

Тема: Квантово-механическая модель атома водорода. Излучение и поглощение света атомами. Линейчатые спектры

Простейший из атомов, атом водорода явился своеобразным тест-объектом для теории Бора. Ко времени создания теории он был хорошо изучен экспериментально. Было известно, что он содержит единственный электрон. Ядром атома является протон – положительно заряженная частица, заряд которой равен по модулю заряду электрона, а масса в 1836 раз превышает массу электрона. Еще в начале XIX века были открыты дискретные спектральные линии в видимой области излучения атома водорода (так называемый линейчатый спектр). Впоследствии закономерности, которым подчиняются длины волн (или частоты) линейчатого спектра, были хорошо изучены количественно (И. Бальмер, 1885 г.). Совокупность спектральных линий атома водорода в видимой части спектра была названа серией Бальмера. Позже аналогичные серии спектральных линий были обнаружены в ультрафиолетовой и инфракрасной частях спектра. В 1890 году И. Ридберг получил эмпирическую формулу для частот спектральных линий:

$$\nu_{nm} = R \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right).$$

Для серии Бальмера $m = 2$, $n = 3, 4, 5, \dots$. Для ультрафиолетовой серии (серия Лаймана) $m = 1$, $n = 2, 3, 4, \dots$. **Постоянная** R в этой формуле называется **постоянной Ридберга**. Ее численное значение $R = 3,29 \cdot 10^{15} \text{ Гц}$. До Бора механизм возникновения линейчатых спектров и смысл целых чисел, входящих в формулы спектральных линий водорода (и ряда других атомов), оставались непонятными.

Постулаты Бора определили направление развития новой науки – квантовой физики атома. Но они не содержали рецепта определения параметров стационарных состояний (орбит) и соответствующих им значений энергии E_n .

Правило квантования, приводящее к согласующимся с опытом значениям энергий стационарных состояний атома водорода, Бором было угадано. Он предположил, что момент импульса электрона, вращающегося вокруг ядра, может принимать только дискретные значения, кратные постоянной Планка. Для круговых орбит правило квантования Бора записывается в виде

$$m_e v r_n = n \frac{h}{2\pi} \quad (n = 1, 2, 3, \dots).$$

Здесь m_e – масса электрона, v – его скорость, r_n – радиус стационарной круговой орбиты. Правило квантования Бора позволяет вычислить радиусы стационарных орбит электрона в атоме водорода и определить значения энергий.

Рис. 1 иллюстрирует образование спектральных серий в излучении атома водорода при переходе электрона с высоких стационарных орбит на более низкие.

