I.6. A H-atom kvantummechanikai leírása

I.6.1. Schrödinger-egyenlet, kvantumszámok

Szimbolikusan tehát: $\hat{H}\psi_i = E_i\psi_i$

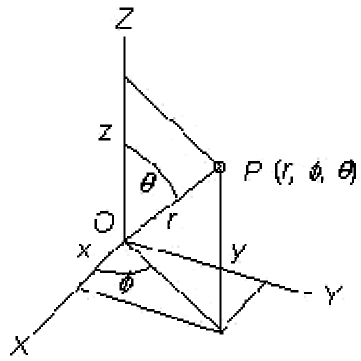
A Schrödinger-egyenletben a rendszert specifikálja:

a $V = -e^2/r$ a potenciális energia (semmi „különleges" effektus nincs a mag és az elektron között, csak elektrosztatikus kölcsönhatás – Coulomb-vonzás).

(Középisk.: q_1 és q_2 töltés közti erő: $F \sim q_1q_2/r^2$; most az energiát írtuk fel).

A hullámfüggvény, $\psi(x,y,z)$ 3 koordináta függvénye.

Praktikusabb a rendszer gömbszimmetriájának megfelelő (gömbi) *polárkoordináták* használata:



A Schrödinger-egyenlet megoldása során kiderül: „fizikailag értelmes" eredmények csak úgy kaphatók, hogy bevezetünk három KVANTUMSZÁMot:

n – főkvantumszám: 1,2,3,….
l – mellékkvantumszám: 0,1,2,… (n-l)
m – mágneses kvantumszám: -l,-l+1,…,0,1,…,l
látható: *m*-nek (2*l*+1)-féle értéke lehet

A kvantumszámok lehetséges értékei és jelölések:

N	*l*	*jelölés*	*m*	*pályák száma*
1	0	*1s*	0	1
2	0	*2s*	0	1
	1	*2p*	-1, 0, 1	3
3	0	*3s*	0	1
	1	*3p*	-1, 0, 1	3
	2	*3d*	-2, -1, 0, 1, 2	5
4	0	*4s*	0	1
	1	*4p*	-1, 0, 1	3
	2	*4d*	-2, -1, 0, 1, 2	5
	3	*4f*	-3,-2, -1, 0, 1, 2, 3	7

A kvantumszámok jelentése:

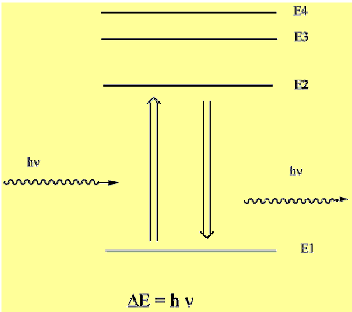
A szokásos tárgyalás a pályák alakját vizsgálja, ld. majd azt is; de a lényeg: fizikai mennyiségeket határoznak meg.

1) *n*, főkantumszám: **energia** $\boxed{E_n = -\frac{1}{2n^2}(E_h)}$

ugyanaz, mint a Bohr-modellben!! (*ábrát ld. ott*)

A H-spektrum értelmezése tehát:

Már láttuk, minden spektroszkópia alapja: $\Delta E = h\nu$



$\nu = \mathrm{const}(1/n_1^2 - 1/n_2^2)$

További kvantumszámok:

2) *l*, mellékkvantumszám*:* az **impulzusmomentum** nagyságát határozza meg*:*

$abs(\underline{L}) = [l(l+1)]^{1/2}\,\hbar$

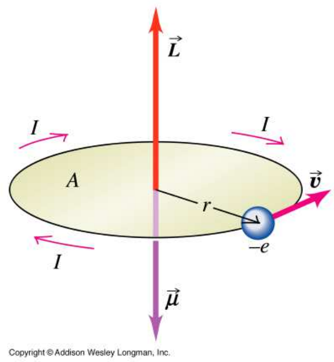
3) *m,* mágneses kvantumszám*:* az **impulzusmomentum** z-komponensét határozza meg

$L_z = m\,\hbar$

[elevenítsük fel (vö. a Bohr-modell, ott elnagyoltuk, hogy a felhasznált mennyiségek vektorok): körmozgás; $\underline{L} = \underline{r} \times \underline{p}$; itt $\underline{r}$ a helyvektor, $\underline{p}$ az impulzus, $\underline{p}=m\underline{v}$; L nagysága: $v = r\omega$; $L = mr^2\omega = I\omega$

I a tehetetlenségi nyomaték, ω a szögsebesség]

Az impulzusmomentum egyben **mágneses momentumot** is jelent (μ). Keringő töltés = köráram, kis elemi **mágnes**;



www.physics.sjsu.edu/becker/physics51/mag_field.htm

***Magnetic dipole moment** (**m** = I A) of an orbiting electron.*

The right-hand rule determines the direction of the magnetic moment of a current-carrying loop. The direction of the electron's angular momentum vector L can be obtained using the right hand rule for angular momentum.

