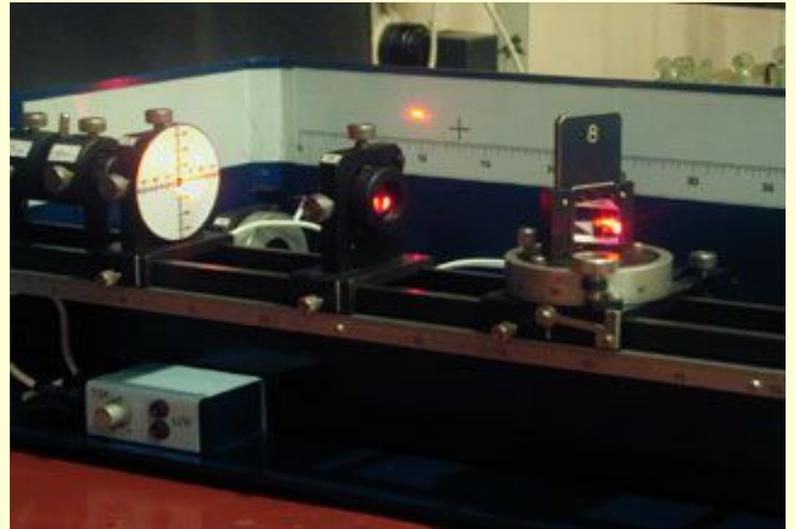


Оптика и квантовая физика

для студентов
2 курса ФТФ и ГГФ



Кафедра общей физики



Основы физики атома

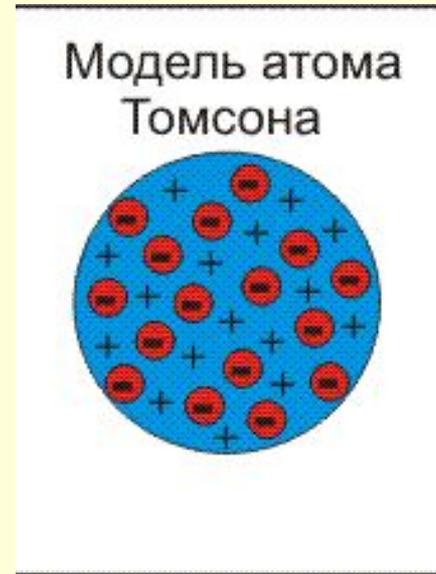
- Модель атома Томсона
- Опыты Резерфорда. Ядерная модель атома
- Линейчатые спектры атомов. Формула Бальмера. Комбинационный принцип Ритца
- Постулаты Бора. Принцип соответствия
- Опыт Франка-Герца
- Квантовые числа одноэлектронного атома и их физический смысл
- Принцип Паули. Фермионы и бозоны
- Рентгеновское излучение



Модель атома Томсона

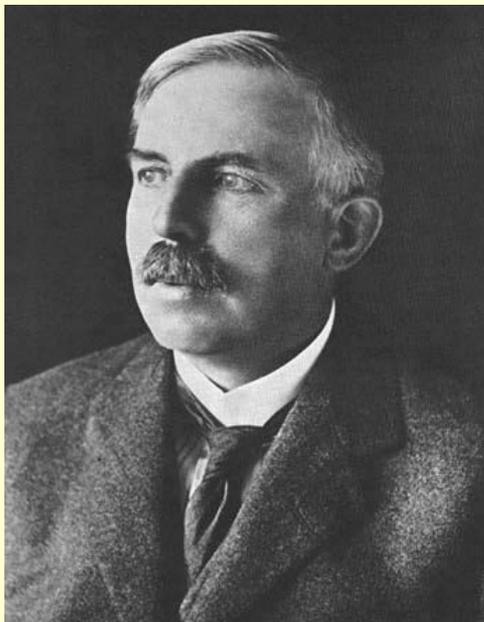


Сэр Джозеф Джон Томсон (1856 — 1940) — английский физик, открывший электрон, лауреат Нобелевской премии по физике 1906 года.



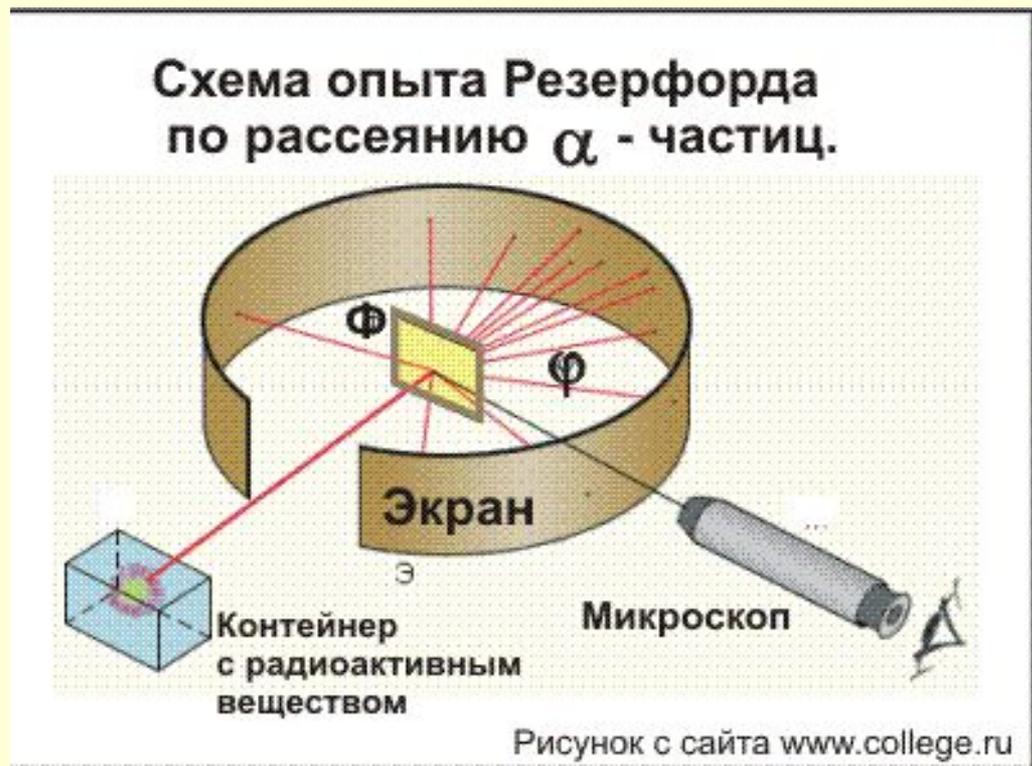
Томсон предположил, что атомы состоят из положительно заряженной сферы, в которую вкраплены электроны. Эта модель атома получила среди ученых прозвище "сливовый пудинг", хотя не менее похожа и на булочку с изюмом (где "изюминки" - это электроны), или на "арбуз" с "семечками" - электронами.

Модель атома Резерфорда



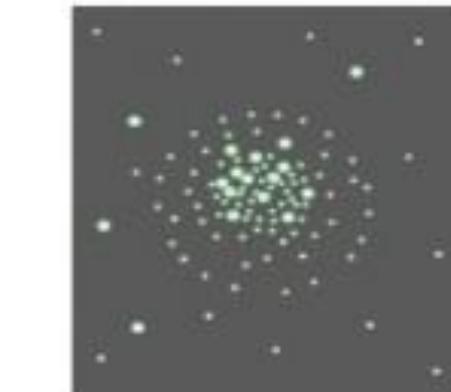
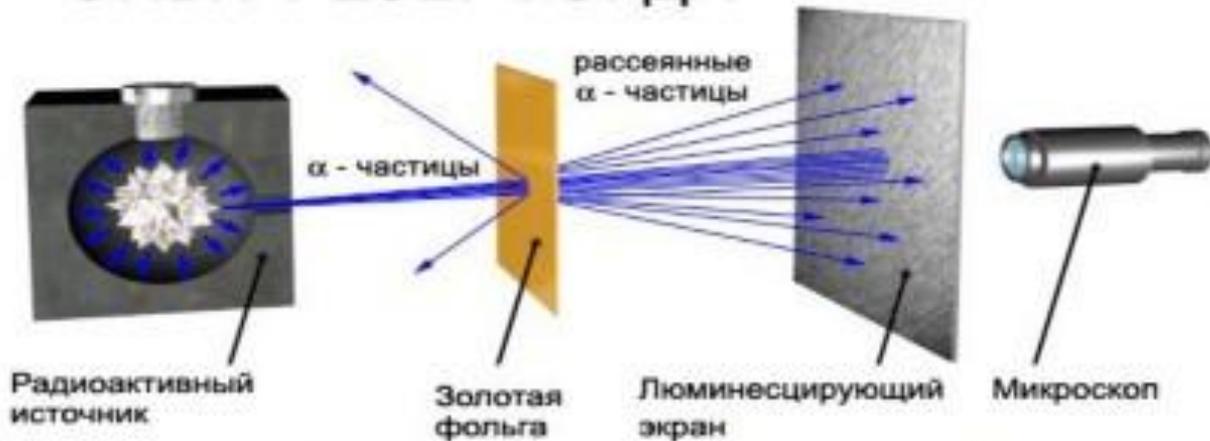
Эрнест Резерфорд
Ernest Rutherford
1871 - 1937

Английский физик, один из создателей учения о радиоактивности и строении атома. Предложил (1911) планетарную модель атома. Ноб. пр. по химии (1908).



Модель атома Резерфорда

ОПЫТ РЕЗЕРФОРДА



Каждая вспышка вызывается ударом α - частицы об экран

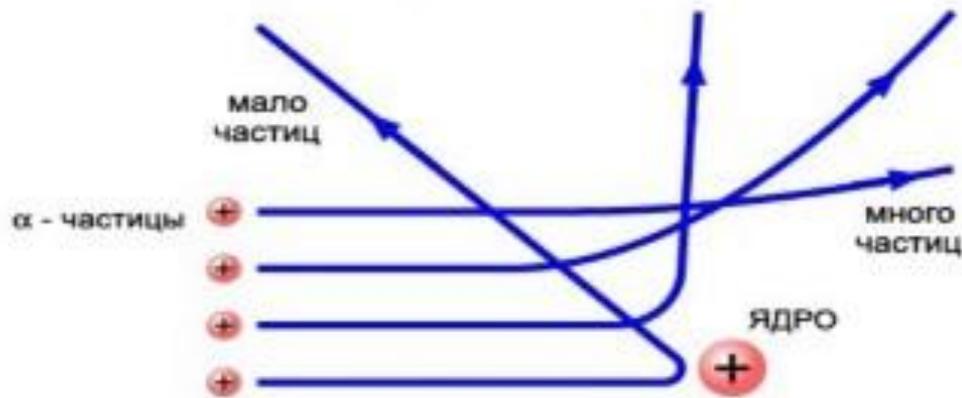
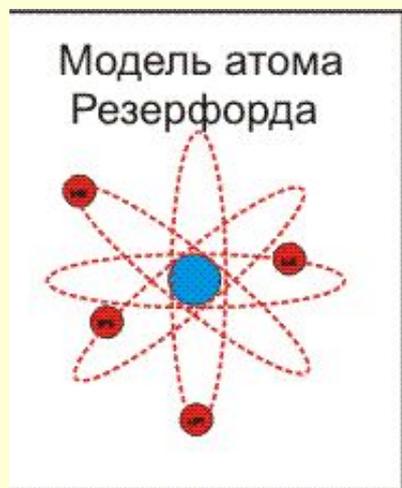
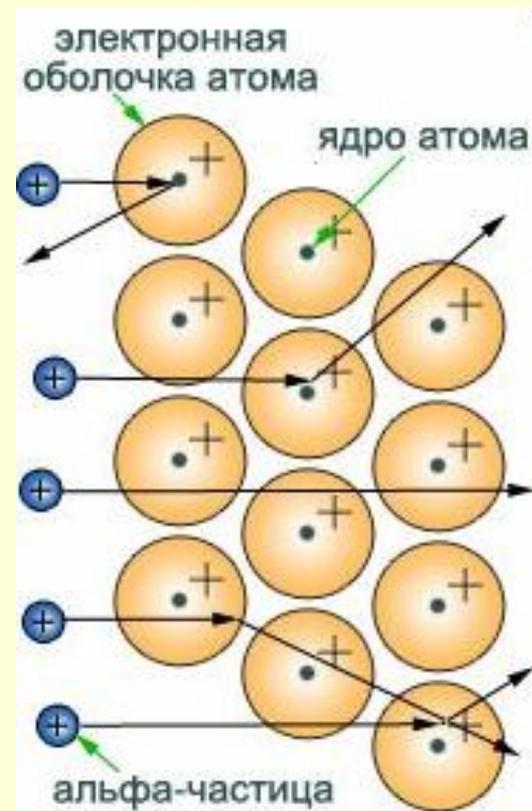
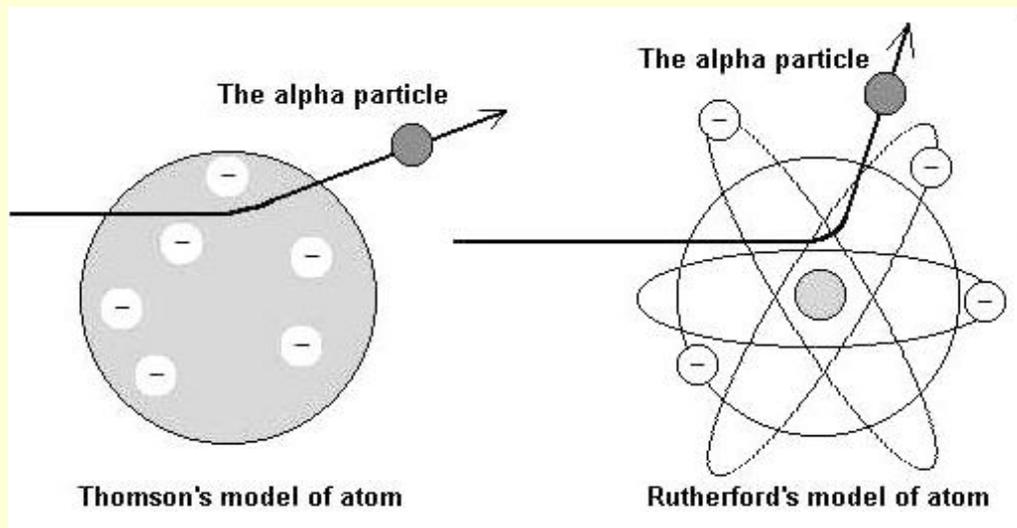


