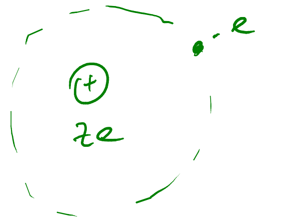
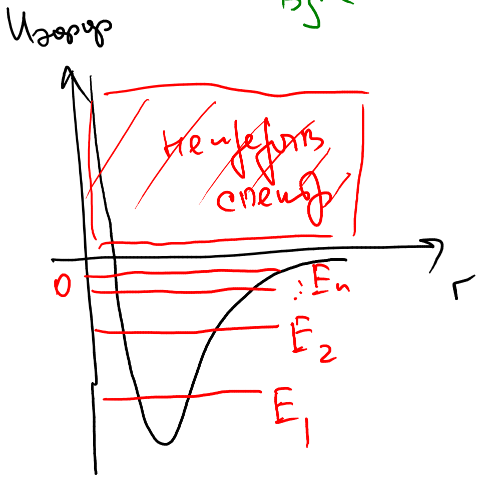
$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\Delta_r + \underbrace{\frac{\hbar^2\cdot l\cdot(l+1)}{2mr^2} - \frac{Ze^2}{r}}_{U_{эфф}}\right\} R(r) = E\cdot R(r) \qquad (*)$$

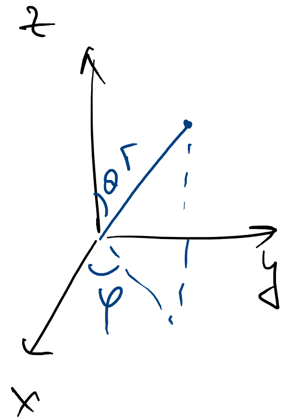


$$U = \frac{Ze^2}{r}$$

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

— потенц. эн-я электрона в поле „центробежн. сил"





$$\psi(r,\theta,\varphi) = R(r)\cdot Y_{lm}(\theta,\varphi)$$

Реш-е для (*) однознач., конечные и непрерывные, если

1) $E > 0$ => для $\forall$ знач-й E

2) $E < 0$; таких, что

$$E_n = -\frac{me^4}{2\hbar^2} \cdot \frac{Z^2}{n^2} \qquad n = 1, 2, 3, \dots$$

n – „главн. кв. число"

$E > 0$ => электрон пролетает вблизи ядра и удаляется на ∞

$E < 0$ => электрон связан с ядром

Волн. ф-я для E_n: $\psi = \psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = \underline{R_{nl}}(r) \cdot Y_{lm}(\theta, \varphi)$

Радиальн. часть волн. ф-и равна:

$$R_{nl}(r) = C_{nl} \cdot e^{-\frac{\rho}{2}} \cdot \rho^{l} \cdot Q^{2l+1}_{n-l-1}(\rho) \Bigg|_{\rho = \frac{2 \cdot Z \cdot r}{n \cdot a_Б}}$$

$a_Б = \frac{\hbar^2}{m e^2}$ – „Боровский радиус" – „радиус 1й Боровск. орбиты"

$a_Б \cong 0{,}5 \cdot 10^{-8}$ см

где обобщённые полиномы Лагерра:

$$Q^{s}_{k}(\rho) = e^{\rho} \cdot e^{-s} \cdot \frac{d^k}{d\rho^k}\left(e^{-\rho} \rho^{k+s}\right)$$

В общем случае $R_{nl}(r)$ – эллиптические орбиты

при $n = l+1 \Rightarrow$ орбиты круговые. Для них: $Q^{2l+1}_{0} = 1$

$$\Rightarrow R_{nl}(r) = C_{nl} \cdot e^{-\rho/2} \cdot \rho^{n-1}$$

Коэф-т C_{nl} м. найти из условия нормировки:

$$\int \Psi^*_{nlm} \cdot \Psi_{nlm} \cdot dV = 1$$

В сфер. системе, учитывая нормировку для Y_{lm} это условие перейдёт в услов. норм-ки для $R_{nl}(r)$:

$$\int \psi^*_{nlm} \cdot \psi_{nlm} \, dV = \int R^*_{nl} \cdot R_{nl} \cdot Y^*_{lm} \cdot Y_{lm} \cdot r^2 \cdot dr \cdot d\Omega =$$

$$= \int R^2_{nl} \cdot r^2 \cdot dr \cdot \underbrace{\int\limits_{(4\pi)} Y^*_{lm} \cdot Y_{lm} \cdot d\Omega}_{1} = 1$$

