Квантовые числа

Орбитальное и магнитное квантовые числа

Уравнению Шрёдингера удовлетворяют собственные функции , которые определяются 3-мя квантовыми числами:

n – главное,

l – орбитальное,

m_l – магнитное.

- *n* – главное квантовое число определяет номер орбиты, т.е. энергетические уровни электрона в атоме.

Решение стационарного уравнения Шрёдингера для электрона в центрально-симметричном кулоновском поле ядра показывает:

1. полная энергия электрона квантована

$$E_n = -\frac{1}{n^2} \cdot \frac{Z^2 m e^4}{8 h^2 \varepsilon_0^2},$$

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

2. момент импульса электрона в атоме квантуется $L_l = \sqrt{l(l+1)}\hbar,$

$l -$ орбитальное квантовое число определяет момент импульса электрона в атоме, $l = \underbrace{0,1\ldots(n-1)}_{n-значений}$

3. Вектор $\boldsymbol{L_l}$ момента импульса электрона имеет такие направления, при которых L_{lz} – проекция $\boldsymbol{L_l}$ на направление внешнего магнитного поля квантуется:

$$L_{lz} = \hbar m_l \,,$$

m_l – магнитное квантовое число определяет проекцию момента импульса электрона на заданное направление (направление внешнего магнитного поля) – пространственное квантование,

$$m_l = \underbrace{0, \pm 1, \pm 2 \ldots \pm l}_{2l+1 - \text{значений}}.$$

В квантовой механике положение электрона в атоме определяется ψ функцией, квадрат модуля которой определяет плотность вероятности обнаружить электрон в различных точках объема атома.

Квантовые числа:

n, l – характеризуют размер и форму облака (орбиты),

m_l – характеризует ориентацию электронного облака (орбиты) в пространстве:

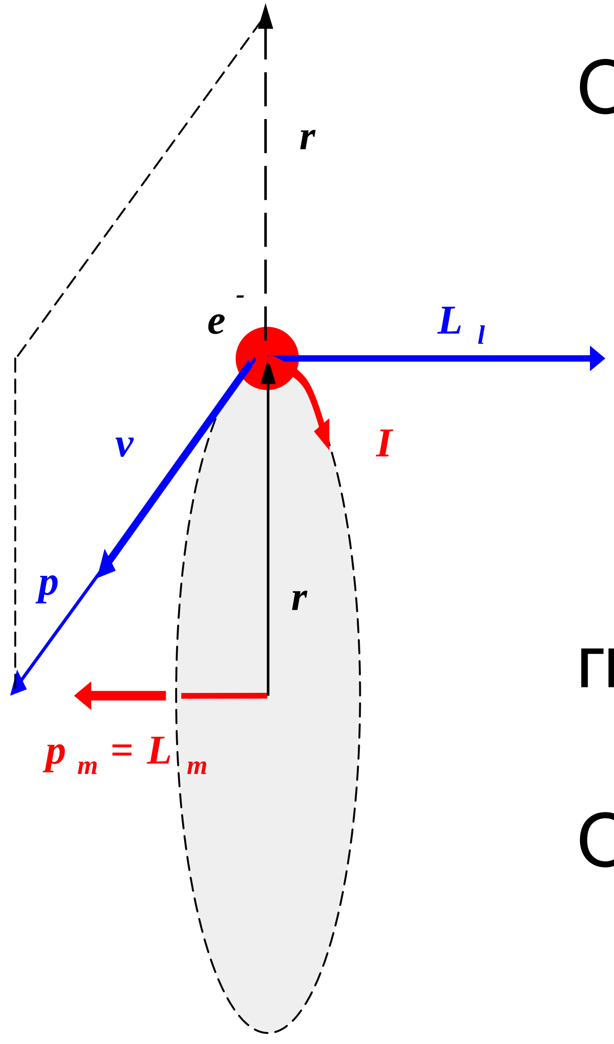
$$\cos\varphi = \frac{m_l}{\sqrt{l(l+1)}}, \quad \varphi = \angle \vec{H}, \vec{n}, \quad \vec{n} -$$ **единичный вектор нормали к плоскости орбиты.**

Магнитный момент электрона. Гиромагнитное соотношение

Электрон, движущийся по круговой орбите, имеет орбитальный момент импульса $\vec{L}_l = [\vec{r}, \vec{p}]$.

Орбитальный магнитный момент $\vec{p}_m = IS\vec{n}$ пропорционален орбитальному (механическому) моменту импульса:

$$\vec{p}_m = g\vec{L}_l.$$



Орбитальный магнитный момент p_m, вызванный движением электрона по орбите обозначают L_m:

$$\vec{p}_m = \vec{L}_m \Rightarrow \vec{L}_m = g\vec{L}_l, \quad g = -\frac{e}{2m} -$$

гиромагнитное отношение для орбитальных моментов.