СХЕМА ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ α - ЧАСТИЦ С ЯДРОМ

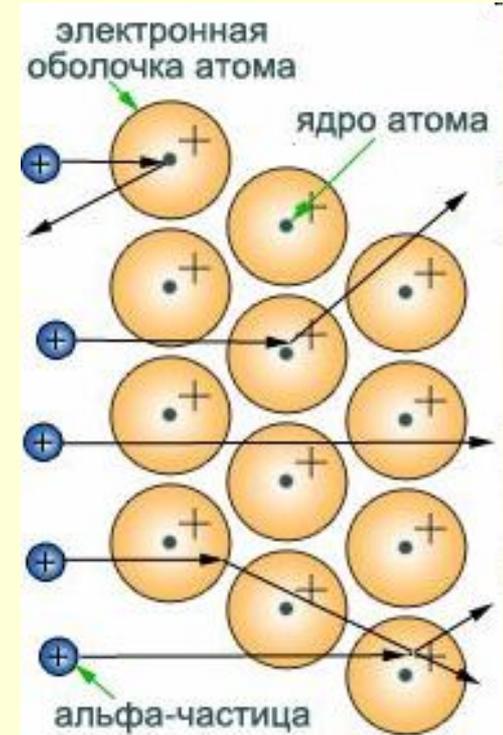
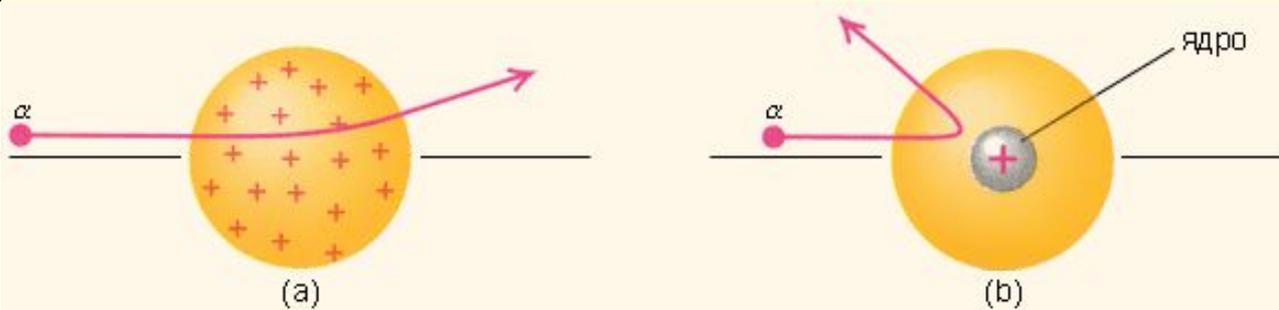
ДОПОЛНИТЕЛЬНЫЕ СВЕДЕНИЯ



Модель атома Резерфорда



Модель атома Резерфорда



Результаты:

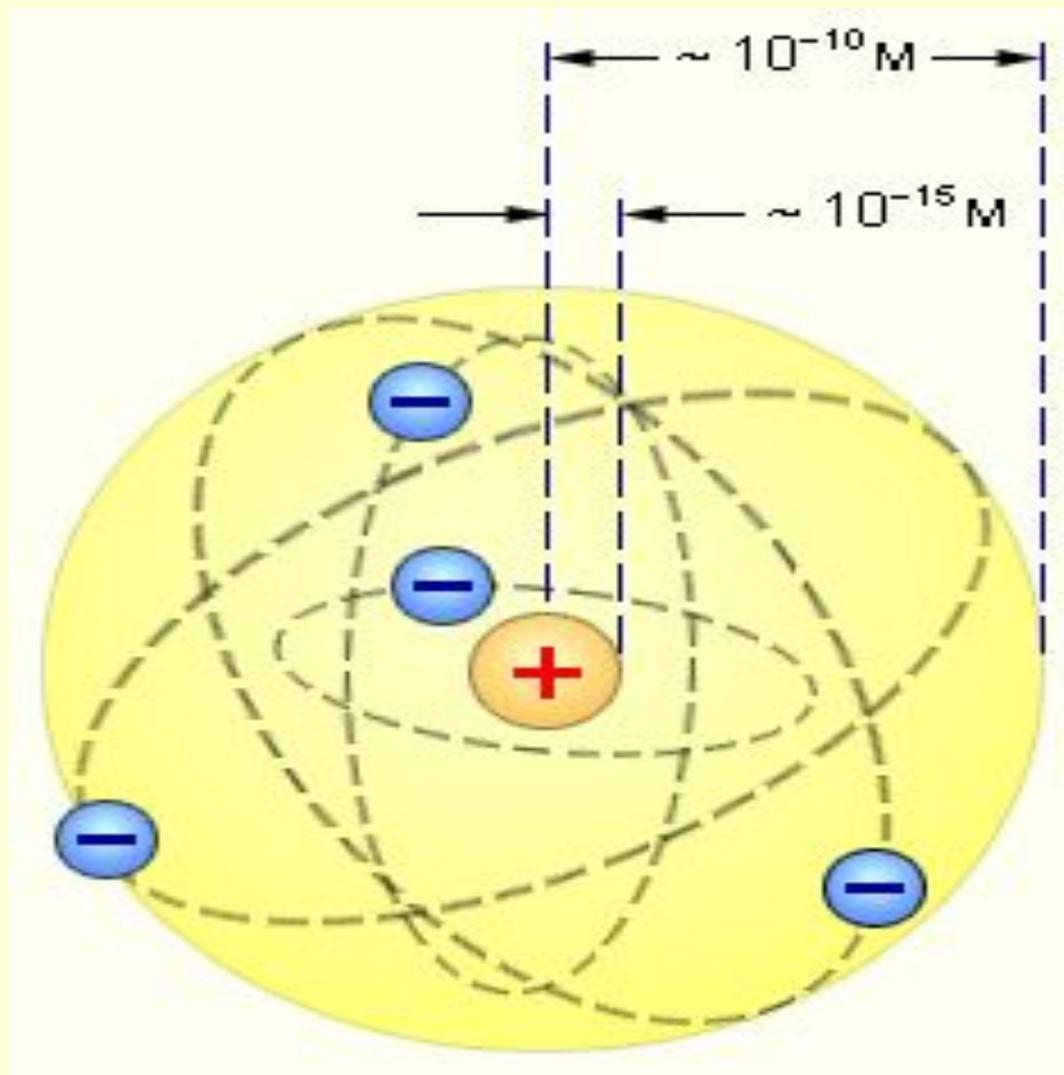
- Почти все α -частицы проходят через фольгу практически не отклоняясь.
- Небольшая часть α -частиц (0,1%) рассеивалась на углы, большие 90 и 180 град.

Выводы:

- ✓ Атом практически “пустой”: его масса и положительный заряд сосредоточены в ядре, размеры которого 10^{-15} м. Масса ядра 99,95 % массы атома.
- ✓ Положительный заряд экранируется отрицательно заряженными электронами, расположенными вокруг него.
- ✓ Плотность ядерного вещества $\rho \approx 10^{15}$ г/см³.



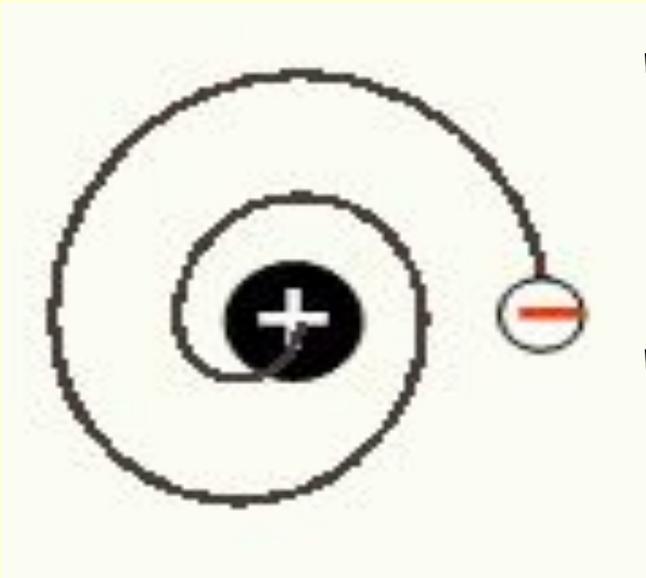
Планетарная модель Резерфорда



Затруднения модели Резерфорда

$$F_{\text{цс.}} = F_{\text{К}}$$

$$mV^2/r = ke^2 / r^2$$



- ✓ Уравнение движения содержит два неизвестных: r и V .

Т.е., существует бесчисленное множество значений радиуса и соответствующих ему значений скорости (а значит, и энергии), удовлетворяющих этому уравнению.

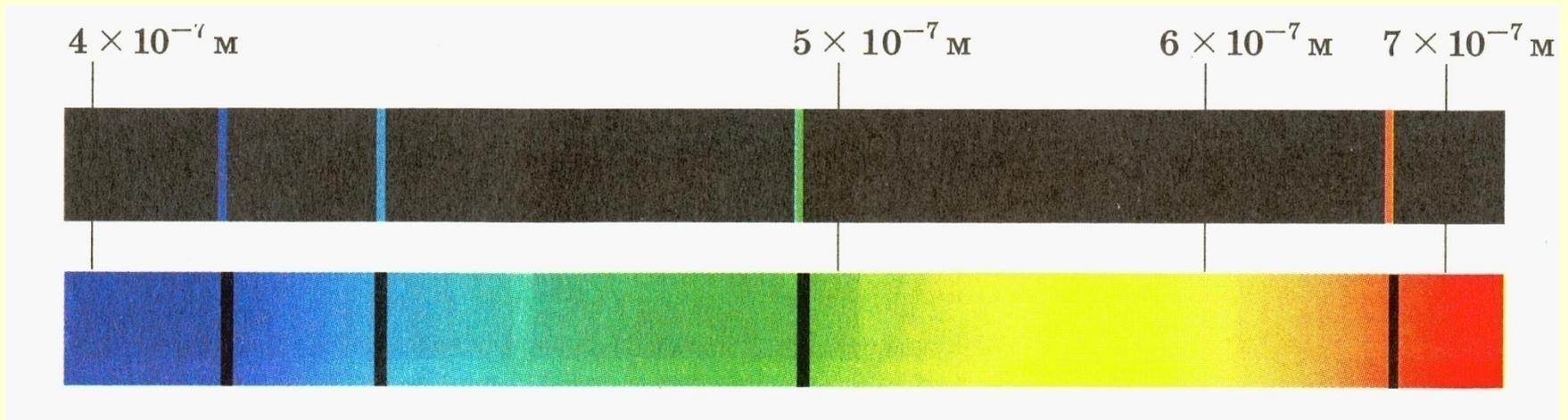
- ✓ Величины r , V , E могут меняться непрерывно. Движущийся с ускорением заряд должен излучать энергию и испускать непрерывный спектр.

- ✓ За время 10^{-8} с все электроны в атоме должны растратить энергию и упасть на ядро.

