

ISSN 2223-4586

НАНО

ИНЖЕНЕРИЯ

12(18)

2012

ЕЖЕМЕСЯЧНЫЙ НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЙ И ПРОИЗВОДСТВЕННЫЙ ЖУРНАЛ





УДК530.145 + 620.3

В.К. Неволин

(Национальный исследовательский университет МИЭТ, г. Москва)
E-mail: vkn@miee.ru

Атом водорода: что нового?

Новые технологии всегда способствовали развитию науки. Нанотехнологии не являются исключением. Это научно-прикладное направление, выявляющее и использующее в интересах людей фундаментальные свойства материи в нанометровом масштабе. С развитием нанотехнологий меняются представления об окружающих объектах наномира. В связи с этим вполне естественно обратиться к истокам квантовой механики на примере атома водорода.

Ключевые слова: квантовые уравнения движения, атом водорода, новое пространственное структурирование плотности вероятности.

New technologies have always contributed to the development of science. Nanotechnology is no exception. This applied science direction detects and uses the fundamental properties of matter at the nanometer scale for the benefit of the people. With the development of nanotechnology ideas about the surrounding objects of the nanoworld are changing. In this regard, it is natural to turn to the origins of quantum mechanics on the example of hydrogen atom.

Keywords: quantum equations of motion, hydrogen atom, new spatial structuring of the probability density.

Можно ли узнать что-нибудь новое об атоме водорода? Кажется, в квантовой механике он изучен самым детальным образом, тем более что многие задачи о пространственной структуре и состояниях этого атома решаются аналитически. Однако можно показать, что плотность вероятности нахождения электрона, двигающегося вокруг ядра, в отличие от традиционных представлений структурирована, а это должно приводить к уточнению известных эффектов и, возможно, к предсказанию новых. Для доказательства такого утверждения целесообразно решить задачу об атоме водорода в представлении плотности вероятности, непосредственно описывающую ее распределение во всех возможных квантовых состояниях рассматриваемого атома.

Уравнения для непрерывного движения квантовой частицы массы m_0 в произвольном внешнем поле $W(\vec{r}, t)$ в представлении плотности вероятности имеют вид [1–3]:

$$m_0 \frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \rho \vec{P} = 0; \quad (1)$$

$$\frac{\partial \vec{P}}{\partial t} = -\nabla \left(\frac{P^2}{2m_0} + W + \frac{\hbar^2 (\nabla \rho)^2}{8m_0 \rho^2} - \frac{\hbar^2 \Delta \rho}{4m_0 \rho} \right), \quad (2)$$

где $\rho(\vec{r}, t)$ — пространственно-временное распределение плотности вероятности частицы; $\vec{P}(\vec{r}, t)$ — ее макроскопический импульс; $W(\vec{r}, t)$ — произвольная потенциальная энергия.

Для атома водорода в традиционной квантовой механике вычислен спектр энергий и найдены волновые функции. Для стационарного пространственно ограниченного движения электрона в поле ядра с зарядом Z система уравнений (1) и (2) запишется в виде:

$$E = \frac{\hbar^2 (\nabla \rho)^2}{8m_0 \rho^2} - \frac{\hbar^2 \Delta \rho}{4m_0 \rho} - \frac{Ze^2}{r} = \text{const}. \quad (3)$$

Волновые функции для атома водорода найдены в работе [4]. Их можно записать в виде:

$$\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = \psi_{nlm}(r, \theta) e^{im\varphi}, \quad (4)$$

где n, l, m — квантовые числа.