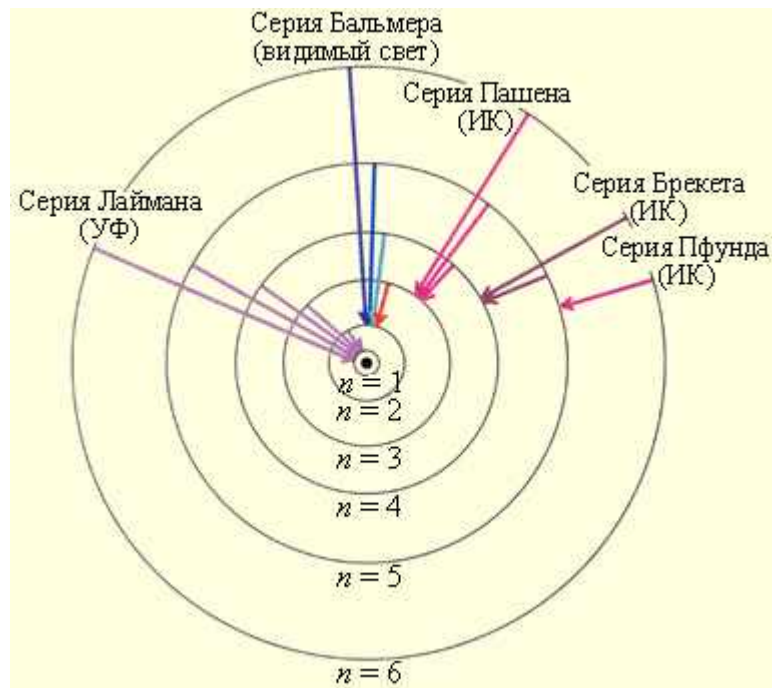


Рисунок 1. Стационарные орбиты атома водорода и образование спектральных серий

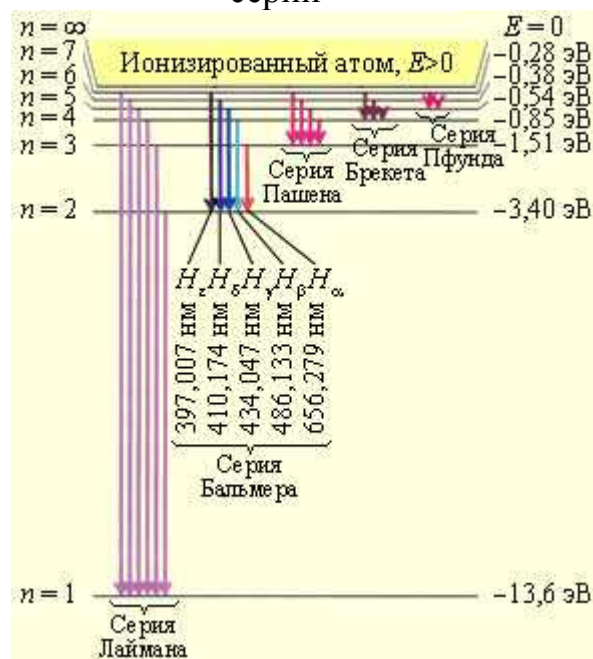


Рисунок 2. Диаграмма энергетических уровней атома водорода. Показаны переходы, соответствующие различным спектральным сериям. Для первых пяти линий серии Бальмера в видимой части спектра указаны длины волн

Прекрасное согласие боровской теории атома водорода с экспериментом служило веским аргументом в пользу ее справедливости. Однако попытки применить эту теорию к более сложным атомам не увенчались успехом. Бор не смог дать физическую интерпретацию правилу квантования. Это было сделано десятилетием позже де Бройлем на основе представлений о волновых свойствах частиц. Де Бройль предложил, что каждая орбита в атоме водорода соответствует волне, распространяющейся по окружности около ядра атома. Стационарная орбита возникает в том случае, когда волна непрерывно повторяет себя после каждого оборота вокруг ядра. Другими словами, стационарная орбита

соответствует круговой стоячей волне де Бройля на длине орбиты (рис. 3). Это явление очень похоже на стационарную картину стоячих волн в струне с закрепленными концами.

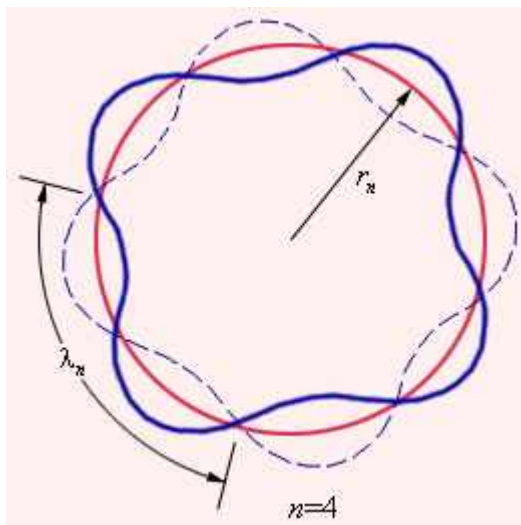


Рисунок 3. Иллюстрация идеи де Бройля возникновения стоячих волн на стационарной орбите для случая $n = 4$

Представление о дискретных состояниях противоречит классической физике. Поэтому возник вопрос, не опровергает ли квантовая теория ее законы.

Квантовая физика не отменила фундаментальных классических законов сохранения энергии, импульса, электрического заряда и т. д. Согласно сформулированному Н. Бором принципу соответствия, квантовая физика включает в себя законы классической физики, и при определенных условиях можно обнаружить плавный переход от квантовых представлений к классическим. Это можно видеть на примере энергетического спектра атома водорода (рис. 2). При больших квантовых числах $n \gg 1$ дискретные уровни постепенно сближаются, и возникает плавный переход в область непрерывного спектра, вытекающего из классической физики.

Половинчатая, полуклассическая теория Бора явилась важным этапом в развитии квантовых представлений, введение которых в физику требовало кардинальной перестройки механики и электродинамики. Такая перестройка была осуществлена в 20-е – 30-е годы XX века.