! Но атом устойчив, а спектры атомов – линейчатые.



Линейчатые спектры атомов. Формула Бальмера



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

- ✓ Длинноволновая граница серии: $n = m+1$
- ✓ Коротковолновая граница : при $n \rightarrow \infty$.

Формула Бальмера

$R = 3,29 \cdot 10^{15}$ Гц – постоянная Ридберга.

Для ультрафиолетовой серии (серия Лаймана) $m = 1$, $n = 2, 3, 4, \dots$.

Для серии Бальмера $m = 2$, $n = 3, 4, 5, \dots$.

серия Пашена $\nu = R \left(\frac{1}{3^2} - \frac{1}{n^2} \right)$ ($n=4, 5, 6, \dots$);

серия Брэкета $\nu = R \left(\frac{1}{4^2} - \frac{1}{n^2} \right)$ ($n=5, 6, 7, \dots$);

серия Пфунда $\nu = R \left(\frac{1}{5^2} - \frac{1}{n^2} \right)$ ($n=6, 7, 8, \dots$);

серия Хэмфри $\nu = R \left(\frac{1}{6^2} - \frac{1}{n^2} \right)$ ($n=7, 8, 9, \dots$).

Комбинационный принцип Ритца

Согласно экспериментальным данным, полученным к концу XIX века, частоты спектральных линий данного атома

$$\omega_{nn'} = T(n) - T(n')$$

где $T(n)$ - функция целого числа (спектральный терм), $n=1,2,3,\dots$. Это соотношение выражает комбинационный принцип Ритца (W. Ritz). В частности, для спектра излучения атома водорода Бальмер (J. Balmer) в 1885 г. эмпирически нашел простую формулу

$$\omega_{nn'} = R \left(\frac{1}{n'^2} - \frac{1}{n^2} \right),$$

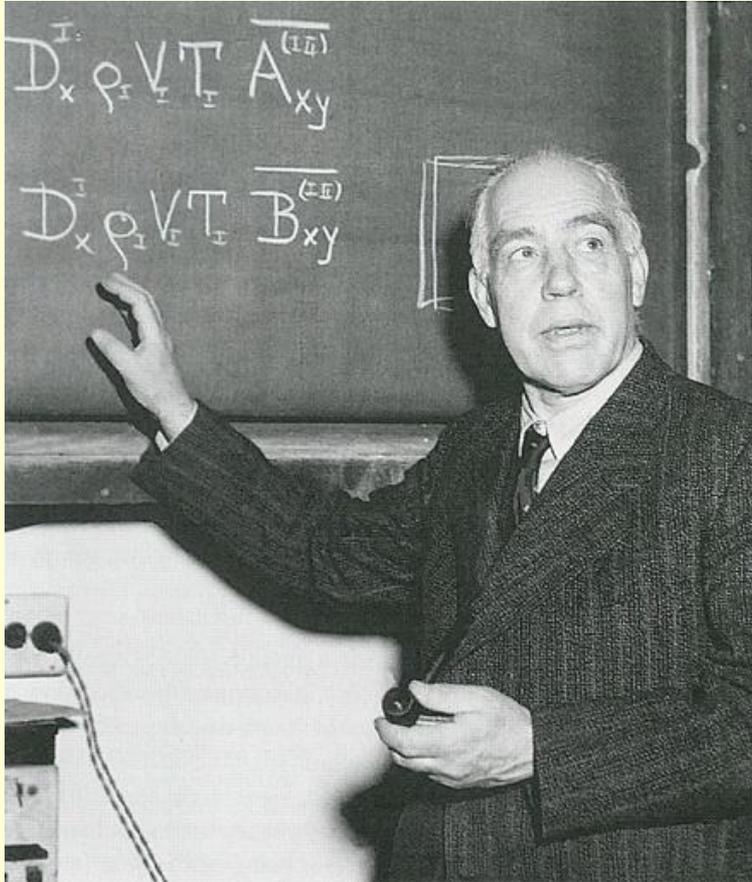
где R - постоянная Ридберга (J. Rydberg).

В классической теории для периодического движения заряженных частиц частоты излучения кратны основной частоте:

$$\omega_n = n\omega_0, \quad \omega_0 = \frac{2\pi}{T},$$

T - период. Таким образом, эта теория не может объяснить комбинационный принцип.

Модель атома Бора. 1913 г.



Нильс Бор (1885-1962) — датский физик, один из создателей современной физики. Основатель и руководитель Института теоретической физики в Копенгагене (Институт Нильса Бора); создатель мировой научной школы; иностранный член АН СССР (1929). В 1943-45 работал в США.

Нильс Бор создал теорию атома, в основу которой легли планетарная модель атома, квантовые представления и предложенные им Бора постулаты. Важные работы по теории металлов, теории атомного ядра и ядерных реакций. Труды по философии естествознания. Активный участник борьбы против атомной угрозы. Нобелевская премия (1922).



Постулаты Бора

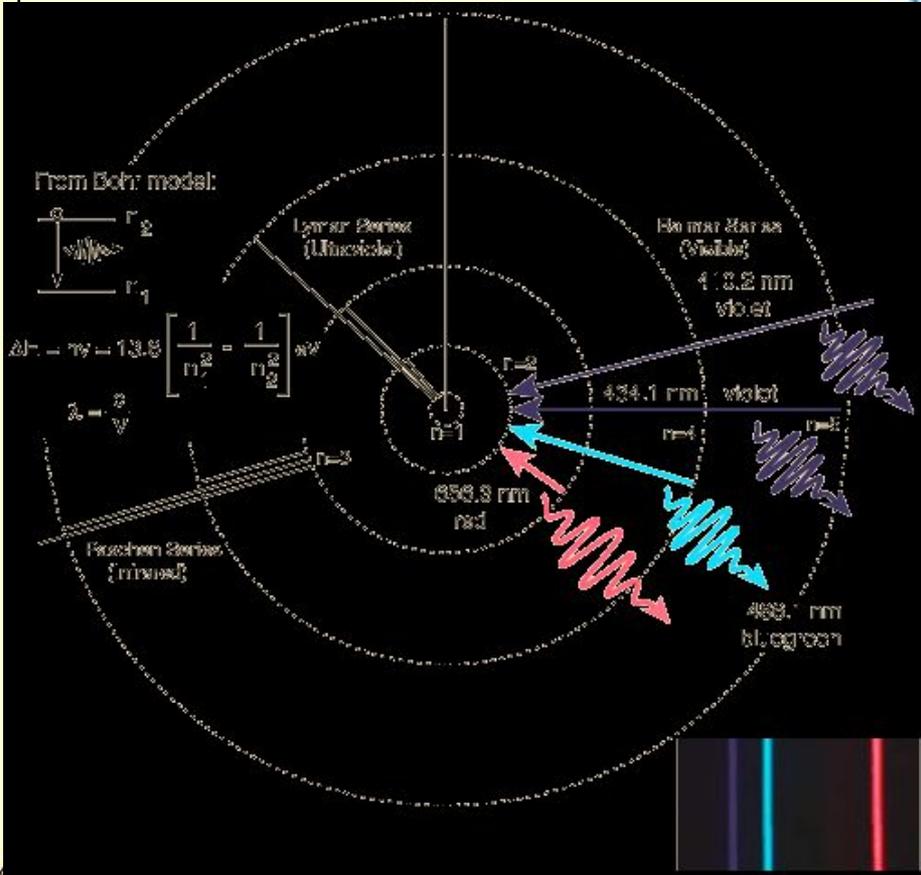


Классическая траектория
электрона в атоме

Первый постулат Бора



Атом может находиться не во всех состояниях, допустимых классической механикой, а только в некоторых избранных - стационарных состояниях, характеризуемых дискретными значениями энергии E_1, E_2, E_3, \dots . В этих состояниях атом не излучает.

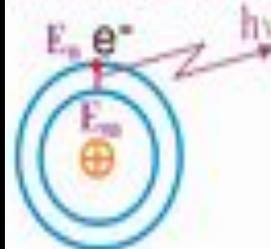


Второй постулат Бора (правило квантования орбит)



$$mvr = n\hbar \quad (n = 1, 2, 3, \dots)$$

Третий постулат Бора (правило частот)

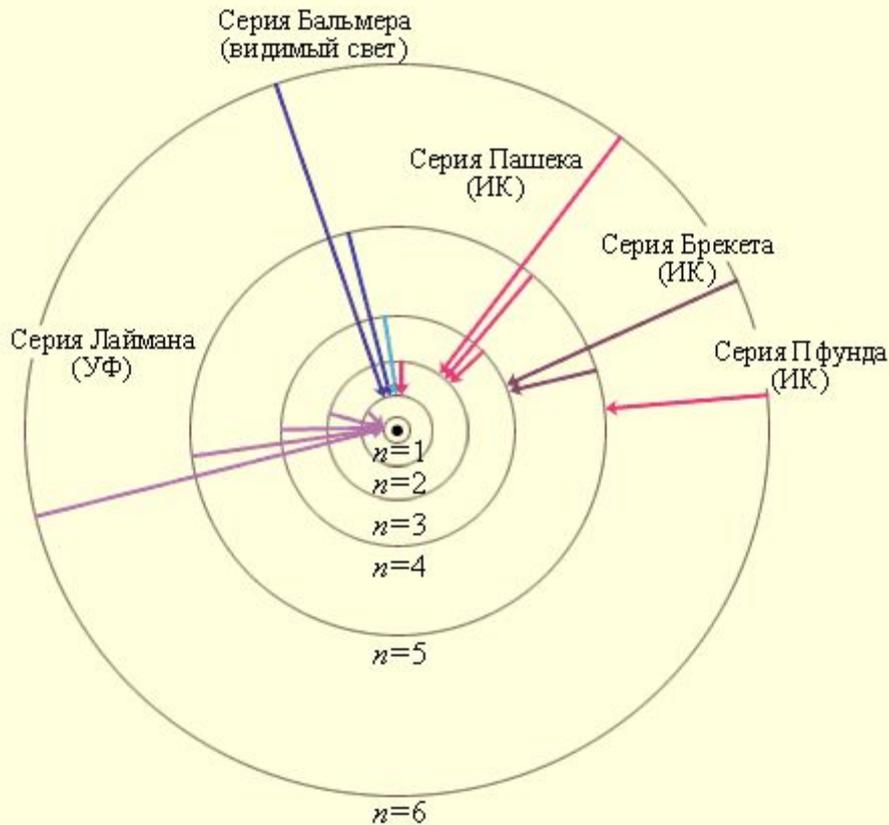


$$E_n - E_m = \hbar\omega$$

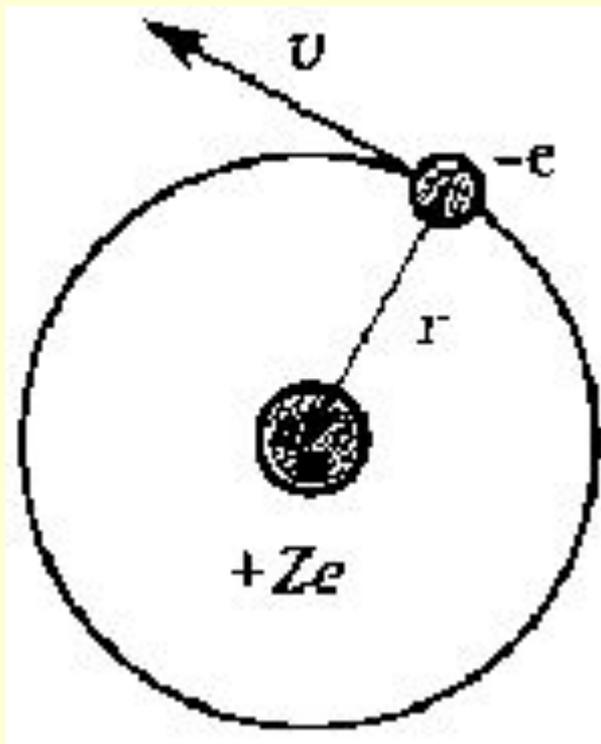
$$E_n - E_m = h\nu$$

Постулат стационарных состояний

Атомная система находится в **стационарных** состояниях, каждому из которых соответствует определенная энергия E_n . В стационарных состояниях атом не излучает.



