

## Атом водорода

Энергия взаимодействия электрона с ядром  $U(r) = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}$ . Если подставить это выражение в уравнение Шредингера, то получим  $\Delta\psi + \frac{2m}{\hbar^2} \left( E + \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) \psi = 0$ . Решением данного уравнения будет энергия электрона в атоме водорода  $E_n = -\frac{1}{n^2} \frac{Z^2 m e^4}{8\hbar^2 \epsilon_0^2}$ . Энергия ионизации  $E_i = -E_1 = 13.55 \text{ эВ}$ .

По теории Шредингера, максимум вероятности нахождения электрона в атоме на конкретном уровне совпадает с соответствующим радиусом Боровской орбиты. При этом чем выше уровень, тем меньше вероятность нахождения электрона на нем.

С рассматриванием вероятности пропадает понятие орбиты, вводится понятие электронного облака. Говорить об орбите нельзя ввиду большой неопределенности по координате.

## Квантовые числа

$n = 1, 2, \dots$  – соответствует номеру электронного облака (Боровская орбита).

$l = 0, 1, \dots, n-1$  – орбитальное квантовое число. Связано с орбитальным моментом импульса  $L$ . Характеризует движение электрона вокруг ядра, показывает форму электронного облака.  $l = 0$  соответствует  $s$  – состоянию.  $l = 1$   $p$  – состоянию.  $l = 2$   $d$  – состоянию.  $l = 3$   $f$  – состоянию.

$m = -l; -l+1; \dots; 0; \dots; l$  – магнитное квантовое число. Связано с проекцией момента импульса на выбранное направление. Характеризует ориентацию электронного облака в пространстве.

Пример:  $l = 0$  –  $s$  – орбиталь,  $m = 0$ , это сферическое облако, неориентируемое.  $l = 1$  –  $p$  – орбиталь,  $m = -1; 0; 1$ , это гантелеобразное облако.

$s = \pm \frac{1}{2}$  – спиновое квантовое число. Характеризует собственное движение электронов.

**Принцип Паули:** не существует двух электронов с одинаковым набором квантовых чисел. Он позволяет выяснить вместимость каждой орбитали.

## Правило заполнения электронных уровней

Атомы занимают положения с наименьшей энергией. Отсюда формируется **правило Клечковского:** в атоме электронные уровни и подуровни заполняются в порядке возрастания суммы  $n + l$ . При равных значениях  $n + l$  первым заполняется уровень с меньшим  $n$ .

Структура таблицы Менделеева отражает правило заполнения уровней с помощью принципа Паули и правила Клечковского.

	$l$	$m$	$s$	Вместимость
$s$	0	0	$\pm \frac{1}{2}$	2
$p$	1	-1	$\pm \frac{1}{2}$	6
		0	$\pm \frac{1}{2}$	
		1	$\pm \frac{1}{2}$	
$d$	...	...	...	10
$f$	...	...	...	14

$n$	$l$	$n + l$	№	$e$
1	$s(0)$	1	1	2
2	$s(0)$	2	2	2
	$p(1)$	3	3	6
3	$s(0)$	3	4	2
	$p(1)$	4	5	6
	$d(2)$	5	7	10
4	$s(0)$	4	6	2
	$p(1)$	5	8	6
	$d(2)$	6	10	10
	$f(3)$	7	12	14
5	$s(0)$	5	9	2
	$p(1)$	6	11	6
	$d(2)$	7	13	10
...	...	...	...	...

1). Собственное значение энергии жесткого квантового ротатора  $E_l = \frac{\hbar^2}{2I} l(l+1)$ .

Орбитальный механический момент импульса  $L = \hbar\sqrt{l(l+1)}$ .

Проекция  $L$  на произвольное направление  $L_z = m_l \hbar$ ,  $m_l = 0, \pm 1, \dots, \pm l$ .

Орбитальный магнитный момент импульса  $\vec{\mu}_l = -g\vec{L}$ ;  $g = \frac{e}{2m_e}$  – орбитальное гиромагнитное отношение для электрона.  $\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e} = 0.927 \cdot 10^{-23} \frac{\text{Дж}}{\text{Т}}$ ;  $\mu_l = \mu_B \sqrt{l(l+1)}$ .