$\underline{\mu}$ nagyságát, ill. z-vetületét ugyanúgy határozza meg *m*, ill. *l,* mint az impulzusmomentumét fentebb, csak az egység más:

$$\hbar \;\leftrightarrow\; (e/2m_ec)\hbar$$

mechanikai momentum   mágneses momentum

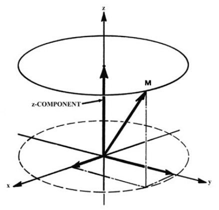
Elnevezés: $(e/2m_ec)\hbar \equiv \mu_B$, a *Bohr-magneton.*

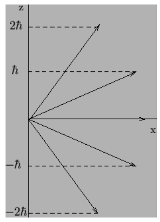
Tehát: $abs(\underline{\mu}) = [l(l+1)]^{1/2}\,\mu_B$

$\mu_z = m\,\mu_B$

A kvantáltság mit jelent? Ha van egy kitüntetett irány, z
(pl. külső mágneses tér), az elektron mechanikai és mágneses momentumának z-komponense az *m* egész szám által rögzített, ugyanakkor x- és y-komponens <u>határozatlan</u>!
(A Heisenberg–határozatlanság egyik esete.)

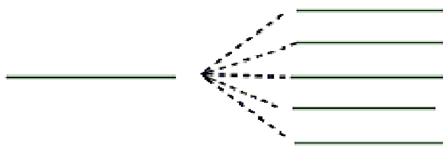
Például, ha *l* = 2, *m* értéke 5-féle lehet:





http://srikant.org/core/node13.html

Az energia arányos a mágneses momentumnak a tér irányára eső vetületével, vagyis *m*-mel. Az energiaszintek felhasadnak (*Zeeman-effektus*):



mágneses tér kikapcsolva;   mágneses tér bekapcsolva

I.6.2. A hullámfüggvény (a H–atompályák)

A rendszert a hullámfüggvény (*állapotfüggvény)* írja le:

$\psi_i\,(x,y,z)$, vagy explicite kiírva a kvantumszámokat:

$\psi_{nlm}\,(x,y,z)$

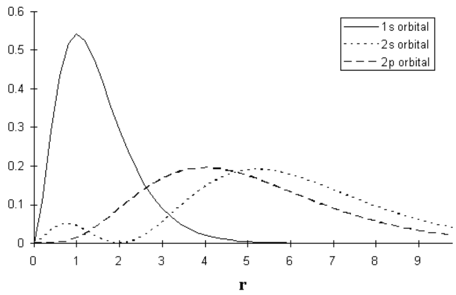
Jelen esetben ψ <u>egy</u> elektront ír le; a klasszikus fizikából vett fogalommal annak „<u>pályája</u>*" („orbital").* De jelentése NAGYON más, mint a klasszikus pálya, ld. alább.

A pályák <u>matematikai formája,</u> csak néhány példa
(r és θ polárkoordináták, r atomi egységben):

1s	$\psi_{1,0,0}$ = const. e^{-r}	$\{1/\pi^{1/2}\, e^{-r}\}$
2s	$\psi_{2,0,0}$ = const.(2-r) $e^{-r/2}$	$\{1/[4(2\pi)^{1/2}](2-r)\, e^{-r/2}\}$
$2p_0$	$\psi_{2,1,0}$ = const. $re^{-r/2}\cos\theta$	$\{1/[4(2\pi)^{1/2}]\, re^{-r/2}\cos\theta\}$