Условие квантования момента импульса (правило орбит)



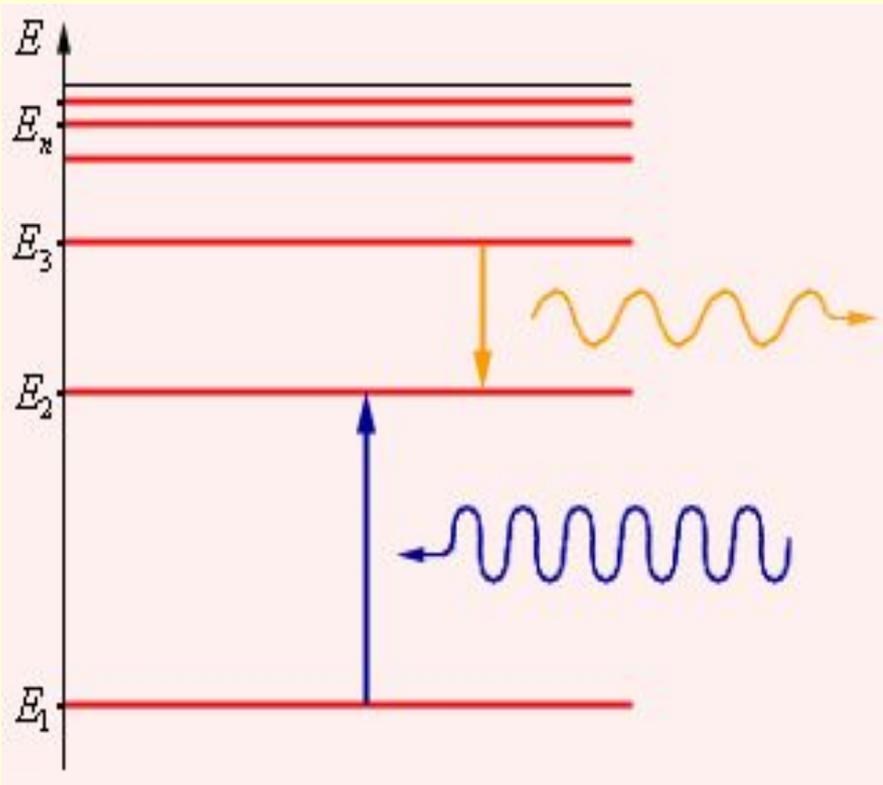
Момент импульса
электрона, вращающегося
вокруг ядра, может
принимать только
дискретные значения,
кратные постоянной
Планка:

$$mvr = n\hbar$$

$$\hbar = h/2\pi$$



Постулат частот



При переходе атома из одного стационарного состояния с энергией E_n в другое стационарное состояние с энергией E_m излучается (поглощается) квант, энергия которого равна

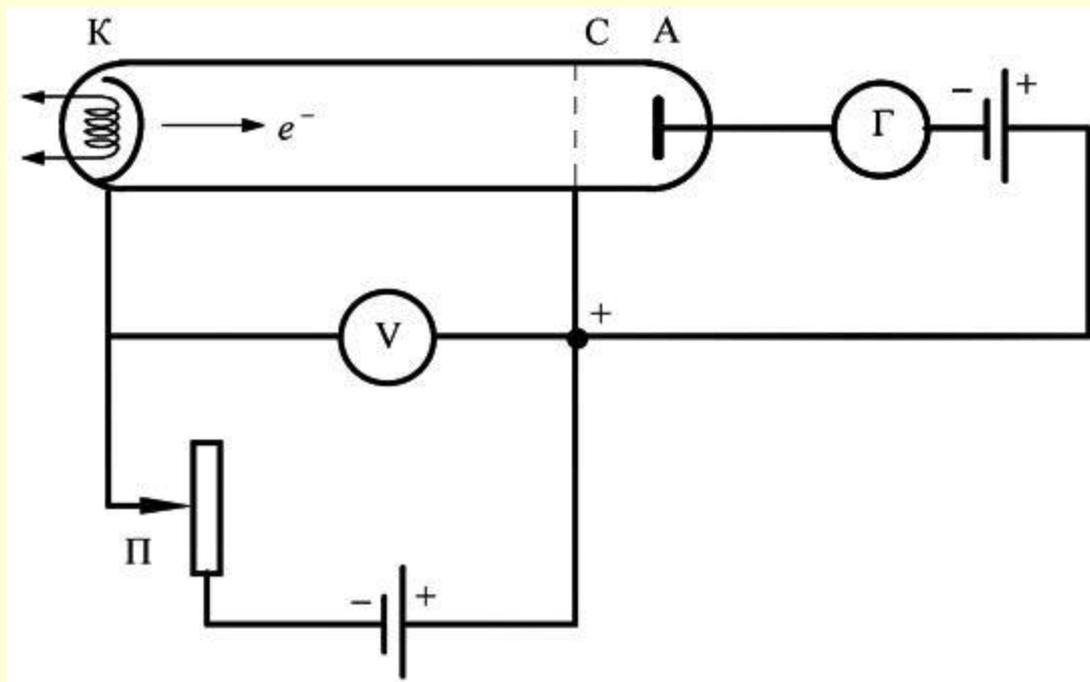
$$h\nu = E_m - E_n \quad \text{или}$$

$$\hbar\omega = E_m - E_n$$



Опыт Франка-Герца

1913 г



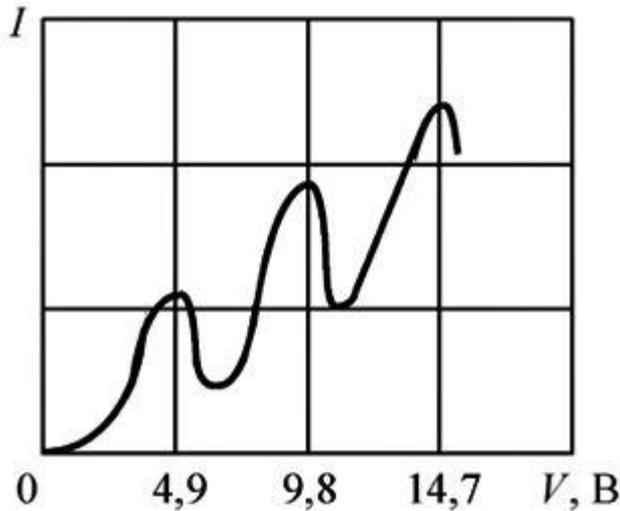
Трехэлектродная лампа заполнена газом, например, парами ртути под давлением 1 мм рт. ст.

Сетка С имеет положительный потенциал $U_{\text{уск}}$ относительно катода К и играет роль ускоряющего электрода.

Между сеткой и анодом поле тормозящее ($U_{\text{т}} \sim 0,5 \text{ В}$)



Опыт Франка-Герца



ВАХ для паров ртути

Минимальная энергия, необходимая для возбуждения атомов ртути ΔE_1 , деленная на заряд электрона, называется **потенциалом возбуждения** $U_1 = \Delta E_1/e$.

При малых напряжениях ($U_{\text{уск}} < 4.9$ В для ртути) соударения электронов с атомами упругие:

Кинетическая энергия электронов

$$T = e U_{\text{уск}} < \Delta E_1, \quad U_{\text{уск}} < U_1$$

При $T \sim 4.9$ эВ происходят неупругие соударения, и электроны, отдавшие атому энергию, не могут преодолеть задерживающий промежуток С - А.

$$U_{\text{уск}} \sim U_1 \quad \Delta E_1 \sim 4.9 \text{ эВ}$$

$$U_2 = 2U_1 = 9,8 \text{ эВ}, \quad U_3 = 3U_1 = 14,7 \text{ эВ}$$

Опыт Франка-Герца

Лампа испускает ультрафиолетовый свет.
Излучение начинается, как только разность потенциалов между катодом и сеткой достигает значения 4,9 В.

$$\varepsilon = \Delta E = 4,9 \text{ эВ} = 7,84 \cdot 10^{-19} \text{ Дж}$$

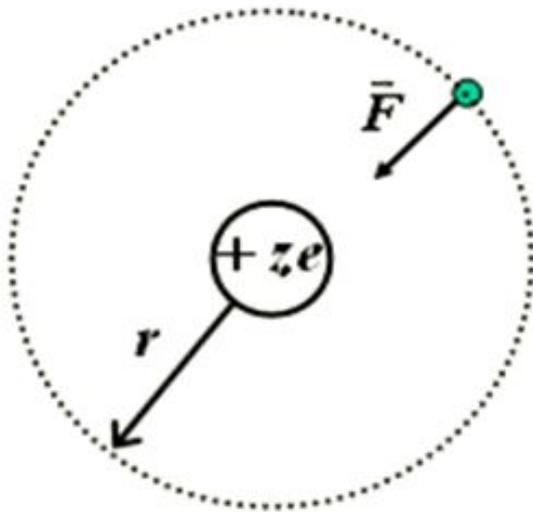
$$\lambda = \frac{hc}{\varepsilon} = \frac{6,62 \cdot 10^{-34} \cdot 3 \cdot 10^8}{7,84 \cdot 10^{-19}} = 2,53 \cdot 10^{-7} \text{ м}$$

Такое излучение объясняется тем, что возбужденные электронными ударами атомы ртути возвращаются в основное состояние путем испускания излучения с длиной волны $\lambda = hc/\Delta T = 253 \text{ нм}$.

Проведем опыт <http://www.teachmen.ru/work/lectureFG/>



Модель атома Бора



1. Радиусы орбит

$$mvr = n\hbar \quad v = \frac{n\hbar}{mr}$$

$$\frac{mv^2}{r} = \frac{Ze^2k}{r^2} \quad \longrightarrow \quad \frac{mn^2\hbar^2}{rm^2r^2} = \frac{Ze^2k}{r^2}$$

$$r_n = \frac{\hbar^2}{k m Z e^2} n^2$$

$$r_1 = 5,29 \text{ нм}$$

2. Энергия стационарных состояний

$$E = \frac{mv^2}{2} - \frac{Ze^2k}{r} = -\frac{Ze^2k}{2r}$$

$$\frac{mv^2}{2} \times \frac{r}{r} = \frac{mv^2}{r} \frac{r}{2} = \frac{Ze^2k}{2r}$$

