

УДК 539+54

А. И. СЕРЫЙ

Беларусь, Брест, БрГУ имени А. С. Пушкина

ЗАДАЧИ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ ОБ АТОМЕ ГЕЛИЯ И МОЛЕКУЛЕ ВОДОРОДА: СХОДСТВА И РАЗЛИЧИЯ

Молекула водорода и атом гелия – примеры относительно простых квантовых систем, изучаемых в курсах физики атома и квантовой механики. Несмотря на их простоту по сравнению с многоэлектронными атомами и многоатомными молекулами (либо даже двухатомными молекулами, но состоящими из многоэлектронных атомов), они сложны по сравнению с атомом водорода и водородоподобными ионами. Вследствие этого соответствующий учебный материал оказывается, как правило, непростым для усвоения (например, наличие визуально похожих математических выражений при изложении теорий обеих упомянутых систем, как правило, не сопровождается разъяснением отличий между этими выражениями, а самостоятельно выявить эти различия учащиеся не всегда способны). Альтернативный подход к изложению материала, направленный на решение данной проблемы, заключается в использовании сравнительных таблиц. Предложенные ниже таблицы 1–5 составлены на основе сведений из [1, с. 312–328], [2, с. 328–355, 424–431], [3, с. 138–139] и могут быть использованы в образовательном процессе при изучении физики и химии.

Таблица 1 – Сравнительная характеристика спектров излучения атома гелия и молекулы водорода

Параметр сравнения	Атом гелия	Молекула водорода
Спектр можно сравнить	со спектрами щелочных металлов (ЩМ)	со спектром атома водорода
Особенности расположения уровней энергии	Уровни парагелия – синглетные, уровни ортогелия с тем же набором квантовых чисел n, l, m (если принцип Паули не запрещает существование таких состояний) – триплетные, их энергия ниже	Электронные (в пределе диссоциации – как у двух изолированных атомов водорода), колебательные (разность между ними меньше, чем между электронными) и вращательные (разность еще меньше) уровни энергии
Особенности спектра	По две серии с теми же названиями, что и у ЩМ, причем каждая серия парагелия синглетная, а каждая серия ортогелия – триплетная	Электронно-колебательные, колебательно-вращательные и вращательные полосы (в соответствии с общей теорией молекулярных спектров)

Таблица 2 – Сравнительная характеристика состояний атома гелия и молекулы водорода

Параметр сравнения	Атом гелия	Молекула водорода
1.1. Основное состояние (ОС) для пары электронов	Синглетное	Синглетное
1.2. Необходимость вычисления обменных интегралов в ОС	Нет, т. к. обменный интеграл совпадает с кулоновским	Да
2.1. Почему основное состояние не является триплетным	Это приводит к одинаковому набору всех четырех квантовых чисел у обоих электронов, что запрещено принципом Паули	Принцип Паули не допускает, чтобы плотность вероятности нахождения обоих электронов вблизи плоскости симметрии молекулы была большой, поэтому кулоновское отталкивание протонов приводит к распаду молекулы
2.2. Объяснение математической точки зрения	Волновая функция обращается в ноль	График зависимости энергии молекулы от расстояния между протонами не имеет локального минимума
3.1. Возбужденные синглетные состояния	Есть	Есть
3.2. Возбужденные триплетные состояния	Есть (если разрешены принципом Паули; их энергия ниже энергии аналогичных синглетных состояний)	Отсутствуют (объяснение то же, что и в п. 2.1 данной таблицы для молекулы водорода)

Далее используются обозначения: Ψ – волновая функция (далее – ВФ), $E_0 = E_{01} + E_{02}$ – энергия системы в нулевом приближении, $E_{01} = E_{02} = \varepsilon_0$ – энергия отдельного электрона в соответствующем атоме водорода или водородоподобном ионе гелия, E_{1s} – поправка первого порядка к энергии с симметричной пространственной ВФ (т. е. в синглетном по спину состоянии), E_{1a} – поправка первого порядка к энергии с антисимметричной пространственной ВФ (т. е. в триплетном по спину состоянии), C_s и C_a – нормировочные константы для ВФ в соответствующих состояниях, $\hat{V}$ – кулоновский оператор возмущения [1, с. 313, 323], T – обменный интеграл, K – кулоновский интеграл, K_T – обменный кулоновский интеграл, $d\tau_i = dx_i dy_i dz_i$ ($i=1,2$) – элементы объема при вычислении интегралов для i -го электрона.

Таблица 3 – Сравнительная характеристика уровней ортогелия и парагелия

Параметр сравнения	Парагелий	Ортогелий
Состояние, в котором у обоих электронов $n=1$, $l=m=0$	Разрешено с точки зрения принципа Паули, т. к. $m_{s1} = -m_{s2}$	Запрещено с точки зрения принципа Паули, т. к. $m_{s1} = m_{s2}$
Т. е. может быть основным (нормальным) состоянием	Да, именно так и есть	Нет (в силу замечания выше)
Другие состояния, в которых у электронов одинаковые наборы значений квантовых чисел n, l, m	Разрешены с точки зрения принципа Паули, т. к. $m_{s1} = -m_{s2}$, сравнение их с аналогичными состояниями ортогелия лишено смысла (см. замечание справа)	Запрещены с точки зрения принципа Паули, т. к. $m_{s1} = m_{s2}$
Другие состояния, в которых у электронов различные наборы значений квантовых чисел n, l, m	Разрешены с точки зрения принципа Паули, их энергия выше энергии аналогичных состояний ортогелия	Разрешены с точки зрения принципа Паули, их энергия ниже энергии аналогичных состояний парагелия
Частотный диапазон спектральных серий	Преимущественно ультрафиолетовая часть спектра	Инфракрасная и видимая части спектра
В S -состоянии	диамагнитен, не обнаруживает зеемановского расщепления	парамагнитен, обнаруживает зеемановское расщепление