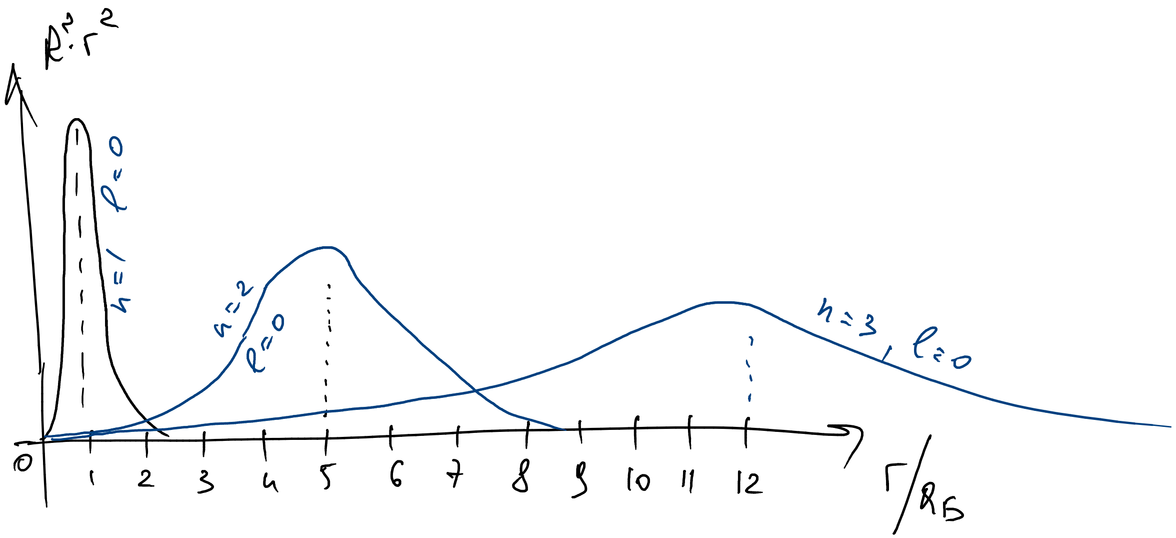
$$\Rightarrow \int\limits_0^\infty |R_{nl}|^2 \cdot r^2 \cdot dr = 1$$

$$\Rightarrow \quad R^2_{nl} \cdot r^2 \cdot dr \equiv dW_r$$ – есть ~~плотность~~ вероятности нахождения на расстоянии r от ядра

$$\frac{dW_r}{dr}$$

$$\psi_{100}(r,\theta,\varphi) = R_{10}\cdot Y_{00} = \frac{1}{\sqrt{\pi\cdot a_Б^3}}\cdot e^{-r/a_Б}$$

$$\psi_{200}(r,\theta,\varphi) = R_{20}\cdot Y_{00} = \frac{1}{\sqrt{8\pi a_Б^3}}\cdot e^{-r/(2a_Б)}\cdot\left(\frac{r}{2\cdot a_Б} - 1\right)$$



Наиболее вероятные положения эл-на = максимум вероятности dW_r $\Rightarrow$ $\left.\dfrac{\partial(r^2 R^2)}{\partial r}\right|_{r_n} = 0$

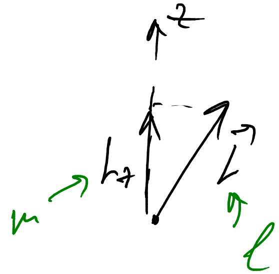
$\Rightarrow$ для круговых орбит:

$r_n = \dfrac{a_Б}{Z}\cdot n^2$ — пропорциональны Боровск. радиусу

Полная вер-ть нахождения эл-на в элементе объёма dV определится:

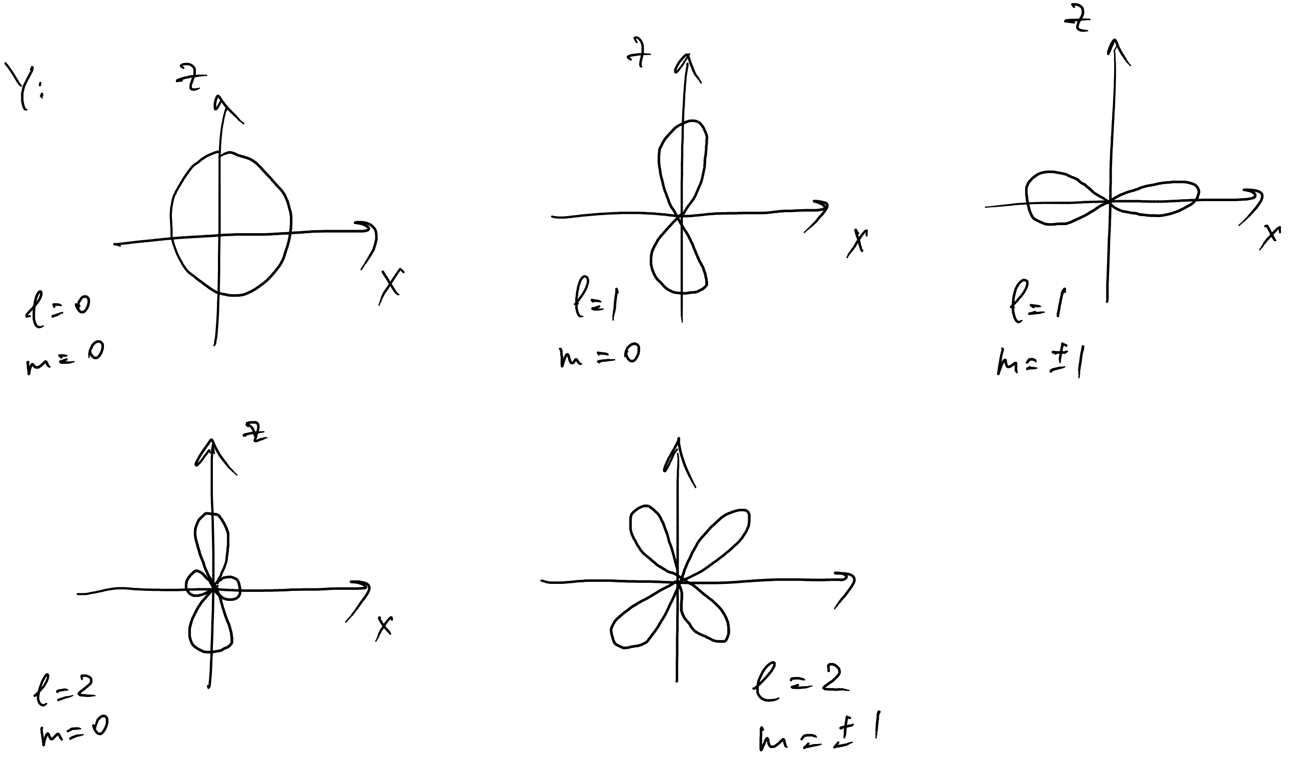
$$dW_{r,\theta,\varphi} = R_{nl}^2 \cdot r^2 \cdot dr \cdot |Y_{lm}|^2 \cdot d\Omega$$

$\Rightarrow$ $Y_{lm}(\theta,\varphi)$ – задаёт вид „электронного облака“



$m: -l, \dots 0, \dots l$

Y:



Итак,

Энергия эл-на зависит от глав. кв. числа: $E_n = -\frac{me^4}{2\hbar^2}\cdot\frac{Z^2}{n^2}$

$n = 1, 2, 3, \ldots$

Для данного n:

$\Rightarrow$ $\ell = 0, 1, 2, \ldots, n-1$ всего $(2\ell+1)$ знач-е

в спектроскопии: $s, p, d, f, \ldots$

Для заданного ℓ $\Rightarrow$

$m = -\ell; -\ell+1, \ldots -1, 0, 1, \ldots \ell-1, \ell$

Видно, что $\forall$ собствен. знач-ю энергии E_n соответствует несколько ф-й $\psi_{n\ell m}$, различающихся по ℓ и m

$\Rightarrow$ атом имеет одну энергию, находясь в разных состояниях

Опр: 1) Вырожденные состояния - ...

2) Кратность вырожд-я уровня - ...

Для водорода, число различн. сост-й, соответств-х заданному n:

$$\sum_{\ell=0}^{n-1}\sum_m = \sum_{\ell=0}^{n-1}(2\ell+1) = n^2$$

#

E_n	$\psi_{n\ell m}$	n	ℓ	m
E_1	ψ_{100}	1	0	0
E_2	ψ_{200}			
	ψ_{21-1}			
	ψ_{210}			
	ψ_{211}			

§ Магн. момент атома. Опыт Штерна и Герлаха.

$$\underline{\underline{\vec{M} = \vec{L}}}$$