$$E_n = -\frac{mZ^2e^4k^2}{2\hbar^2} \cdot \frac{1}{n^2}$$



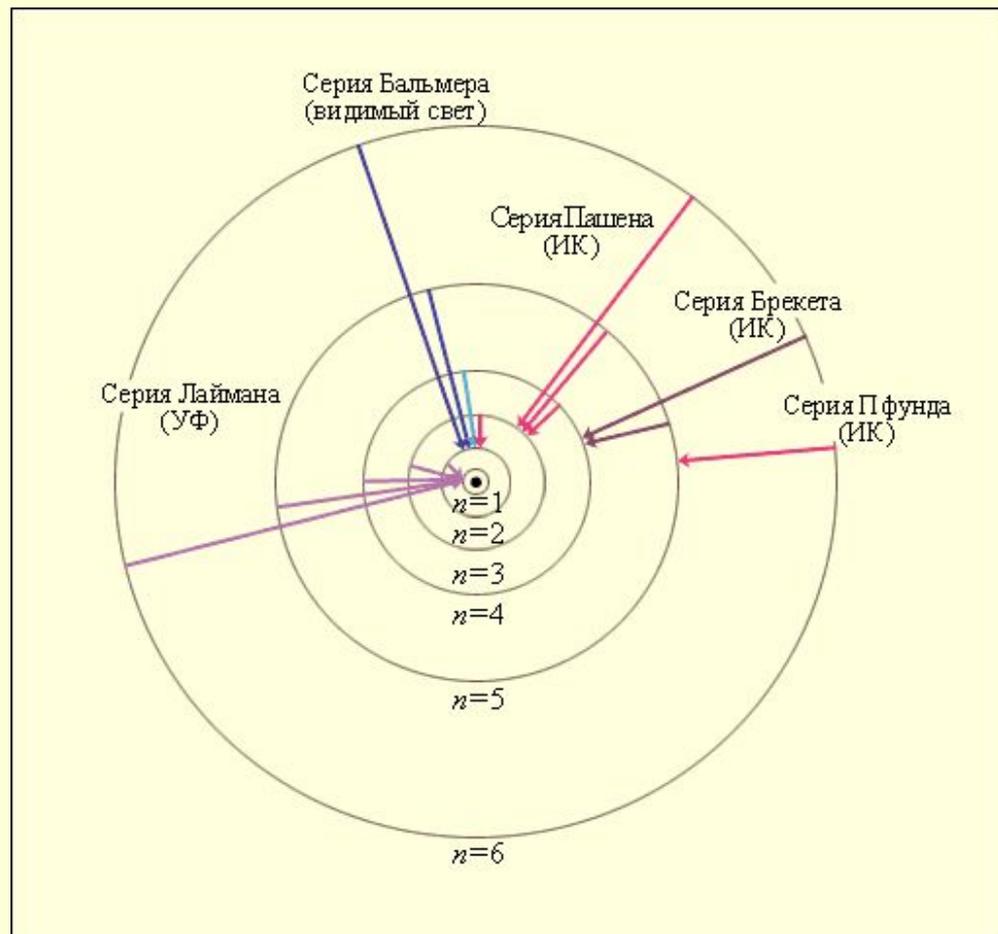
Атом водорода по Бору

$$r_n = \frac{\varepsilon_0 \hbar^2}{\pi m_e e^2} n^2.$$

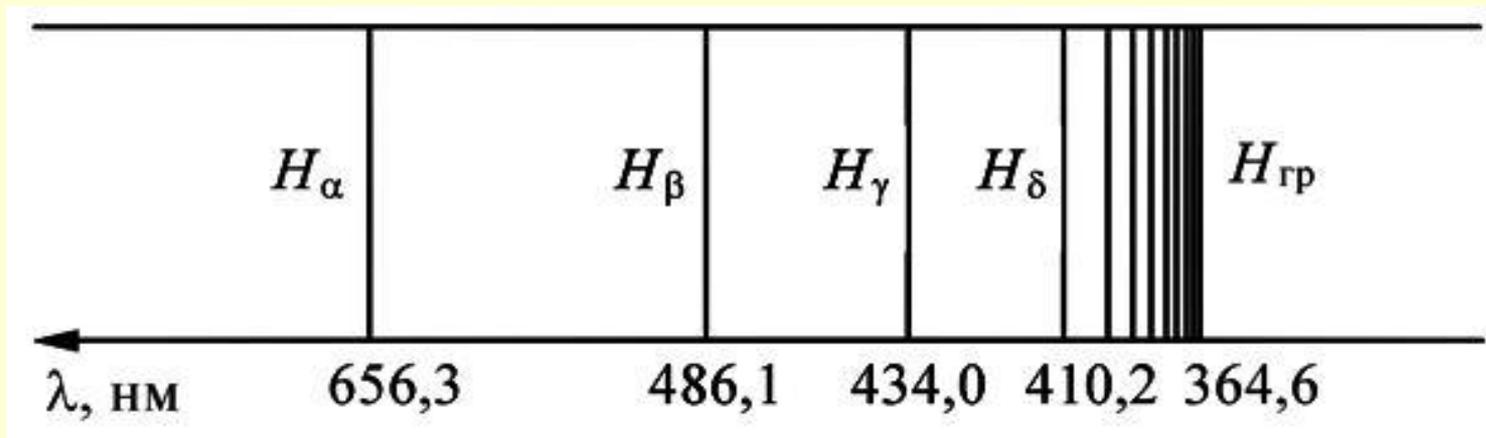
$$r_1 = a_0 = \frac{\varepsilon_0 \hbar^2}{\pi m_e e^2} = 5,29 \cdot 10^{-11} \text{ м.}$$

$$E_n = - \frac{m_e e^4}{8 \varepsilon_0^2 \hbar^2} \cdot \frac{1}{n^2}.$$

$$\nu_{nm} = \frac{\Delta E_{nm}}{h} = \frac{m_e e^4}{8 \varepsilon_0^2 \hbar^3} \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right).$$



Спектральные закономерности

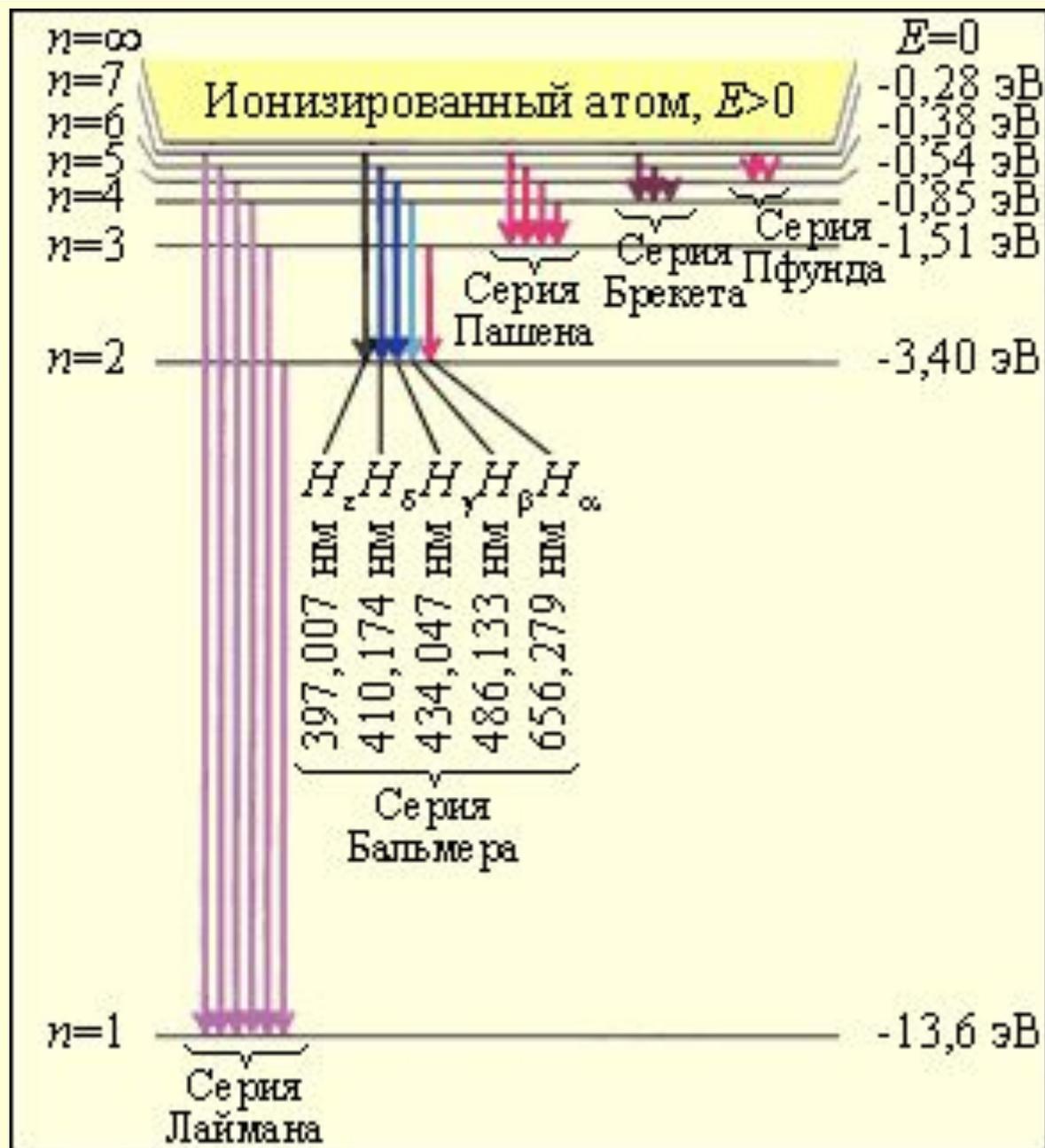


$$\nu_{nm} = \frac{\Delta E_{nm}}{h} = \frac{m_e e^4}{8\epsilon_0^2 h^3} \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right)$$

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

- Переходы на общий нижний уровень образуют серию.
- Переходы подчиняются правилам отбора $l = \pm 1$.
- Длинноволновая граница серии: $n=m+1$
- Коротковолновая граница серии: при $n \rightarrow \infty$.



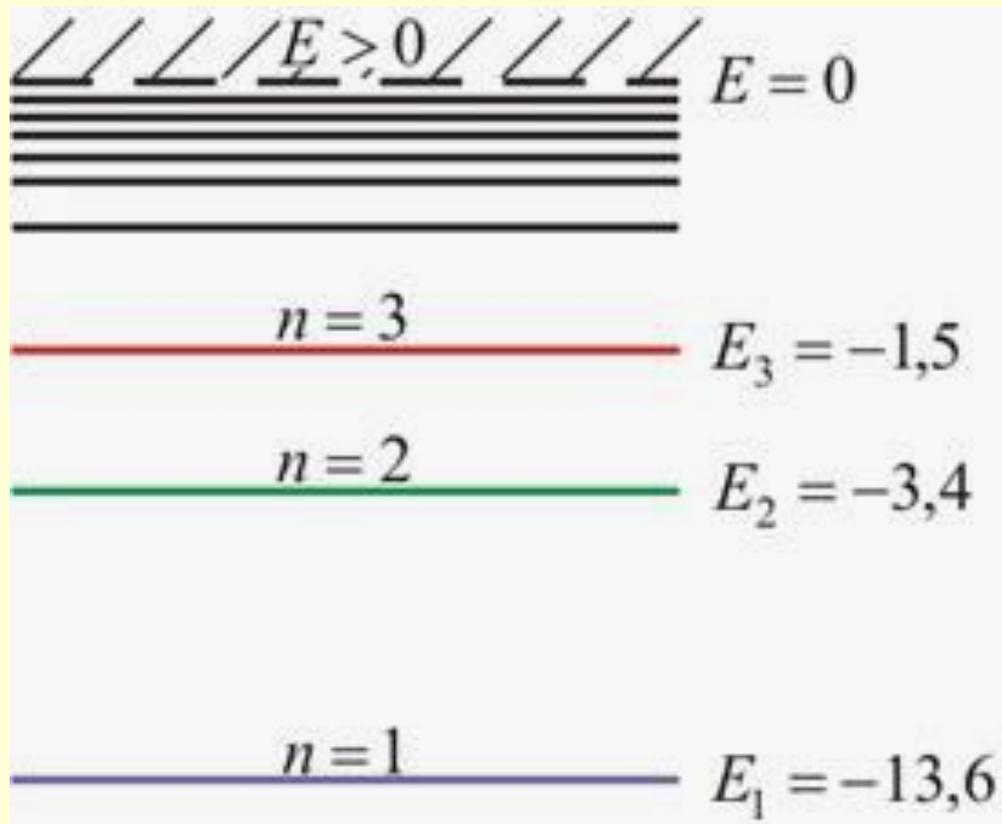


Выводы

1. В связанных состояниях скорость вращения, радиус орбиты и энергия электрона принимают дискретный ряд значений и полностью определяются величиной главного квантового числа n . Момент вращения квантуется всегда.
2. Энергия отрицательна.
3. Минимальное значение энергии не равно нулю.
4. Состояние с минимальной энергией ($n=1$) – основное. Остальные ($n>1$) – возбужденные.
5. Ближайший к основному уровень, с которого разрешен переход вниз, – *резонансный*.
6. Уровень, вероятность перехода с которого очень мала, – *метастабильный*.
7. При возрастании n уровни сближаются к границе, $n = \infty$
8. Первый возбуждённый уровень значительно ближе к границе ионизации, чем к основному состоянию.
9. Бесконечно много уровней имеет только уединённый атом. В реальной среде различные взаимодействия с соседними частицами приводят к тому, что у атома остаётся только конечное число нижних уровней.
10. Состояния с положительной энергией называют *свободными*; они не квантуются, и все параметры электрона в них, кроме момента вращения, могут принимать любые значения, не противоречащие законам сохранения.



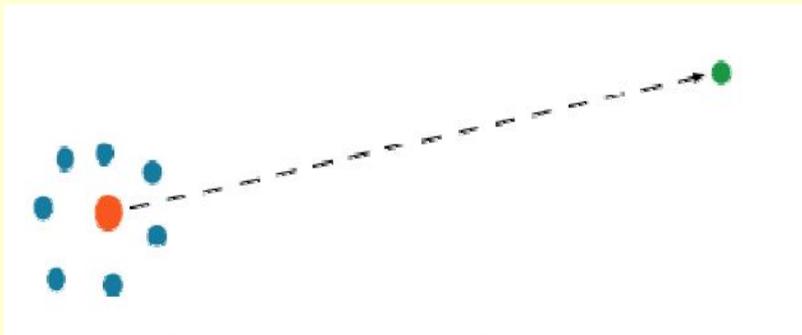
Энергетический спектр атома водорода



Последовательность энергетических уровней, определяемых главным квантовым числом n .



Принцип соответствия



Принцип соответствия законов микро- и макромира в квантовой механике, сформулированный Нильсом Бором в 1923 г., утверждает, что **классическую механику следует считать предельным случаем квантовой механики при определенных условиях.**

ПС вступает в силу на нечеткой границе между квантовой и классической механикой и демонстрирует, что в природе нет явных границ между явлениями

Квантовая механика отнюдь не отменяет и не подменяет собой классическую механику Ньютона, а лишь представляет собой предельный случай при переходе явлений в масштабы микромира.

