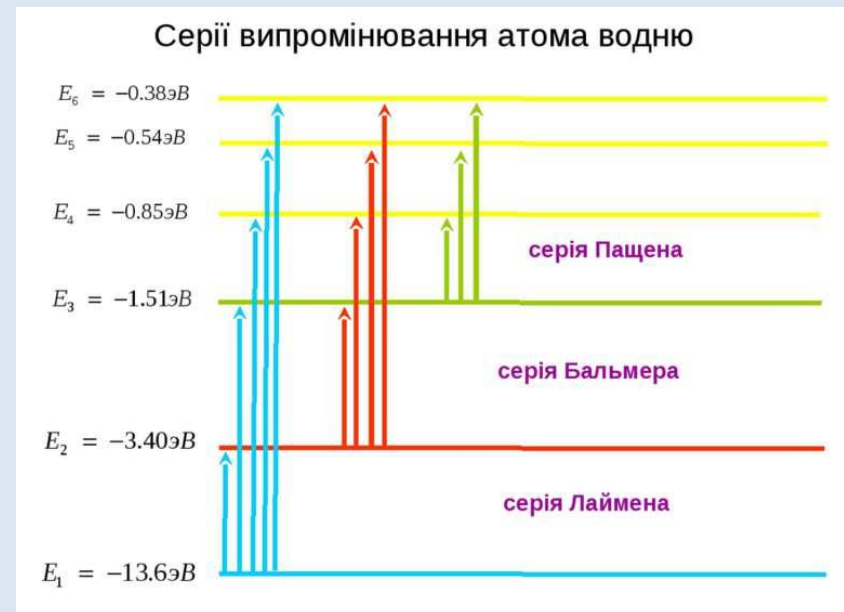


## Лекція 8(2)

# Властивості Гідрогенподібного атома.

### План

1. Енергія атомних орбіталей.
2. Відстань між електроном і ядром.
3. Спектр Гідрогенподібного атома.
4. Енергетичні характеристики атома.



## Енергія атомних орбіталей

Повна енергія атома визначається:

$$\bar{E} = \int \Psi^* \hat{H} \Psi dq, \quad dq = r^2 \sin \theta \cdot dr \cdot d\theta \cdot d\varphi.$$

Для 1s-електрона:

$$E_{1s} = \int \Psi_{1s}^* \hat{H} \Psi_{1s} dq, \quad \Psi_{1s} = \Psi_{1s}^* = \left(\frac{1}{\pi}\right)^{1/2} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \exp\left(-\frac{Zr}{a_0}\right).$$

Інтегрування за  $dr$  приведе до табличного інтегралу:

$$\int_0^{\infty} x^n \exp(-kx) dx = \frac{n!}{k^{n+1}}.$$

Енергії електрону в 1s стані Гідрогенподібного атома:

$$E_{1s} = -\frac{Z^2 m_e e^4}{2\hbar^2}.$$

# Енергія

В загальному випадку енергію визначають з виразу:

$$E_n = -\frac{Z^2 m_e e^4}{2\hbar^2 n^2},$$

Частинка	Енергія $1s$ -стану, еВ	
	<i>розрахунок</i>	<i>експеримент</i>
He <sup>+</sup>	-54.42	-54.416
Li <sup>2+</sup>	-122.45	-122.451
Be <sup>3+</sup>	-217.69	-217.713
B <sup>4+</sup>	-340.15	-340.217

## *Відстань між електроном та ядром*

Середнє значення фізичної величини визначають:

$$\langle A \rangle \equiv \bar{A} = \int \Psi^* \hat{A} \Psi dq = \langle \Psi | \hat{A} | \Psi \rangle$$