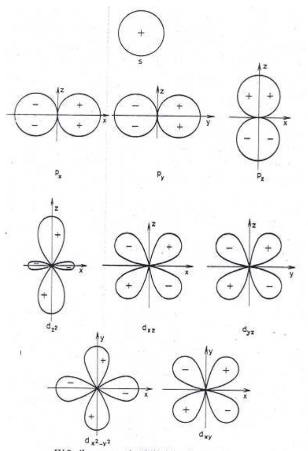
<u>Értelmezés:</u> A "pálya" nem a klasszikus értelemben adja meg a részecske mozgását. (Ψ-ben nincs is t, idő).
Csak <u>statisztikus-valószínűségi</u> kijelentés tehető, melyben
Ψ *négyzete* jelenik meg: $|\Psi(x,y,z)|^2$dxdydz annak a valószínűsége, hogy az elektron az x,y,z pont körüli dxdydz infinitezimális térfogatelemben van.

<u>Tanulságos:</u> *mi a valószínűsége annak, hogy az elektron a magtól r távolságban van?* Vigyázat, adott r egy $4\pi r^2$ <u>gömbfelületet</u> jelent, ezért nem ψ^2 –et, hanem $4\pi r^2\psi^2$kell tekintenünk: (ez precízebben, matematikailag indokolható).



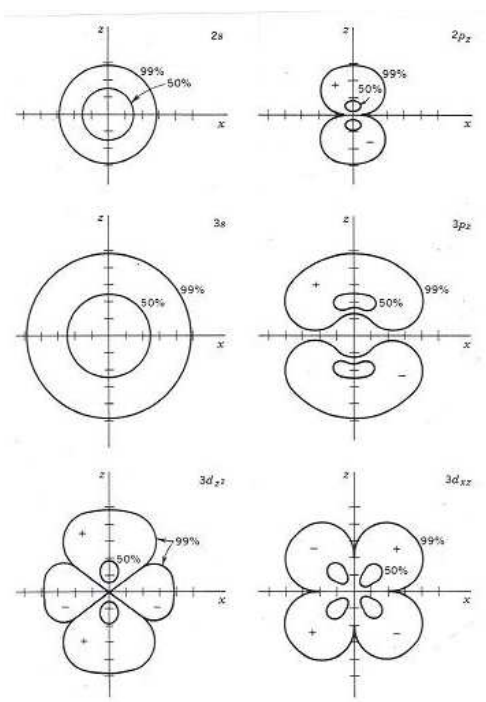
Pl. az 1s állapotban: $W(r) \sim (e^{-r})^2 \; 4\pi r^2$ .A maximum éppen a bohr-sugárnál ($r=1a_0$) van! Látható, hogy magasabb állapotokban csomófelületek jellemzik az eloszlást, pl. 2s-ben 1 csomó; ált.: *n-l*-1 csomó.
A pályák <u>ábrázolása</u>

1. *Iránydiagramok*: [Kapuy-Török, *scanned]*
A tér egy adott irányába a függvény értékével arányos hosszúságú vektort húzunk, végpontokat összekötve:



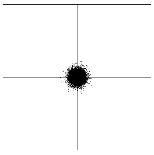
IV.8. ábra. s-, p-, d-pályák iránydiagramjai

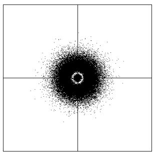
2. Szintvonalak (izofelületek) Offenhartz, *scanned*

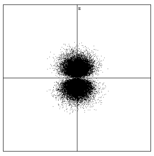


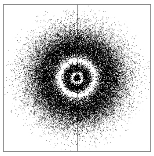
Az s-, p- és d-pályák elektronsűrűsége, szintvonalakkal jelezve.
Példaképp, jelzett területeken belül van az elektron 50%, ill. 99% valószínűséggel.

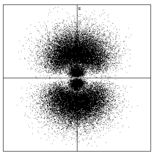
3. *Elektronsűrűség pontozással jelezve*:
forrás: http://www.dartmouth.edu/~genchem/0102/spring/6winn/H.html
*Each picture spans a **radial** distance of 30 times the Bohr radius ($30a_0$, or about 16 Å).*
*For some wavefunctions, a single view tells the whole story. These are the $l = 0$ (or s) wavefunctions, which are **spherically symmetric**, and the $l = 1$, $m = 0$ (or p_z) and $l = 2$, $m = 0$ (or d_z2) wavefunctions, which are cylindrically symmetric about the z axis. (In fact, all $m = 0$ wavefunctions have this symmetry, but only those for $l = 1$ and $l = 2$ are shown here.)*
*For other wavefunctions, we need three views, one along each of the axes, **x**, **y**, and **z**.*
*As you look through these pictures, take time to visualize the **radial** (or **spherical**) nodes and the **angular** (or **planar**) nodes. Recall that a wavefunction with principal quantum number **n** has **n – 1** total nodes, and that the **l** quantum number equals the number of planar nodes, leaving **n – l – 1** spherical nodes.*
These pictures were generated by a computer program that simulated 50,000 measurements of the electron position.