Поскольку $\psi_{nlm}(r, \theta)$ — функция вещественная, то выражение для плотности вероятности имеет вид:

$$\rho_{nlm} = \psi_{nlm}^2(r, \theta). \quad (5)$$

Квантовая величина ρ_{nlm} показывает наличие осевой симметрии атома. Подставляя выражение (5) в уравнение движения (3) и проведя все необходимые дифференцирования и сокращения подобных членов, получим стандартное уравнение Шредингера для электрона в кулоновском поле:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0} \Delta \psi_{nlm} - \frac{Ze^2}{r} \psi_{nlm} = E \psi_{nlm}. \quad (6)$$

Решение его позволяет получить энергетический спектр электрона в атоме и угловое распределение плотности вероятности. В общем виде уравнение имеет вид:

$$\hat{H}\psi = E\psi,$$

где оператор Гамильтона равен:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \Delta - \frac{Ze^2}{r}. \quad (7)$$

Для отыскания собственных значений энергии к аналогичному виду можно привести уравнение (3):

$$\hat{H}(\rho)\rho = E\rho, \quad (8)$$

где нелинейный оператор Гамильтона равен:

$$\hat{H}(\rho) = -\frac{\hbar^2}{4m_0} \Delta + \frac{\hbar^2 \nabla \rho \nabla}{8m_0 \rho} - \frac{Ze^2}{r}. \quad (9)$$

Сравнивая выражения (7) и (9) можно увидеть, что для аналитических решений задач о пространственно ограниченном движении квантовых частиц предпочтительнее линейный оператор (7).

Однако решение уравнения (8) с оператором (9) позволяет получить новые представления о движении электрона в атоме водорода. Рассматривая выражения (4) и (5) можно видеть, что фаза волновой функции с магнитным квантовым числом исчезает при описании пространственно ограниченного движения с помощью плотности вероятности (5) и, как кажется, из

решения должно исчезнуть само магнитное число. Это не так. Решая систему уравнений (8) и (9) методом разделения переменных, как это делается для уравнения (6) и, предположив $\rho(r, \theta, \varphi) = \rho_r(r)\rho_\theta(\theta)\rho_\varphi(\varphi)$, удается получить связанные между собой две константы разделения и следующие зависимости:

$$\frac{1}{\rho_\varphi} \left(\frac{d\rho_\varphi}{d\varphi} \right)^2 - \frac{2}{\rho_\varphi} \frac{d^2 \rho_\varphi}{d\varphi^2} = \beta^2 = \text{const}. \quad (10)$$

$$\frac{\beta^2}{\sin^2 \theta} + \frac{1}{\rho_\theta} \left(\frac{d\rho_\theta}{d\theta} \right)^2 - \frac{2}{\rho_\theta \sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d\rho_\theta}{d\theta} \right) = \lambda^2 = \text{const}. \quad (11)$$

Заменим переменные в уравнении (11):

$$\rho_\theta = \gamma^2(\theta); \quad \xi = \cos \theta$$

и сведем эту зависимость к известному уравнению, решенному для атома водорода с угловой переменной θ . Решение такого уравнения можно представить в виде полинома Лежандра [4]. Для нас важно, что константы разделения в этом уравнении квантуются:

$$\lambda^2 = 4l(l+1), \quad (12)$$

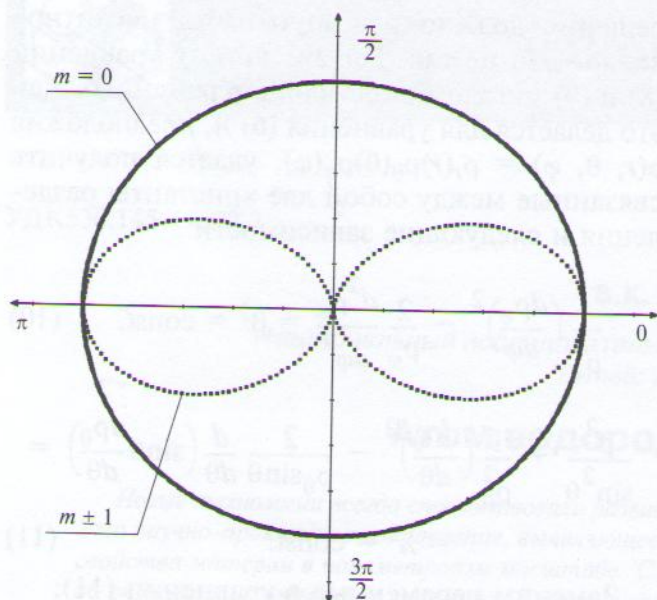
где $l = 0, 1, 2, 3 \dots$; $\beta^2 = 4m^2$; $m = \beta/2 = 0, \pm 1, 2, \dots, \pm l$; l — орбитальное квантовое число; m — магнитное квантовое число.