Середня відстань між ядром і електроном в основному стані Н

$$\begin{aligned} \bar{r}_{1S} &= \int \Psi_{1S}^* \cdot r \cdot \Psi_{1S} dq = \frac{1}{\pi} \left( \frac{1}{a_0} \right)^3 \int_0^\infty r^3 \exp\left(-\frac{2r}{a_0}\right) dr \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \sin \theta \cdot d\theta \cdot d\varphi = \\ &= \frac{4\pi}{\pi} \left( \frac{1}{a_0} \right)^3 \int_0^\infty r^3 \exp\left(-\frac{2r}{a_0}\right) dr. \end{aligned}$$

$$\bar{r}_{1S} = \frac{4 \cdot 6}{16} \frac{a_0^4}{a_0^3} = \frac{3}{2} a_0.$$

В загальному вигляді середня відстань між електроном та ядром, за різних  $n, l$  :

$$\bar{r}_{nl} = a_0 \frac{n^2}{Z} \left( \frac{3}{2} - \frac{l(l+1)}{2n^2} \right).$$

Порівняємо середнє значення та найбільш ймовірне, отримане з ф-ції розподілу:

$$P_{10}(r) = [R_{10}(r)]^2 r^2 = N \frac{r^2}{a_0^3} \exp\left(-\frac{2r}{a_0}\right),$$

$$\frac{dP_{10}(r)}{dr} = N \frac{2r}{a_0^3} \exp\left(-\frac{2r}{a_0}\right) \left(1 - \frac{r}{a_0}\right) = 0,$$

## Спектр Гідрогенподібного атома

Спектральні переходи атома підпорядковані правилу частот Бора:

$$h\nu = E_k - E_i$$

Враховуючи вираз для енергії АО, отримаємо:

$$h\nu = \frac{Z^2 m_e e^4}{2\hbar^2} \left( \frac{1}{n_i^2} - \frac{1}{n_k^2} \right).$$

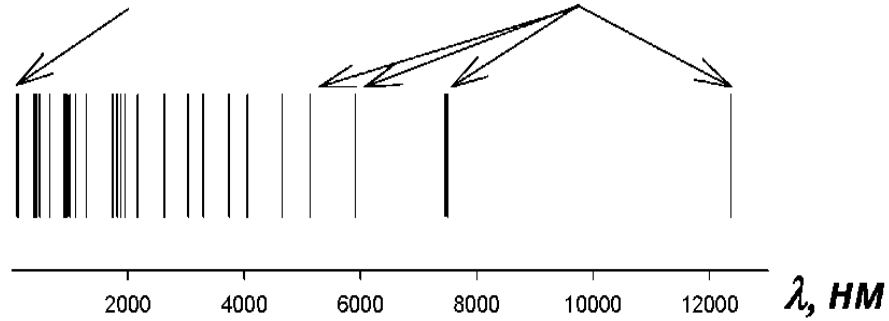
Спектр випромінювання атомарного Н складається із декількох **спектральних серій**, а хвильові числа визначаються формулою:

$$\nu = R \left( \frac{1}{n_i^2} - \frac{1}{n_k^2} \right),$$

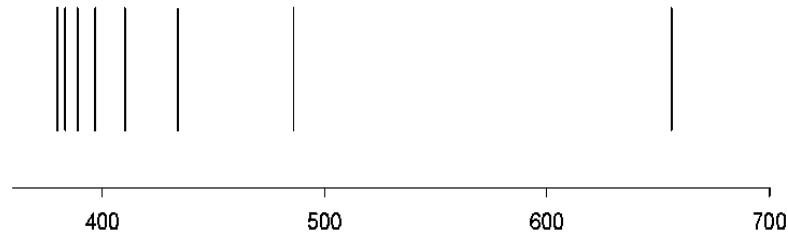
$R$  - постійна Рідберга,  $n_i$  і  $n_k$  – цілі числа.