Орбитальный момент импульса

$$L_l = \hbar\sqrt{l(l+1)}.$$

Вектора $\mathbf{L_l}$ и $\mathbf{L_m}$ направлены в противоположные стороны.

$$L_m = -\underbrace{\frac{e}{2m}\hbar}_{\mu_Б}\sqrt{l(l+1)} = \mu_Б\sqrt{l(l+1)}, \quad \mu_Б -$$ **магнетон Бора.**

L_m иногда обозначают μ_l.

Проекция магнитного момента на направление внешнего магнитного поля (например, ось z): $$L_{mz} = \mu_{lz} = \mu_Б m_l,$$

m_l – магнитное квантовое число, определяющее проекцию момента импульса электрона на z.

Спин электрона.
Опыт Штерна и Герлаха

1922 г. опыт по измерению магнитных моментов атомов водорода. $\vec{p}_m = IS\vec{n}$

Пучок атомов водорода с одним внешним электроном (в основном состоянии), у которых l = 0:

$$L_l = \hbar\sqrt{l(l+1)} = 0 \Rightarrow L_m = gL_l = 0 \Rightarrow$$

Магнитное поле не должно оказывать влияние на движение атомов.Опыт показал, что пучок атомов в магнитном поле расщепляется на два пучка, т.е. наблюдалось пространственное квантование атомов.

Более точные опыты показали, что и в отсутствии внешнего магнитного поля спектры атома водорода являются *дуплетами*.

Для объяснения этого предположили, что электрон обладает *собственным моментом импульса – спином*, который не связан с движением электрона в пространстве и имеет только две ориентации относительно внешнего магнитного поля.

Абсолютная величина спинового момента импульса электрона: $L_s = \hbar\sqrt{s(s+1)},$

s – спиновое квантовое число,

$$s = \frac{1}{2} \Rightarrow L_s = \frac{\sqrt{3}}{2}\hbar.$$

Проекция спина на направление внешнего магнитного поля квантуется и определяется выражением

$$L_{sz} = \hbar m_s, \quad m_s = \pm\frac{1}{2} -$$

магнитное спиновое квантовое число.

Проекция магнитного момента спина на направление внешнего магнитного поля (например, ось *z*):

$$L_{smz} = \mu_s = -2\mu_Б m_s = \mp\mu_Б, \quad \mu_Б = \frac{e\hbar}{2m} -$$

магнетон Бора.

Вырожденные состояния

n – главное квантовое число определяет номер орбиты и E_n.

l – орбитальное квантовое число определяет форму орбиты и момент импульса L_l электрона в атоме, $l = \underbrace{0,1...(n-1)}_{n-\text{значений}}$

$m_l = m$ – магнитное квантовое число определяет ориентацию плоскости электронной орбиты и проекцию момента импульса электрона на направление внешнего магнитного поля,

$$m_l = \underbrace{0,\pm1,\pm2...\pm l}_{2l+1-\text{значений}}.$$

Каждому значению E_n соответствует несколько волновых функций ψ_{nlm}, отличающихся значениями l и m. Т.е. атом, например, водорода может иметь одно и то же значение E_n, находясь в нескольких различных состояниях.

Вырожденные состояния – состояния с одинаковой энергией.

Вырожденные состояния

Кратность вырождения уровня – число различных состояний с каким-либо значением энергии.

Каждому из n значений квантового числа l соответствует $2l + 1$ значений m. Следовательно, число различных состояний:

$$\sum_{l=0}^{n-1}(2l+1) = n^2.$$

Вырожденные состояния

Уровень E_n	ψ_{nlm}	Значения		
		n	l	m
E_1	ψ_{100}	1	0	0
E_2	ψ_{200} ψ_{21-1} ψ_{210} ψ_{21+1}	2 2 2 2	0 1 1 1	0 –1 0 +1
E_3	9 ψ функций			

● Электроны с одинаковым l образуют подоболочку.

$l = 0$ s – подоболочка, s – электрон,

$l = 1$ p,

$l = 2$ d,

$l = 3$ f.

Состояние *s* – электрона в атоме H_2 называют основным. Это состояние является сферически симметричным. Волновая функция этого состояния зависит только от расстояния *r* электрона от ядра:

$$\psi = \psi(r) = Ce^{-\frac{r}{a_0}}, \quad C = const,$$

a_0 – первый боровский радиус.

В квантовой механике электронные орбиты рассматриваются как геометрическое место точек, в которых с наибольшей вероятностью может быть обнаружен электрон.

Для *s* – состояния атома H_2 такая орбита – первая круговая боровская орбита с $r = a_0$.