1s

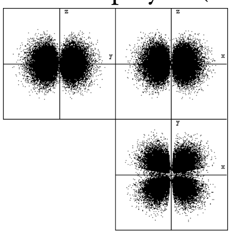

2s

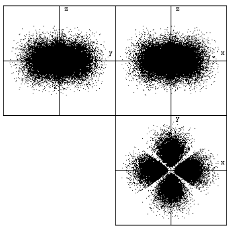

$2p_z$ (p_x és p_y ugyanilyen az x, ill. y irányban)


3s

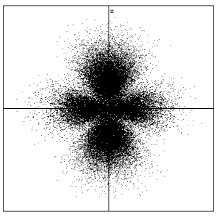

$3p_z$ (p_x és p_y ugyanilyen az x, ill. y irányban)

És a 3d–pályák (különböző metszetek):


A:$3d_{xy}$


B: d_{x2-y2}

Óramutató járásával zy, zx és yx metszetek


z-teng. körül hengerszimm. C: d_z^2

A: $3d_{xy}$; $3d_{xz}$ és $3d_{yz}$ hasonlóak, csak a tengelyek szerepet váltanak. B: $3d_{x2-y2}$. C: Egészen más az ötödik, $3d_{z2}$.

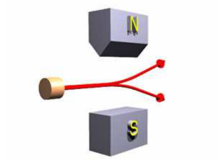
FIGYELEM! Nagyon jó, forgatható ábrák a net-en, pl.: http://wwwchem.uwimona.edu.jm:1104/courses/CFTpt2.html

I.6.3.Az elektronspin

A kísérleti tények szerint: az elektronnak saját (a pályamozgástól független) mágneses momentuma is van. Történetileg az első : a *Stern-Gerlach-kísérlet, 1922.*

(Másrészt jelentkezik a színképek finomszerkezetében, stb.)

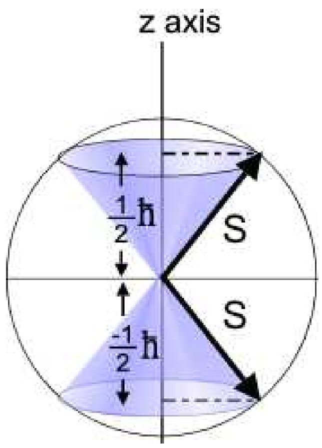
http://www.upscale.utoronto.ca/GeneralInterest/Harrison/SternGerlach/Stern



Gerlach.html *An „electron gun" produces a beam of electrons. If the beam from the electron gun is directed to the magnets , the beam is split into two parts. …*
(Megj.: **Stern és Gerlach** eredetileg **Ag**-atomsugarat használt).
Az elektronsugár <u>két</u> komponensre hasad; a pályamomentum ezt <u>nem</u> magyarázza, annak z-komponense 1, 3, 5, … -féle lehet.
<u>Tehát:</u> Az elektronnak <u>saját</u> („belső") impulzusmomentuma (vagyis egyben mágneses momentuma) van.
Ezt jelzi a *spinkvantumszám*: s; a spinvektor z-vetülete: m_s.
A spin–impulzusmomentum

nagysága: $[s(s+1)]^{½}\ \hbar = \sqrt{3}/2\ \hbar$

z- vetülete: $\pm½\ \hbar$



Ugyanakkor, adott mechanikai momentumhoz a spin esetében <u>kétszer akkora</u> mágneses momentum tartozik, mint a pályamozgás esetében (fent). Ha pl. a mechanikai momentum z-vetülete $\pm½\ \hbar$, akkor $\mu_z = \pm\ \mu_B$

{ <u>Gyakorlati alkalmazás</u> (l. későbbi tanulmányokban):
ESR (Elektron Spin Rezonancia)- spektroszkópia.
[Megj.: bizonyos <u>atommag</u>oknak is van spinje, ezen alapul teljesen hasonló módon az NMR spektroszkópia]. }