# Спектральні лінії H

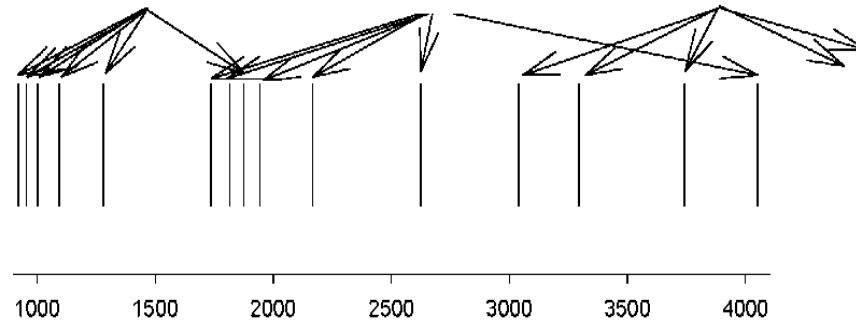
*Серія Леймана*    *Серія Хамфрі*



*Серія Бальмера*



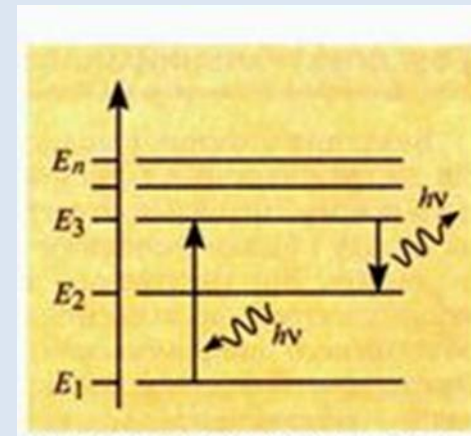
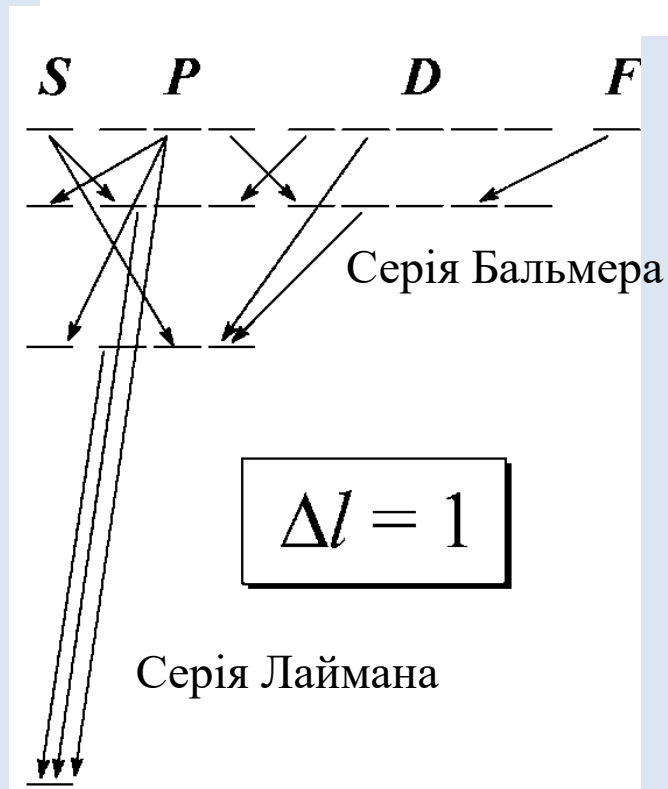
*Серія Пашена*    *Серія Брекета*    *Серія Пфунда*



## Дозволені переходи

- Ймовірність електронного переходу залежить квадратично від величини дипольного моменту переходу

$$\vec{D}_{ki} = \langle \Psi_k | \sum \vec{r}_\mu | \Psi_i \rangle,$$





*Рентгенівське випромінювання виникає внаслідок переходу електронів, що належать внутрішньому шару.*

*Енергія іонізації – це енергія, яку необхідно затратити для виходу електрона з атома, який знаходиться в нормальному стані ( іонізаційний потенціал), eV.*



*Дякую за увагу!*