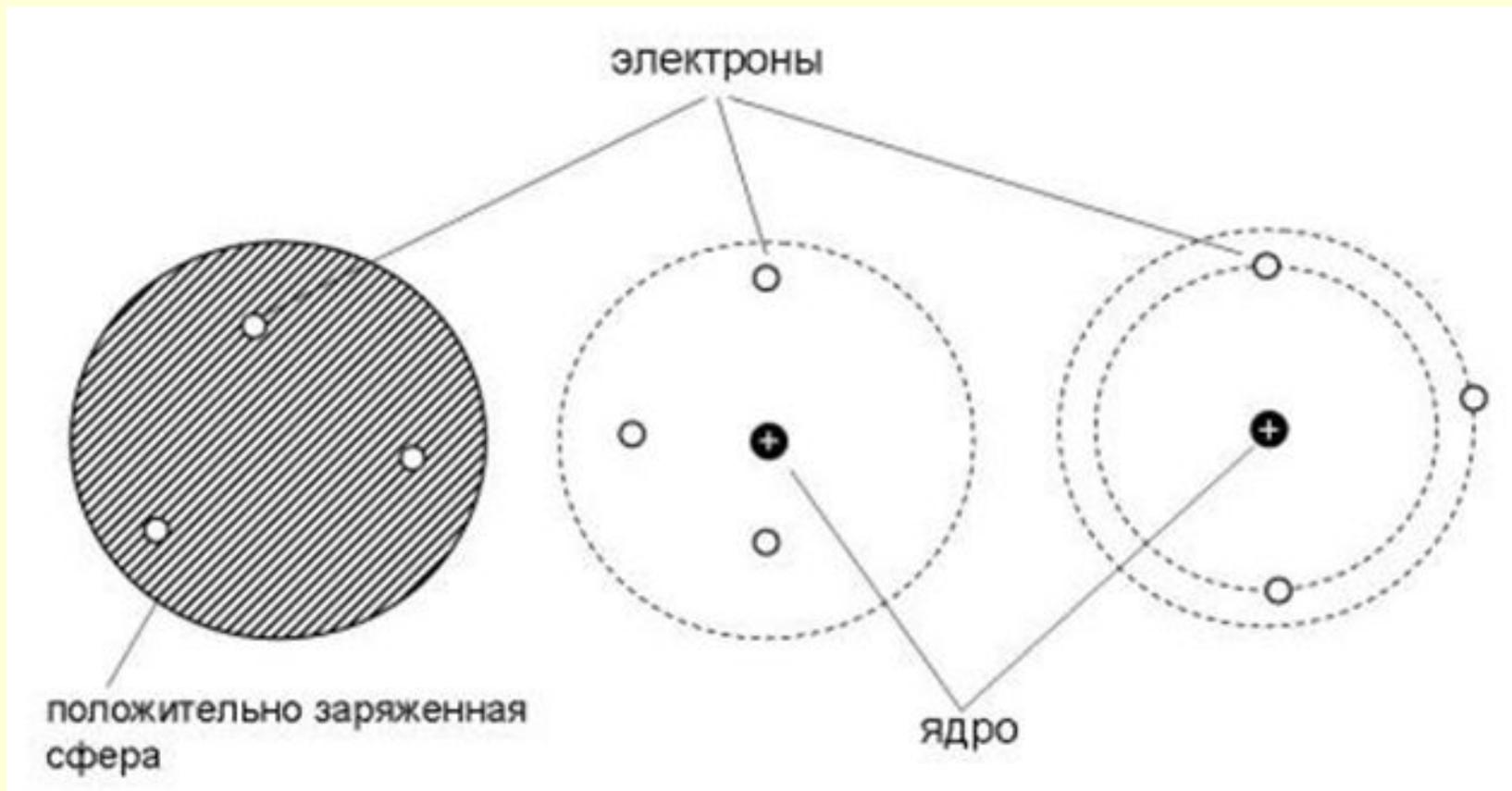


Принцип соответствия

- Состояния атома, в котором один из электронов находится на высоком энергетическом уровне, называют *высоковозбуждёнными*, или *ридберговскими*. Положение уровней возбуждённого электрона может быть описано в рамках модели Бора. Электрон с большим значением квантового числа n , далек от ядра и других электронов («оптический» электрон).
- При переходе между высокими ($n \gg 1$) соседними орбитами n и $n + 1$, частота $\omega_{n,n+1}$ излучаемого кванта энергии равна частоте ω_n вращения электрона на n -й орбите.
- Здесь и начинается «стирание различий» между квантовомеханической моделью атома, где электрон может находиться лишь в фиксированных энергетических состояниях, поглощать и испускать энергию фиксированными порциями (квантами) и, соответственно, обитать на строго определенных орбитах, и классической моделью атома, где электрон обладает произвольной энергией и движется по произвольным орбитам. Иными словами, на больших удалениях от ядра атом начинает представлять собой классическую систему, подчиняющуюся законам механики Ньютона.



Модели атома



Томсона

Резерфорда

*планетарная
модель Бора*



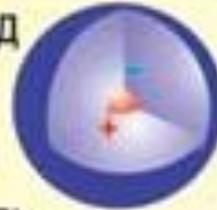
Модели атома

Д. ТОМСОН
1895



Модель
"Булка с изюмом"

Э. РЕЗЕРФОРД
1911



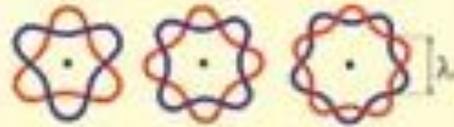
Ядерная модель

Н. БОР
1913



Планетарная модель

Л. ДЕ БРОЙЛЬ
1923



Волновая модель

Э. ШРЕДИНГЕР
1926



Квантово-механическая модель

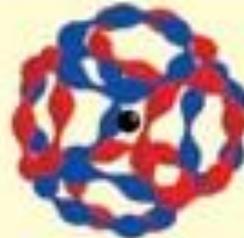


Орбитальная модель

К. СНЕЛЬСОН
1963



Кольцевая модель



Волногранная модель

Современная модель атома является развитием планетарной модели. Согласно этой модели, ядро атома состоит из положительно заряженных протонов и не имеющих заряда нейтронов и окружено отрицательно заряженными электронами. Однако представления квантовой механики не позволяют считать, что электроны движутся вокруг ядра по сколько-нибудь определённым траекториям (неопределённость координаты электрона в атоме может быть сравнима с размерами самого атома).

Выводы

1. Теория Бора имеет историческое значение:
 - пользуется классическими представлениями,
 - но основывается на квантовых постулатах.
2. Она показала неприменимость классической физики к атомным явлениям.
3. Применима только к расчету атома водорода и легких ионов с одним электроном.
4. Позволила теоретически вычислить постоянную Ридберга



Квантово-механическое описание атомов

- **Стационарное уравнение Шредингера для атома водорода**
- **Волновые функции и квантовые числа**
- **Эффект Зеемана**
- **Опыт Штерна и Герлаха**
- **Периодическая система элементов**
- **Правила отбора для квантовых переходов**

<http://fn.bmstu.ru/phys/bib/physbook/tom5/front.html>



Стационарное уравнение Шредингера для атома водорода

$$U(r) = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r},$$

Потенциальная энергия взаимодействия электрона с ядром, обладающим зарядом Ze

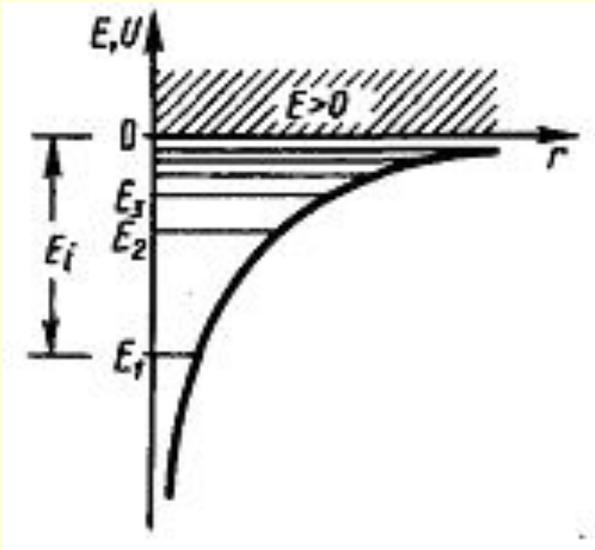
r — расстояние между электроном и ядром

Состояние электрона в атоме водорода описывается волновой функцией ψ , удовлетворяющей стационарному уравнению Шредингера

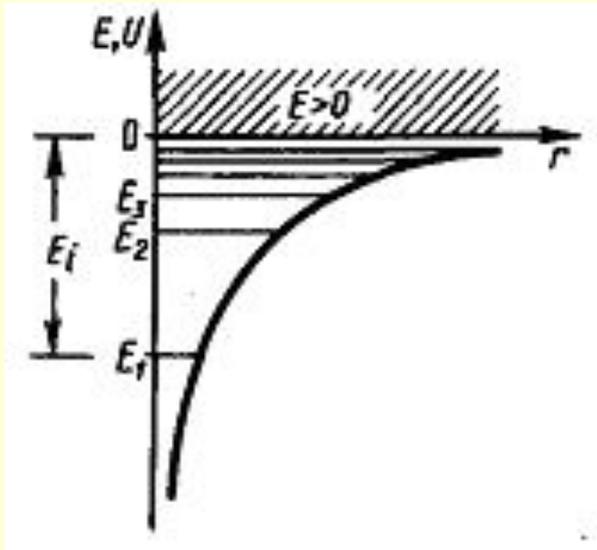
$$\Delta\psi + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E + \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) \psi = 0, \quad (1)$$

m — масса электрона,

E — полная энергия электрона в атоме



Стационарное уравнение Шредингера для атома водорода



Уравнения типа (1) имеют решения только для дискретного набора отрицательных значений энергии

$$E_n = -\frac{1}{n^2} \frac{Z^2 m e^4}{8 h^2 \epsilon_0^2} \quad (n=1, 2, 3, \dots),$$

E_1 — **основной** уровень, все остальные ($E_n > E_1, n = 2, 3, \dots$) — **возбужденные**

При $E < 0$ движение электрона является **связанным**, при $E > 0$ движение электрона является **свободным**.

$E > 0$ — **ионизованный атом**

Энергия ионизации атома водорода:

$$E_i = -E_1 = m e^4 / (8 h^2 \epsilon_0^2) = 13,55 \text{ эВ.}$$

Волновые функции и квантовые числа

Стационарному уравнению Шредингера

$$\Delta\psi + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E + \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) \psi = 0,$$

удовлетворяют собственные функции $\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi)$,
определяемые тремя квантовыми числами:
главным n , орбитальным l и магнитным m_l .

Главное квантовое число n

определяет энергетические уровни электрона в атоме
и может принимать любые целочисленные значения,
начиная с единицы: $n = 1, 2, 3, \dots$

$$E_n = - \frac{1}{n^2} \frac{Z^2 m e^4}{8 h^2 \epsilon_0^2} \quad (n = 1, 2, 3, \dots),$$

Волновые функции и квантовые числа

Орбитальное квантовое число l

определяет **момент импульса**
(механический орбитальный момент) электрона в атоме.

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

$l = 0, 1, \dots, (n - 1)$ при заданном n .

Движущаяся по классической орбите частица с определенной энергией может описываться как круговую орбиту, так и любую из бесконечного числа *эллиптических орбит*. Энергия частиц на каждой из таких орбит одна и та же, а *момент импульса* – различный.

Для данного значения энергии состояния круговая орбита имеет наибольший момент импульса. Наиболее вытянутая эллиптическая орбита имеет наименьший момент импульса.

В модели эллиптических орбит Зоммерфельда главное квантовое число n определяет только энергию состояния, а для характеристики орбитального момента импульса вводится новое квантовое число l

Волновые функции и квантовые числа

Квантовое число l определяет величину углового момента, но не дает его направление. В магнитном поле это направление является важным, так как орбитальный электрон также генерирует крошечное магнитное поле.

В любом эксперименте одновременно может быть измерена только одна компонента углового момента.

Магнитное квантовое число m_l

определяет **проекцию момента импульса электрона на заданное направление.**

Из решения уравнений Шредингера следует, что вектор L_l момента импульса электрона может иметь лишь такие ориентации в пространстве, при которых его проекция L_{lz} на направление z внешнего магнитного поля принимает квантованные значения, кратные \hbar :

$$L_z = m_l \hbar$$

$$m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l,$$

при заданном l . Всего $2l + 1$ значений.



Эффект Зеемана

Наличие квантового числа m_l приводит в сильном магнитном поле к расщеплению уровня с главным квантовым числом n на $2l + 1$ подуровней. Соответственно в спектре атома в сильном магнитном поле наблюдается расщепление спектральных линий.

Обнаружено в 1896 г. голландским физиком П. Зееманом (1865—1945).

Расщепление уровней энергии во внешнем электрическом поле, тоже доказанное экспериментально, называется **эффектом Штарка**.

Квантовые числа

Спиновое квантовое число s

описывает собственный угловой момент электрона, который называется спином.