Уравнение (10) решаем подстановкой $\frac{1}{\rho_\varphi} \frac{d\rho_\varphi}{d\varphi} = u(\varphi)$. Тогда $\rho_\varphi = \cos^2 \frac{\beta\varphi}{2}$. Чтобы ρ_φ была однозначной функцией для константы β , должны выполняться соотношения $\beta = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$. Однако не все значения β удовлетворяют соотношениям (12), а только ноль и четные значения.

Окончательно имеем

$$\rho_\varphi = \cos^2 m\varphi.$$

Из полученных решений следует, что в атоме водорода могут существовать: симметрия с $m = 0$ и оси симметрии первого, второго, третьего и последующего порядков. Это структурированное распределение плотности вероятности по углу φ с сохранением известных значений магнитных чисел, отличающееся от


 Структурирование электронной плотности вероятности по углу φ

традиционных решений (4) и (5). Оно показывает, что для возбужденных атомов наряду с существованием орбитальных токов должны иметь место структурирование электронной плотности вероятности при движении по углу φ (рисунок): для $m = \pm 1$ в виде "двухлистника", для $m = \pm 2$ "четырёхлистника" и т. д.

В традиционной модели атома водорода отсутствует пространственно структурированное распределение электронной плотности вероятности при движении по углу φ и можно думать, что приведенные выше рассуждения это математический фокус и такого быть не может. Однако за этим стоит вполне определенная физика явлений. Дело в том, что когда квантовая частица помимо собственно квантового движения совершает еще какое-то механическое движение, например поступательное, то фактически частица участвует в двух движениях и в этом случае ее плотность вероятности

структурируется в пространстве (см. подробнее в работе [3]). Электрон в атоме водорода в возбужденном состоянии помимо квантового движения совершает еще вращательное механическое движение с вполне определенным моментом количества движения и, следовательно, его электронная плотность вероятности должна быть структурирована в пространстве.

Проверка полученного результата на экспериментальном факте показывает следующее. Известно, что средний дипольный момент атома водорода равен нулю [4]. Компонента электрического момента электрона в проекции на ось z равна $D_z = ez = er \cos\theta$. Тогда

$$\bar{D}_z = e \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \psi_{nlm}^2(r, \theta) r^3 dr \cos\theta \sin\theta d\theta \int_0^{2\pi} \cos^2 m\varphi d\varphi = 0.$$

Второй интеграл по $d\theta$ равен нулю, поскольку подынтегральное выражение является нечетной функцией $\cos\theta$ в симметричных пределах. Это и требовалось доказать.

Таким образом, в атоме водорода должно существовать структурированное распределение плотности вероятности электрона при движении по углу φ для возбужденных состояний, что возможно будет сказываться при его взаимодействии с внешними полями и другими квантовыми объектами.

Библиографический список

1. Ghosh S.K., Deb B.M. Densities, Density-Functionals and Electron Fluids // Physics Reports (Review Section of Physics Letters). 1982. V. 92. № 1. P. 1–44.
2. Алексеев Б.В., Абакумов А.И. Об одном подходе к решению уравнения Шредингера // Доклады Академии наук. 1982. Т. 262. С. 1100–1102.
3. Неволин В.К. Квантовый транспорт в устройствах электроники // М.: Техносфера, 2012. 87 с.
4. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Квантовая механика. Нерелятивистская теория. М.: Наука, 1974. 130 с.