Представление Бора об определенных орбитах, по которым движутся электроны в атоме, оказалось весьма условным. На самом деле движение электрона в атоме очень мало похоже на движение планет или спутников. Физический смысл имеет только вероятность обнаружить электрон в том или ином месте, описываемая квадратом модуля волновой функции $|\Psi|^2$. Волновая функция Ψ является решением основного уравнения квантовой механики – уравнения Шредингера. Оказалось, что состояние электрона в атоме характеризуется целым набором квантовых чисел. Главное квантовое число n определяет квантование энергии атома. Для квантования момента импульса вводится так называемое орбитальное квантовое число l . Проекция момента импульса на любое выделенное в пространстве направление (например, направление вектора магнитного поля) также принимает дискретный ряд

значений. Для квантования проекции момента импульса вводится магнитное квантовое число m . Квантовые числа n , l , m связаны определенными правилами квантования. Например, орбитальное квантовое число l может принимать целочисленные значения от 0 до $(n - 1)$. Магнитное квантовое число m может принимать любые целочисленные значения в интервале $\pm l$. Таким образом, каждому значению главного квантового числа n , определяющему энергетическое состояние атома, соответствует целый ряд комбинаций квантовых чисел l и m . Каждой такой комбинации соответствует определенное распределение вероятности $|\Psi|^2$ обнаружения электрона в различных точках пространства («электронное облако»).

Состояния, в которых орбитальное квантовое число $l = 0$, описываются сферически симметричными распределениями вероятности. Они называются s-состояниями ($1s$, $2s$, ..., ns , ...). При значениях $l > 0$ сферическая симметрия электронного облака нарушается. Состояния с $l = 1$ называются p-состояниями, с $l = 2$ – d-состояниями и т. д.

На рис. 4 изображены кривые распределения вероятности $\rho(r) = 4\pi r^2 |\Psi|^2$ обнаружения электрона в атоме водорода на различных расстояниях от ядра в состояниях $1s$ и $2s$.

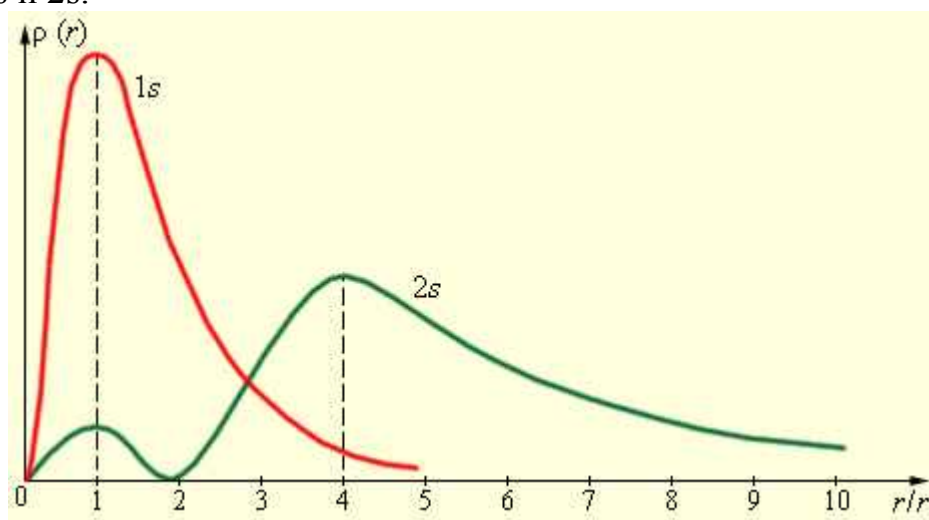


Рисунок 4. Распределение вероятности обнаружения электрона в атоме водорода в состояниях $1s$ и $2s$. $r_1 = 5,29 \cdot 10^{-11}$ м – радиус первой борховской орбиты

Как видно из рис. 4, электрон в состоянии $1s$ (основное состояние атома водорода) может быть обнаружен на различных расстояниях от ядра. С наибольшей вероятностью его можно обнаружить на расстоянии, равном радиусу r_1 первой борховской орбиты. Вероятность обнаружения электрона в состоянии $2s$ максимальна на расстоянии $r = 4r_1$ от ядра. В обоих случаях атом водорода можно представить в виде сферически симметричного электронного облака, в центре которого находится ядро.