Спин электрона

$$S = \sqrt{s(s+1)}\hbar$$

где $s = 1/2$ - спиновое квантовое число

Проекция спина на выделенное направление z

$$S_z = m_s \hbar$$

где m_s может принимать одно из двух значений

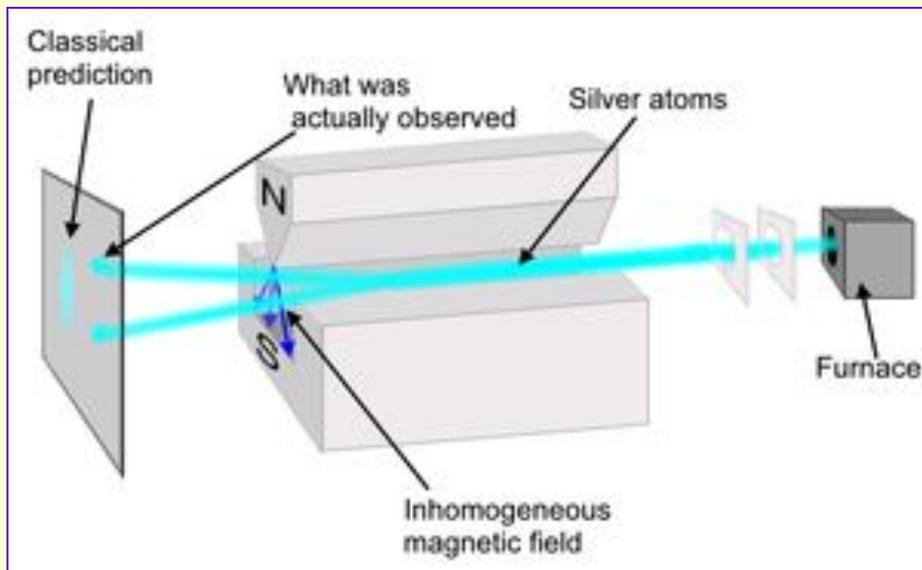
$$m_s = \pm \frac{1}{2}$$

Все частицы имеют спиновое квантовое число. Частицы с целым спином называются *бозонами* (фотон, мезоны), частицы с полуцелым спином – *фермионами* (протон, нейтрон, электрон, нейтрино и т.д.).

Спин и орбитальный момент импульса электрона объединяются в *полный момент импульса J* .

Опыт Штерна и Герлаха

1922



Опыт подтвердил наличие у атомов спина и факт пространственного квантования направления их магнитных моментов.

Узкий пучок атомов водорода, заведомо находящихся в s -состоянии, в неоднородном магнитном поле расщепляется на два пучка.

Схема установки, на которой Штерн и Герлах проводили свой эксперимент. Используются атомы серебра или др. металла.

Спин электрона (и всех других микрочастиц) — квантовая величина, у нее нет классического аналога; это внутреннее неотъемлемое свойство электрона, подобное его заряду и массе.

Выводы

Состояние электрона в атоме однозначно определяется набором четырех квантовых чисел:

главного n ($n = 1, 2, 3, \dots$),
орбитального l ($l = 0, 1, 2, \dots, n - 1$),
магнитного m_l ($m_l = -l, \dots, -1, 0, +1, \dots, +l$),
магнитного спинового m_s ($m_s = +1/2, -1/2$).

Принцип Паули: в одном и том же атоме не может быть более одного электрона с одинаковым набором четырех квантовых чисел n, l, m_l и m_s

два электрона, связанные в одном и том же атоме, различаются значениями по крайней мере одного квантового числа.

максимальное число электронов, находящихся в состояниях, определяемых данным главным квантовым числом, равно

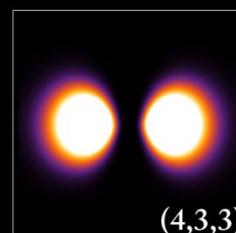
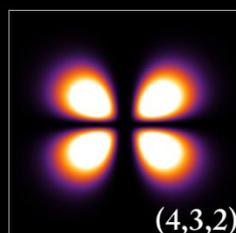
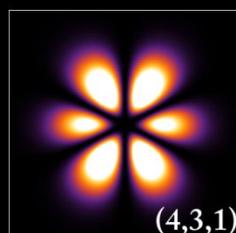
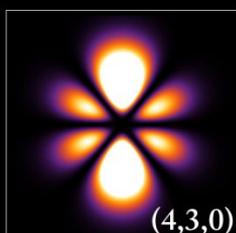
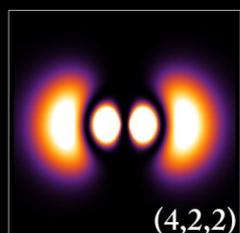
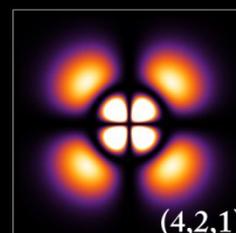
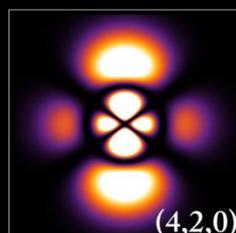
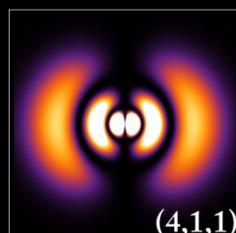
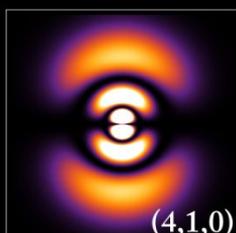
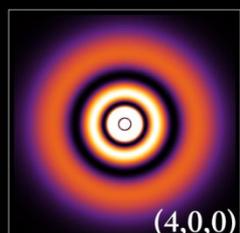
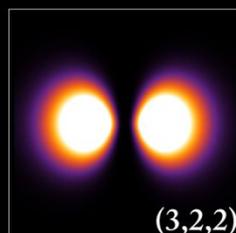
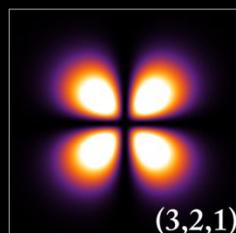
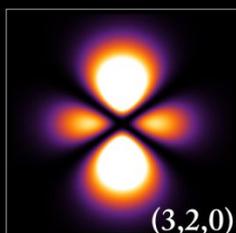
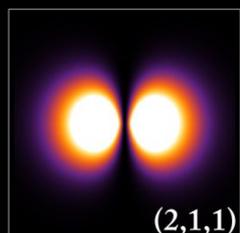
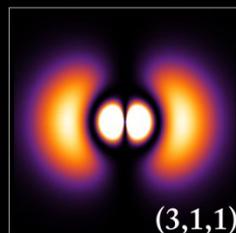
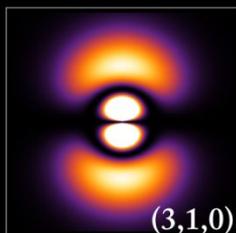
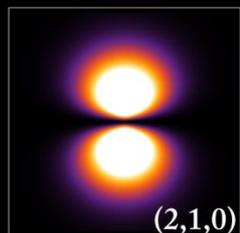
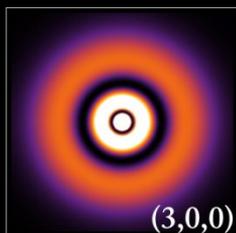
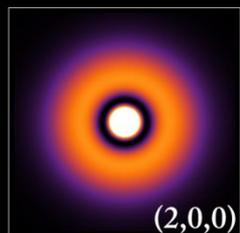
$$Z(n) = \sum_{l=0}^{n-1} 2(2l+1) = 2n^2.$$



Hydrogen Wave Function

Probability density plots.

$$\psi_{nlm}(r, \vartheta, \varphi) = \sqrt{\left(\frac{2}{na_0}\right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]}} e^{-\rho/2} \rho^l L_{n-l-1}^{2l+1}(\rho) \cdot Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$$



Радиальная электронная плотность вероятности в виде "облака", густота которого в разных точках пространства пропорциональна на этой плотности вероятности. Именно так, в виде облака плотности вероятности может быть представлен образ атома в квантовой теории.

Распределение электронов в атоме по состояниям

Совокупность электронов в многоэлектронном атоме, имеющих одно и то же главное квантовое число n , называется электронной оболочкой или слоем.

Вероятность обнаружения электрона в различных частях атома различна. Электрон при своем движении как бы «размазан» по всему объему, образуя электронное облако, плотность (густота) которого характеризует вероятность нахождения электрона в различных точках объема атома.

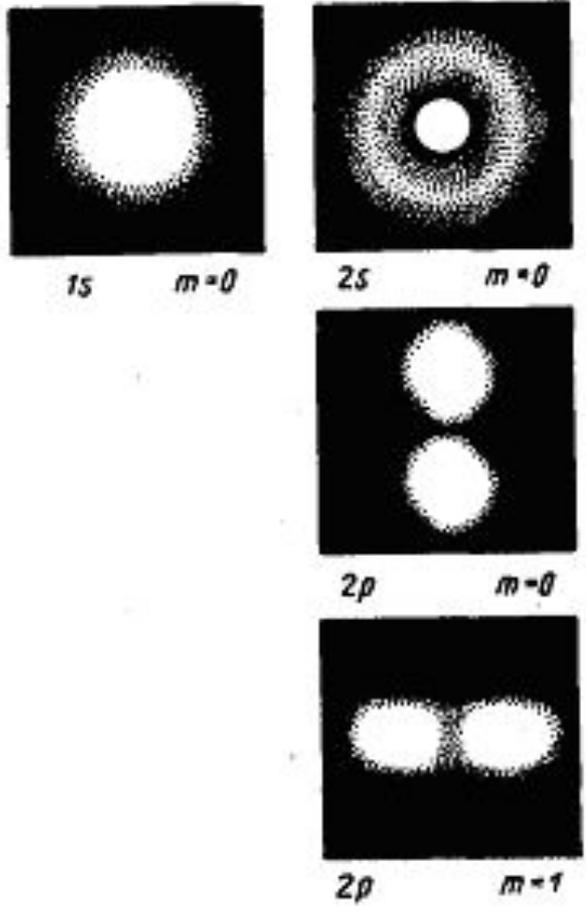
Область пространства, в которой высока вероятность обнаружить электрон, называют подоболочкой или орбиталью, соответствующей данному l .

Квантовые числа n и l характеризуют **размер и форму** электронного облака, а квантовое число m_l характеризует **ориентацию электронного облака в пространстве**.

. Вид основных типов орбиталей показан на рис.



Распределение электронов в атоме по состояниям



*распределение
электронной плотности
(формы электронного
облака) для состояний
атома водорода при $n=1$
и $n=2$*

Состояние электрона,
характеризующееся квантовыми
числами

$l = 0$, называют s-состоянием
(электрон в этом состоянии
называют s-электроном),

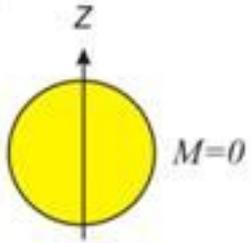
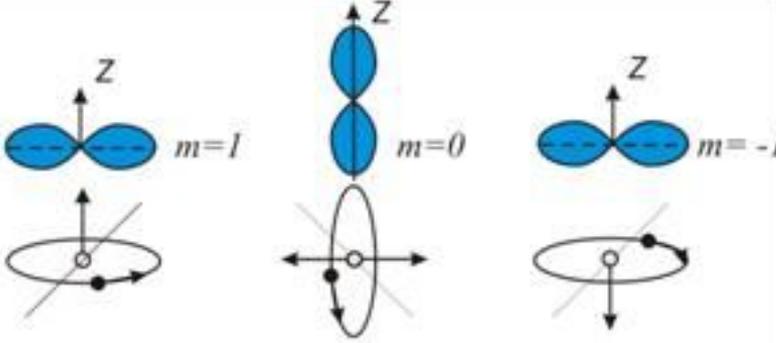
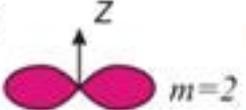
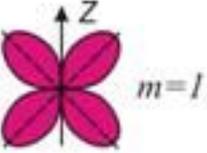
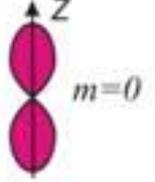
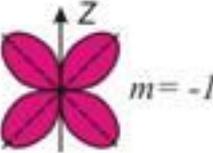
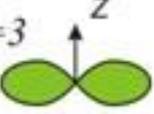
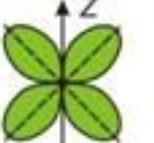
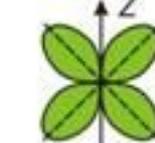
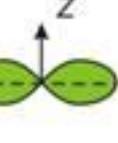
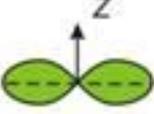
$l = 1$ — p-состоянием,

$l = 2$ — d-состоянием,

$l = 3$ — f-состоянием и т. д.

