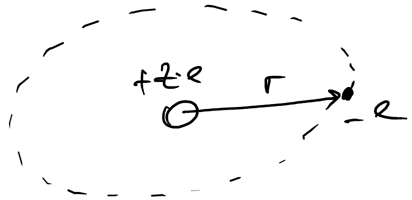
Глава: Физика атомов и молекул.

§ Атом водорода (H). Теория одноэлектронных атомов

Система:

- неподвижн. ядро: $Z \cdot e$
- движущийся вокруг электрон
- сферическая симметрия: $U(\vec{r}) = U(r)$



$Z = 1$ (H)

$Z > 1$ (водородоподобн. ион)

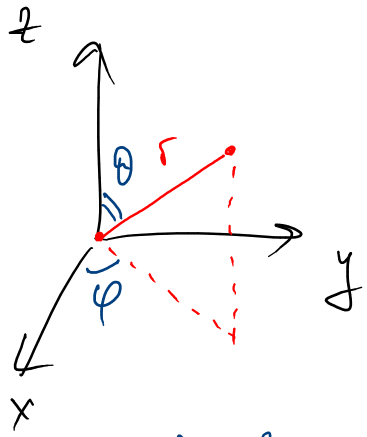
$$U(r) = -\frac{Z \cdot e^2}{r}$$ r – расст-е до ядра

$$\Rightarrow \hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \cdot \nabla^2 + U(r)$$

$\Rightarrow$ Ур. Шрёдингера:
$$\nabla^2 \psi + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E + \frac{Z \cdot e^2}{r}\right)\psi = 0$$

Задача обладает сферич. симметрией $\Rightarrow$ переход в сфер. систему коорд.:

$$\begin{cases} x = r \cdot \sin\theta \cdot \cos\varphi \\ y = r \cdot \sin\theta \cdot \sin\varphi \\ z = r \cdot \cos\theta \end{cases}$$



$$\Rightarrow \Delta \equiv \nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} = \ldots =$$

$$= \underbrace{\frac{1}{r^2} \cdot \frac{\partial}{\partial r}\left(r^2 \cdot \frac{\partial}{\partial r}\right)}_{\Delta_r} + \frac{1}{r^2} \cdot \underbrace{\left[\frac{1}{\sin\theta} \cdot \frac{\partial}{\partial \theta} \cdot \left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]}_{\Delta_{\theta,\varphi}}$$

Д/З

$$\Delta \equiv \Delta_r + \frac{1}{r^2} \cdot \Delta_{\theta,\varphi}$$

\+ Причём, б. считать справедливым:

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2 \cdot \Delta_{\theta,\varphi}$$

$$\hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial\varphi}$$

$$\Rightarrow \hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\Delta_r + \frac{\hat{L}^2}{2mr^2} + U(r)$$

замечаем, что: $[\hat{L}^2, \hat{H}] = 0$ и $[\hat{L}_z, \hat{H}] = 0$

$\Rightarrow$ L^2, L_z и энергия, E, м. б. измерены одновременно и точно

$\Rightarrow$ их волновые функции явл. общими для $\hat{L}^2$, $\hat{L}_z$, $\hat{H}$

$$\left.\begin{aligned} \hat{L}^2 &\to l \\ \hat{L}_z &\to m \\ \hat{H} &\to n \end{aligned}\right\} \Rightarrow \quad \begin{aligned} &\hat{H}\psi = E\psi \\ &\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) \end{aligned}$$

Итак,

$$\left.\begin{aligned} &\hat{L}^2 Y_{lm}(\theta,\varphi) = \hbar^2 l\cdot(l+1)\cdot Y_{lm}(\theta,\varphi) \\ &\hat{H}\psi_{nlm}(r,\theta,\varphi) = E\cdot\psi_{nlm}(r,\theta,\varphi) \end{aligned}\right\}$$

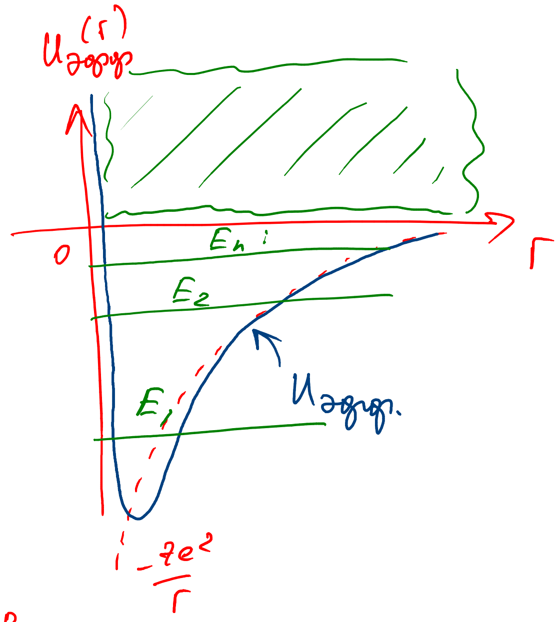
Решение – метод разделения переменных:

$$\psi_{nlm}(r,\theta,\varphi) = R_n(r)\cdot Y_{lm}(\theta,\varphi)$$

$$\Rightarrow \left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\Delta_r + \frac{\hat{L}^2}{2mr^2} + U(r)\right\} R(r)\cdot Y_{lm}(\theta,\varphi) = E\cdot R(r)\cdot Y_{lm}(\theta,\varphi)$$

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_r + \frac{\hbar^2\cdot(l+1)\cdot l}{2mr^2} + U(r)\right\} R(r)\cdot \cancel{Y_{lm}} = E\cdot R(r)\cdot \cancel{Y_{lm}}$$

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_r + \underbrace{\frac{\hbar^2\cdot(l+1)\cdot l}{2mr^2} - \frac{Ze^2}{r}}_{U_{эфф}(r)}\right\}\cdot R(r) = E\cdot R(r)$$



$$U_{эфф}(r) = \underbrace{-\frac{Ze^2}{r}}_{\text{кулоновск. вз.-е}} + \underbrace{\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}}_{\text{описывает центробежные силы}}$$

— потенц. эн.-я электрона в поле центробежной силы