$, при этом выполняется правило отбора по орбитальному квантовому числу:

$$\Delta\ell = \pm 1$$

Это связано с тем, что фотон обладает собственным моментом импульса, поэтому при испускании или поглощении света момент импульса электрона меняется.

2. Многоэлектронные атомы.

В многоэлектронном атоме каждый электрон движется в электрическом поле ядра и всех остальных электронов. Это поле сферически симметричное, но не кулоновское. Квантовые состояния электронов в многоэлектронном атоме, так же как и в атоме водорода, характеризуются 4 квантовыми числами n, ℓ, m, m_s . Но в отличие от атома водорода, энергия электрона в многоэлектронном атоме зависит не только от n , но и от ℓ , $E_{n\ell}$. При этом, как правило,

выполняются неравенства $E_{n+1, \ell} > E_{n, \ell'}$ и

$$E_{n, \ell+1} > E_{n, \ell} \text{ при всех } \ell \text{ и } \ell'.$$

Простого выражения для энергий электронов в многоэлектронном атоме нет.

Остальные характеристики квантовых состояний электронов такие же, как в атоме водорода:

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

$$L_z = \hbar m \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm \ell$$

$$L_{Sz} = \pm \frac{\hbar}{2}$$

В соответствии с принципом Паули электроны в многоэлектронном атоме последовательно занимают квантовые состояния в порядке возрастания энергии.

3. Периодическая система элементов.

Электроны, находящиеся в состояниях с одинаковым главным квантовым числом n составляют оболочку. В полностью заполненной оболочке $2n^2$ электронов (2, 8, 18, 32...).

В каждой оболочке электроны, имеющие одинаковое орбитальное число ℓ составляют подоболочку. Обозначения подоболочек и число электронов в заполненных подоболочках приведены ниже:

$\ell = 0$	2	s	s, p, d, f – обозначения соответствующих подоболочек
$\ell = 1$	6	p	
$\ell = 2$	10	d	
$\ell = 3$	14	f	

Электронные конфигурации атомов:

H	$1s^1$	
He	$1s^2$	
Li	$1s^2 2s^1$	
Be	$1s^2 2s^2$	
B	$1s^2 2s^2 2p^1$	
C	$1s^2 2s^2 2p^2$	
N	$1s^2 2s^2 2p^3$	
O	$1s^2 2s^2 2p^4$	
F	$1s^2 2s^2 2p^5$	
Ne	$1s^2 2s^2 2p^6$	
Na	$\dots 3s^1$	
Mg	$3s^2$	
Al	$3s^2 3p^1$	
Si	$3s^2 3p^2$	
P	$3s^2 3p^3$	
S	$3s^2 3p^4$	
Cl	$3s^2 3p^5$	
Ar	$3s^2 3p^6$	
K	$3s^2 3p^6 3d^0 4s^1$	сбой
Ca	$3s^2 3p^6 4s^2$	
Sc	$3s^2 3p^6 3d^1 4s^2$	

Вопросы.

1. Какие величины характеризуют квантовые состояния электрона в атоме водорода.
2. Какие квантовые числа, характеризуют квантовые состояния электрона в атоме водорода.
3. Правила отбора при поглощении и излучении света атомом водорода.
4. Электронные конфигурации атомов.