УДК 539

С. А. Лукашевич, Е. Б. Шершнев
Учреждение образования «Гомельский государственный университет имени Ф. Скорины», Гомель, Республика Беларусь

АТОМ ВОДОРОДА С ТОЧКИ ЗРЕНИЯ КВАНТОВОЙ ТЕОРИИ

Введение. Рассматривая нахождение энергетических уровней по Бору, показано, что их находят на основании правил квантования, которым подчиняются координаты и импульсы электронов. Одновременно отмечаем, что теория Бора сделала большой шаг вперед для описания атома водорода и его спектров, но не смогла ответить на ряд важных вопросов, например, почему осуществляются переходы между одними энергетическими уровнями, а не осуществляются между другими; почему электроны на стационарных орбитах не излучают электромагнитную энергию; какова природа излучения более сложных атомов, например, например, гелия и лития, и так далее.

Основная часть. На основании закона Кулона было показано, что потенциальная энергия взаимодействия электрона в атоме водорода с ядром

$$U(r) = -\frac{e^2 z}{4\pi\varepsilon_0 r}, \tag{1}$$

где r — расстояние между электронами и ядром.

С точки зрения квантовой механики состояние электрона в атоме водорода описывается волновой функцией ψ, удовлетворяющей стационарному уравнению Шредингера с учётом (1):

$$\Delta\psi + \frac{2m}{h^2}\left(E + \frac{e^2 z}{4\pi\varepsilon_0 r}\right)\psi = 0, \tag{2}$$

где m — масса электрона;
E — полная энергия электрона в атоме.

Так как кулоновское поле ядра, в котором движется электрон, является центрально-симметричным, поэтому уравнение (2) лучше решать в сферических координатах $r,\ v,\ \varphi$, считая, что $\Psi\ (r,\ v,\ \varphi)$.

В таком случае оператор Лапласа в сферических координатах задаётся известной формулой

$$\Delta = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{\Delta v_{,\varphi}}{r^2},$$

где $\Delta \nu_{,\varphi} = \frac{1}{\sin\nu}\frac{\partial}{\partial \nu}(\sin\nu\frac{\partial}{\partial \nu}) + \frac{1}{\sin^2\nu}\frac{\partial}{\partial\varphi^2}$ — угловая часть лапласиана.

Тогда уравнение Шредингера для стационарных состояний примет вид:

$$\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\psi}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2\sin v}\frac{\partial}{\partial v}\left(\sin v\frac{\partial\varphi}{\partial v}\right) + \frac{1}{r^2\sin^2 v}\frac{\partial^2\varphi}{\partial\varphi^2} + \frac{2m}{h^2}\left(E + \frac{e^2 z}{4\pi\varepsilon_0 r}\right)\psi = 0. \tag{3}$$

Данное уравнение разделили на три уравнения, каждое из которых зависит только от одной из переменных $r,\ v,\ \varphi$. Будем решать это уравнение методом разделения переменных. Искомую функцию представим вначале в виде

$$\psi(r, v, \varphi) = R(r)\,Y(v, \varphi), \tag{4}$$

где $R(r)$ — радиальная функция, зависящая только от r, $Y(v,\ \varphi)$ — угловая функция, зависящая только от v и φ.

Подставим (4) в уравнении (3):

$$\frac{Y}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial R}{\partial r}\right) + \frac{R}{r^2}\left[\frac{1}{\sin v}\frac{\partial}{\partial v}\left(\sin v\frac{\partial Y}{\partial v}\right) + \frac{1}{\sin^2 v}\frac{\partial^2 Y}{\partial\varphi^2}\right] + \frac{2m}{h^2}\left(E + \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\right)RY = 0. \tag{5}$$

Умножим уравнение (5) на $\frac{r^2}{RY}$ и разделив переменные получим

$$\frac{1}{R}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial R}{\partial r}\right)+\frac{2m}{h^2}\left(E+\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\right)r^2=-\frac{1}{Y}\left[\frac{1}{\sin v}\frac{\partial}{\partial v}\left(\sin v\frac{\partial Y}{\partial v}+\frac{1}{\sin^2 v}\frac{\partial^2 Y}{\partial\varphi^2}\right)\right]. \tag{6}$$

Поскольку в левой части (6) стоят величины, зависящие только от r, а в правой — только от v и φ, то это равенство может выполняться только тогда, когда его и левая и правая части равны одной и той же постоянной.

После преобразования получим

$$\frac{\partial^2 R}{\partial r^2}+\frac{2}{r}\frac{\partial R}{\partial r}+\frac{2m}{h^2}\left(E+\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r}-\frac{\lambda}{r^2}\right)R=0, \tag{7}$$

$$\frac{1}{\sin v}\left(\sin v\frac{\partial Y}{\partial v}\right)+\frac{1}{\sin^2 v}\frac{\partial^2 Y}{\partial\varphi^2}=-\lambda\varphi^2. \tag{8}$$

Для решения уравнения (8) угловую функцию $Y(v,\ \varphi)$ представим в виде

$$Y(v,\varphi)=\theta(v)\Phi(\varphi), \tag{9}$$

где $\theta(v)$ — функция, зависящая только от угла ν;

$\Phi(\varphi)$ — функция, зависящая только от угла φ.

Подставив (9) в (8) и перенеся в правую часть равенства переменные, зависящие от φ, получим

$$\frac{1}{\theta}\left[\frac{1}{\sin v}\frac{\partial}{\partial v}\left(\sin v\frac{\partial\theta}{\partial v}\right)\right]+\lambda\sin^2 v=-\frac{1}{\Phi}\frac{\partial^2\Phi}{\partial\varphi^2}. \tag{10}$$

Равенство (9) должно выполняться только при любых θ и φ, что возможно только тогда, когда его левая и правая части равны одной и той же постоянной, которая обычно обозначается m_e^2. Физический смысл m_e — магнитное квантовое число. После перегруппировки слагаемых, зависящих от θ и φ, получаем два уравнения:

$$\frac{1}{\sin\nu}\frac{\partial}{\partial\nu}(\sin\nu\frac{\partial\theta}{\partial\nu})+(\lambda-\frac{m_e^2}{\sin^2\nu}=0, \tag{11}$$

$$\frac{\partial^2\Phi}{\partial\varphi^2}+m_e^2\Phi=0. \tag{12}$$

Таким образом, искомые три уравнения, каждое из которых зависит только от одной из переменных ($r,\ v,\ \varphi$), найдены — это уравнения (7), (11) и (12).

Поскольку R, θ и Φ зависят только от одной переменной, в уравнениях (7), (11) и (12) частные производные можно заменить полными. Уравнения (11) и (12) являются соответственно полярным и азимутальным волновыми уравнениями.

Заключение. Исходя из теории Бора ранее была определена полная энергия электрона в водородной системе и она имеет следующий вид:

$$E=-\frac{1}{n^2}\frac{Z^2me^4}{8h\varepsilon_0^2} \tag{13}$$

где n = 1, 2, 3, … — главное квантовое число.

Таким образом из уравнения Шредингера без каких-либо добавочных требований вытекает, что атом водорода и сходные с ним ионы могут находиться лишь в ряде прерывных энергетических состояний со значениями энергии, даваемое выражением (13).