Таблица 4 – Сравнительный анализ волновой функции в двух задачах

Параметр сравнения	Задача об атоме гелия	Задача о молекуле водорода
Одночастичные ВФ	$\psi_1^0(1), \psi_1^0(2), \psi_k^0(1), \psi_k^0(2)$	$\psi_A(1), \psi_A(2), \psi_B(1), \psi_B(2)$
Симметричная ВФ	$\psi_s^0(1,2) = C_s (\psi_1^0(1)\psi_k^0(2) + \psi_k^0(1)\psi_1^0(2))$	$\psi_s^0(1,2) = C_s (\psi_A(1)\psi_B(2) + \psi_B(1)\psi_A(2))$
Антисимметричная ВФ	$\psi_a^0(1,2) = C_a (\psi_1^0(1)\psi_k^0(2) - \psi_k^0(1)\psi_1^0(2))$	$\psi_a^0(1,2) = C_a (\psi_A(1)\psi_B(2) - \psi_B(1)\psi_A(2))$
C_s	$(2(1+T))^{-1/2}$	
C_a	$(2(1-T))^{-1/2}$	
T	$\int \psi_1^{0*}(2)\psi_1^0(1)\psi_k^{0*}(2)\psi_k^0(1)d\tau_1d\tau_2$	$\int \psi_A^*(1)\psi_A(2)\psi_B^*(2)\psi_B(1)d\tau_1d\tau_2$

Таблица 5 – Составляющие энергии в двух задачах

Величина	Задача об атоме гелия	Задача о молекуле водорода
E_{1s}	$\int \psi_s^{0*}(1,2) \hat{V} \psi_s^0(1,2) d\tau_1 d\tau_2 = \int \hat{V} \psi_s^0(1,2) ^2 d\tau_1 d\tau_2 = (K + K_T)/(1+T)$	
E_{1a}	$\int \psi_a^{0*}(1,2) \hat{V} \psi_a^0(1,2) d\tau_1 d\tau_2 = \int \hat{V} \psi_a^0(1,2) ^2 d\tau_1 d\tau_2 = (K - K_T)/(1-T)$	
K	$\int \hat{V} \psi_1^0(1) ^2 \psi_k^0(2) ^2 d\tau_1 d\tau_2$	$\int \hat{V} \psi_A(2) ^2 \psi_B(1) ^2 d\tau_1 d\tau_2$
K_T	$\int \hat{V} \psi_1^0(1) \psi_k^{0*}(1) \psi_k^0(2) \psi_1^{0*}(2) d\tau_1 d\tau_2$	$\int \hat{V} \psi_A^*(1) \psi_A(2) \psi_B^*(2) \psi_B(1) d\tau_1 d\tau_2$

В статье предполагалось, что ядро атома гелия является альфа-частицей (два протона и два нейтрона, спин нулевой), а ядра обоих атомов молекулы водорода – протонами. Статья является дополнением к публикациям [4], [5] по затрагиваемой проблеме.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

1. Сивухин, Д. В. Атомная и ядерная физика : учеб. пособие : в 2 ч. / Д. В. Сивухин. – М. : Наука, 1986. – Ч. 1 : Атомная физика. – 416 с.
2. Шпольский, Э. В. Атомная физика : в 2 т. / Э. В. Шпольский. – 4-е изд., перераб. – М. : Наука, 1974. – Т. 2 : Основы квантовой механики и строение электронной оболочки атома. – 448 с.
3. Савельев, И. В. Курс общей физики : учеб. пособие : в 3 т. / И. В. Савельев. – 3-е изд., испр. – М. : Наука, 1987. – Т. 3 : Квантовая оптика. Атомная физика. Физика твердого тела. Физика атомного ядра и элементарных частиц. – 320 с.
4. Серый, А. И. Об орто- и парасостояниях молекулы водорода и атома гелия в курсе атомной физики / А. И. Серый // Образование, обучение и воспитание: актуальные вопросы теории и практики : сб. ст. II Междунар. науч.-практ. конф. – Пенза : Наука и Просвещение, 2023. – С. 158–160.
5. Серый, А. И. О сравнительной характеристике задач квантовой механики об атоме гелия и молекуле водорода / А. И. Серый // Менделеевские чтения – 2024 : электрон. сб. материалов Междунар. науч.-практ. конф. по химии и хим. образованию, Брест, 22 февр. 2024 г. / Брест. гос. ун-т им. А. С. Пушкина ; редкол.: Е. Г. Артемук (отв. ред.), Н. С. Ступень. – Брест : БрГУ, 2024. – С. 278–280. – URL: <http://rep.brsu.by/handle/123456789/10067> (дата обращения: 21.01.2025).