Значение главного квантового
числа n указывается перед
условным обозначением
орбитального квантового числа.

Вид основных типов орбиталей

s-электроны	$l=0$  $M=0$	p-электроны	$l=1$  $m=1$ $m=0$ $m=-1$				
d-электроны	$l=2$  $m=2$	 $m=1$	 $m=0$	 $m=-1$	 $m=-2$		
f-электроны	$l=3$  $m=3$	 $m=2$	 $m=1$	 $m=0$	 $m=-1$	 $m=-2$	 $m=-3$

Распределение электронов по оболочкам и подоболочкам

Главное квантовое число n	1	2		3			4				5				
Символ оболочки	<i>K</i>	<i>L</i>		<i>M</i>			<i>N</i>				<i>O</i>				
Максимальное число электронов в оболочке	2	8		18			32				50				
Орбитальное квантовое число l	0	0	1	0	1	2	0	1	2	3	0	1	2	3	4
Символ подоболочки	<i>1s</i>	<i>2s</i>	<i>2p</i>	<i>3s</i>	<i>3p</i>	<i>3d</i>	<i>4s</i>	<i>4p</i>	<i>4d</i>	<i>4f</i>	<i>5s</i>	<i>5p</i>	<i>5d</i>	<i>5f</i>	<i>5g</i>
Максимальное число электронов в подоболочке	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	14	18

Период	Периодическая система элементов Д. И. Менделеева													
	ГРУППЫ ЭЛЕМЕНТОВ													
	I	II	III	IV	V	VI	VII	VIII				0		
1	H 1 1,008													He 2 4,00
2	Li 3 6,94	Be 4 9,01	B 5 10,81	C 6 12,01	N 7 14,01	O 8 16,00	F 9 19,00							Ne 10 20,18
3	Na 11 22,99	Mg 12 24,31	Al 13 26,98	Si 14 28,09	P 15 30,97	S 16 32,06	Cl 17 35,45							Ar 18 39,95
4	K 19 39,10	Ca 20 40,08	21 Sc 44,96	22 Ti 47,90	23 V 50,94	24 Cr 52,00	25 Mn 54,94	26 Fe 55,85	27 Co 58,93	28 Ni 58,71				
	29 Cu 63,54	30 Zn 65,37	31 Ga 69,72	32 Ge 72,59	33 As 74,92	34 Se 78,96	35 Br 79,91							Kr 36 83,80
5	Rb 37 85,47	Sr 38 87,62	39 Y 88,91	40 Zr 91,22	41 Nb 92,91	42 Mo 95,94	43 Tc (99)	44 Ru 101,1	45 Rh 102,9	46 Pd 106,4				
	47 Ag 107,9	48 Cd 112,4	49 In 114,8	50 Sn 118,7	51 Sb 121,8	52 Te 127,6	53 I 126,9							Xe 54 131,3
6	Cs 55 132,9	Ba 56 137,3	57 La 138,9	72 Hf 178,5	73 Ta 181,0	74 W 183,9	75 Re 186,2	76 Os 190,2	77 Ir 192,2	78 Pt 195,1				
	79 Au 197,0	80 Hg 200,6	81 Tl 204,4	82 Pb 207,2	83 Bi 209,0	84 Po (210)	85 At (210)							Rn 86 222
7	Fr 87 (223)	Ra 88 (226)	89 Ac (227)	Rf 104 (261)	Db 105 (262)	Sg 106 (263)	Bh 107 (263)	Hs 108 (265)	Mt 109 (266)	Ds 110 (271)				
	111 Rg (272)	112 Uub (285)	Uut 113 (284)	Uuq 114 (289)	Uup 115 (288)	Uuh 116 (292)	Uus 117 (310?)							Uuo 118 (314?)
Лантаноиды	Ce 58 140,12	Pr 9 140,91	Nd 60 144,24	Pm 61 (145)	Sm 62 150,4	Eu 63 151,96	Gd 64 157,25	Tb 65 158,92	Dy 66 162,50	Ho 67 164,93	Er 68 167,26	Tm 69 168,93	Yb 70 173,04	Lu 71 174,97
Актиноиды	Th 90 232,04	Pa 91 (231)	U 92 238,03	Np 3 (237)	Pu 94 (244)	Am 5 (243)	Cm 96 (247)	Bk 97 (247)	Cf 98 (251)	Es 99 (254)	Fm 100 (257)	Md 101 (258)	No 102 (259)	Lr 103 (260)



Периодическая система элементов Д. И. Менделеева (1869)

Физический смысл порядкового номера Z элемента периодической системы Менделеева был выяснен в ядерной модели атома Резерфорда. Порядковый номер Z элемента совпадает с числом протонов – положительных элементарных зарядов в ядре. Это число совпадает с общим количеством электронов в атоме данного элемента.

Химические свойства элементов, их оптические и некоторые другие физические свойства объясняются поведением внешних электронов, называемых валентными или оптическими. Периодичность свойств химических элементов связана с периодичностью в расположении валентных электронов атома различных элементов.



Периодическая система элементов Д. И. Менделеева (1869)

Объяснение строения периодической системы элементов, теоретическое истолкование периодической системы Менделеева было дано в квантовой теории Бором в 1922 г. еще до появления квантовой механики.

Последовательная теория периодической системы основывается на следующих положениях:

- общее число электронов в атоме данного химического элемента равно порядковому номеру Z этого элемента;
- состояние электрона в атоме определяется набором его четырех квантовых чисел: n, l, m_l, s ;
- распределение электронов в атоме по энергетическим состояниям должно удовлетворять принципу минимума потенциальной энергии: с возрастанием числа электронов каждый следующий электрон должен занять возможные энергетические состояния с наименьшей энергией;
- заполнение электронами энергетических уровней в атоме должно проходить в соответствии с принципом Паули.



Периодическая система элементов Д. И. Менделеева (1869)

Период	Z	Элемент	K		L			M			N				
			1s	2s	2p	3s	3p	3d	4s	4p	4d	4f			
I	1	H	1												
	2	He	2												
II	3	Li	2	1											
	4	Be	2	2											
	5	B	2	2	1										
	6	C	2	2	2										
	7	N	2	2	3										
	8	O	2	2	4										
	9	F	2	2	5										
	10	Ne	2	2	6										
	III	11	Na	2	2	6	1								
		12	Mg	2	2	6	2								
13		Al	2	2	6	2	1								
14		Si	2	2	6	2	2								
15		P	2	2	6	2	3								
16		S	2	2	6	2	4								
17		Cl	2	2	6	2	5								
18		Ar	2	2	6	2	6								

Период	Z	Элемент	K		L			M			N			
			1s	2s	2p	3s	3p	3d	4s	4p	4d	4f		
IV	19	K	2	2	6	2	6	—	1					
	20	Ca	2	2	6	2	6	—	2					
	21	Sc	2	2	6	2	6	1	2					
	22	Ti	2	2	6	2	6	2	2					
	23	V	2	2	6	2	6	3	2					
	24	Cr	2	2	6	2	6	5	1					
	25	Mn	2	2	6	2	6	5	2					
	26	Fe	2	2	6	2	6	6	2					
V	27	Co	2	2	6	2	6	7	2					
	28	Ni	2	2	6	2	6	8	2					
	29	Cu	2	2	6	2	6	10	1					
	30	Zn	2	2	6	2	6	10	2					
	31	Ga	2	2	6	2	6	10	2	1				
	32	Ge	2	2	6	2	6	10	2	2				
	33	As	2	2	6	2	6	10	2	3				
	34	Se	2	2	6	2	6	10	2	4				
	35	Br	2	2	6	2	6	10	2	5				
	36	Kr	2	2	6	2	6	10	2	6				

Правила отбора

Условия, которые определяют изменение квантовых чисел при разрешенных переходах системы из одного состояния в другое, называются правилами отбора

ограничивают число возможных переходов электронов в атоме, связанных с испусканием и поглощением света.

1) изменение орбитального квантового числа Δl удовлетворяет условию - следствие закона сохранения момента количества движения

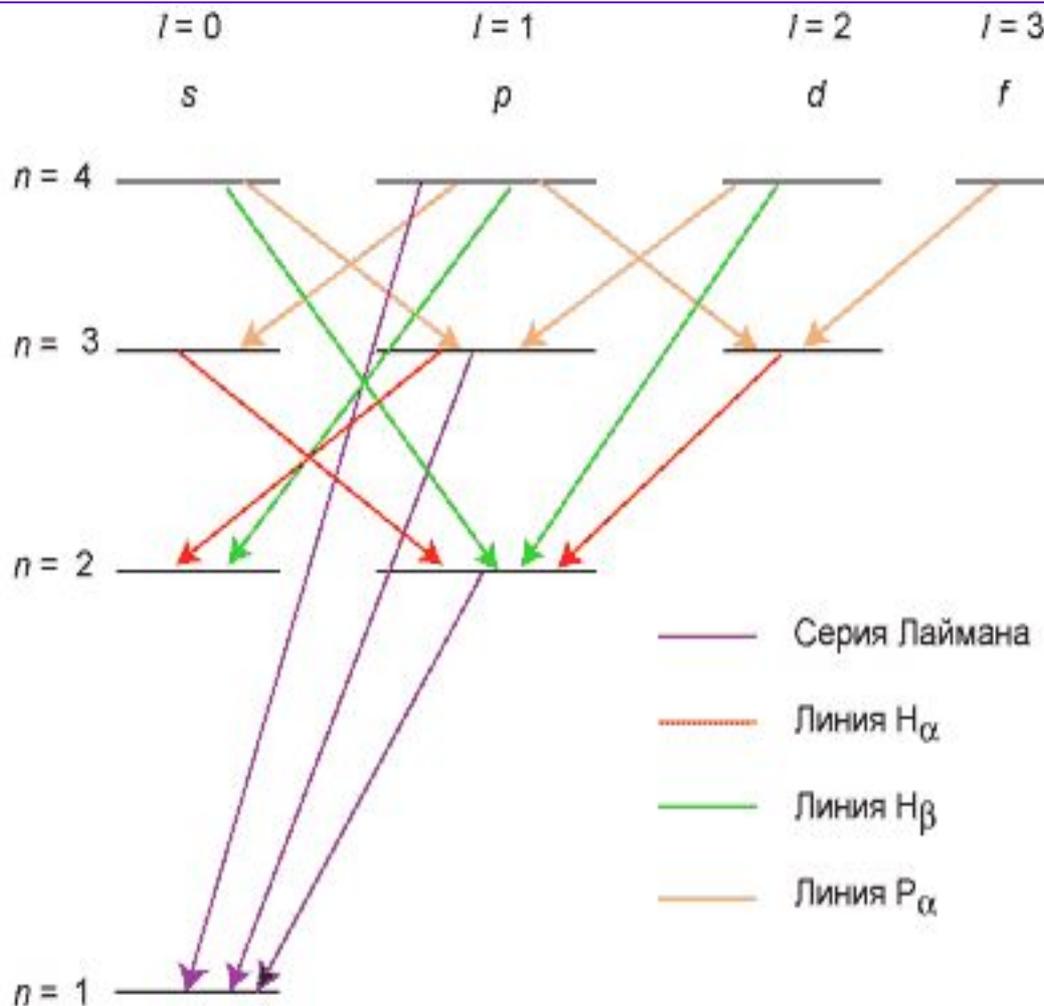
$$\Delta l = \pm 1;$$

2) изменение магнитного квантового числа Δm_l удовлетворяет условию

$$\Delta m_l = 0, \pm 1.$$

Изменение главного квантового числа n может быть любое

Возможные переходы в атоме водорода



В атоме водорода есть состояние (2s), переход из которого запрещен правилами отбора. Атом в таком состоянии называют **метастабильным**. Время жизни может быть очень продолжительным. У атома водорода ~ 2 мс. Метастабильные атомы могут накапливаться до относительно высоких концентраций $10^{12} - 10^{14} \text{ см}^{-3}$ оставаясь возбужденными. Снятие возбуждений в таких системах происходит вследствие межатомных столкновений и может затягиваться на макроскопические времена.

Подведем итоги:

- ✓ Квантовая теория прекрасно описывает экспериментальные результаты;
- ✓ Энергия в атоме квантована и значение ее пропорционально $1/n^2$;
- ✓ n^2 состояний имеют одну энергию;
- ✓ У атома нет четкой границы;
- ✓ В любом из состояний излучения нет, оно возникает только при переходах атома из одного состояния в другое;
- ✓ Частоты в спектре излучения подчиняются простой закономерности;
- ✓ Квантовая механика позволяет рассчитать вероятности переходов, т.е. определить интенсивности линий спектра;
- ✓ Изучение водородоподобных систем актуально и в наше время.