Собственный механический момент импульса  $L_s = \hbar\sqrt{s(s+1)} = \hbar\sqrt{\frac{1}{2} * \frac{3}{2}} = \frac{\hbar\sqrt{3}}{2}$ .

Проекция  $L_s$  на произвольное направление  $L_{sz} = m_s \hbar = \pm \frac{1}{2} \hbar$ ;  $m_s = \pm s = \pm \frac{1}{2}$  – магнитное спиновое квантовое число.

### Многоэлектронные атомы

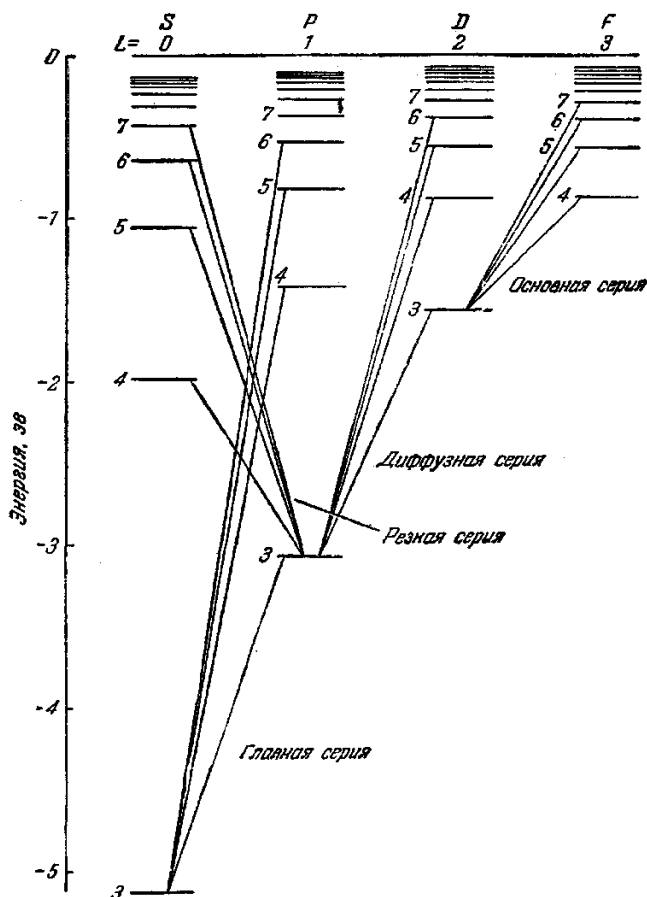
Это атомы, имеющие несколько электронов. В этом случае мы вводим суммарный орбитальный механический момент, суммарный  $L_L$ , суммарный орбитальный магнитный момент  $\mu_L$ , суммарный собственный механический момент  $L_s$  и суммарный собственный орбитальный момент  $\mu_s$ .

Магнитный и механический моменты противоположно направлены!

Для их вычисления используются те же формулы, что и для одноэлектронной системы, только будут использоваться суммарные квантовые числа  $L, S$ .

Суммарный общий момент  $\vec{L}_J = \vec{L}_s + \vec{L}_L$ .  $J$  – полное квантовое число.

### Спектры щелочных металлов



В щелочных металлах снимается вырождение по орбитальному квантовому числу  $l$ , т.е. на спектре положение линий, соответствующих состояниям с разными  $l$ , будет разным (энергии  $3s, 3p, 3d$  – различные).

Резкая серия:  $\omega = 3P \rightarrow nS$  ( $n = 4, 5, \dots$ )  
 Главная серия:  $\omega = 3S \rightarrow nP$  ( $n = 3, 4, \dots$ )  
 Диффузная серия:  $\omega = 3P \rightarrow nD$  ( $n = 3, 4, \dots$ )  
 Основная серия:  $\omega = 3D \rightarrow nF$  ( $n = 4, 5, \dots$ )