

Астраханский государственный технический университет
Астраханский филиал Российского научного центра физического
образования

Ю. Ю. Тарасевич, И. В. Водолазская

Квантовая физика
МНОГОЭЛЕКТРОННЫЕ АТОМЫ
И МОЛЕКУЛЫ

Астрахань, 1996

УДК 53

Тарасевич Ю. Ю., Водолазская И. В. Квантовая физика. Многоэлектронные атомы и молекулы. — Астрахань, АГТУ, 1996.

Рекомендовано в качестве методического пособия для инженерных специальностей (Протокол № 1 заседания кафедры физики от 11 октября 1996)

Рецензент: к. ф. н., доц. С. С. Воронков (ИУУ).

Настоящее методическое пособие составлено в соответствии со следующими документами:

Государственный образовательный стандарт высшего профессионального образования. Государственные требования к минимальному содержанию и уровню подготовки выпускников по специальности 220200 — Автоматизированные системы обработки информации и управления; Государственные требования к минимальному содержанию и уровню подготовки выпускников по специальности 210200 — Автоматизация технологических процессов и производств;

Примерная типовая программа дисциплины физика. Для направлений: 550000 — Технические науки, 540000 — профессиональное обучение. Одобрена Президиумом НМС по физике 29.11.94. Утверждена начальником Главного управления образовательно-профессиональных программ и технологий.

Пособие включает материал, предусмотренный минимумом содержания курса физики, однако отсутствующий в общедоступных учебниках и учебных пособиях по физике для технических вузов.

Данный выпуск посвящен многоэлектронным атомам и молекулам. На примере атома гелия демонстрируется метод нахождения электронного строения атомов. Вводятся обменные силы. Образование химической связи в молекулах продемонстрировано на примере молекулы водорода.

© Ю. Ю. Тарасевич, И. В. Водолазская, 1996

Содержание

1. Атом гелия	4
1.1. Постановка задачи	4
1.2. Модельный гамильтониан	4
1.3. Нулевое приближение — невзаимодействующие электроны . .	5
1.4. Многоэлектронная волновая функция	6
1.5. Энергия атома в нулевом приближении	7
1.6. Энергия атома с учетом межэлектронного взаимодействия . .	7
1.7. Анализ результатов	9
2. Молекула водорода	11
2.1. Постановка задачи и модельный гамильтониан	11
2.2. Волновая функция системы	11
2.3. Энергия системы	13
2.4. Анализ результатов	13

1. Атом гелия

1.1. Постановка задачи

Классическая теория совместно с правилами квантования орбит Бора дала блестящие результаты при описании атома водорода. Этот успех вселял надежду, что ее применение к многоэлектронным атомам также будет плодотворным. Однако применение классической теории даже к простейшему многоэлектронному атому — атому гелия — потерпело полный крах. В частности, не удалось объяснить спектр атома гелия.

Эксперимент показывает, что в спектре гелия присутствуют две группы линий: одинарные — *синглеты* и тройные — *триплеты*. Соответственно выделяют две группы термов, причем переходы из одной группы в другую практически невозможны. Создается впечатление, что заведомо химически чистый гелий состоит из атомов двух сортов. Атомы одного сорта, дающие в спектре одинарные линии, назвали *парагелием*, атомы другого сорта — *ортогелием*.

Строгое применение квантовомеханического подхода к решению задачи об атоме водорода позволило объяснить тонкую структуру спектра, естественным образом дало правила квантования орбит. Однако даже в этой простейшей задаче — один электрон в центральносимметричном поле — математический аппарат оказался достаточно громоздким.

Встает задача описать атом гелия с позиций квантовой механики по возможности простыми математическими методами, применяя для этого какие-то разумные приближения.

Впервые задача об атоме гелия была решена в 1926 г В. Гейзенбергом.

1.2. Модельный гамильтониан

Атом гелия состоит из ядра (два протона и два нейтрона) и двух электронов. Мы будем считать, что ядро неподвижно, и не будем принимать во внимание его кинетическую энергию. Такое приближение вполне оправдано: масса ядра примерно в четыре тысячи раз больше массы электронов, поэтому атом можно разделить на две подсистемы — тяжелую и малоподвижную ядерную и легкую подвижную электронную. Подвижная электронная подсистема в любой момент времени подстраивается под движение ядра. Такое приближение называется *адиабатическим* или *приближением Борна–Оппенгеймера*. Кроме того мы не будем учитывать спиновое взаимодействие.

Энергия атома складывается из

- кинетической энергии электронов;

- потенциальной энергии кулоновского взаимодействия электронов с ядром;
- потенциальной энергии кулоновского взаимодействия электронов между собой.

Будем обозначать координаты электронов \vec{r}_1 и \vec{r}_2 и запишем гамильтониан системы

$$\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2 + \hat{V}_{12}, \quad (1)$$

где

$\hat{H}_i = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_i - k\frac{2e^2}{r_i}$ — одноэлектронный гамильтониан i -го электрона без учета межэлектронного взаимодействия (гамильтониан водородоподобного атома),

$\hat{V}_{12} = k\frac{e^2}{r_{12}}$ — оператор межэлектронного взаимодействия,

$$\Delta_i = \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_i^2},$$

$$k = \frac{1}{4\pi\epsilon_0},$$

$r_{12} = |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|$ — расстояние между электронами.

1.3. Нулевое приближение — невзаимодействующие электроны

Если не учитывать взаимодействие между электронами, то гамильтониан системы состоит из двух слагаемых, одно из которых зависит только от \vec{r}_1 , а другое только от \vec{r}_2 . Тогда волновая функция системы может быть представлена в виде произведения одноэлектронных волновых функций

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \Psi(\vec{r}_1)\Psi(\vec{r}_2). \quad (2)$$

При этом

$$\hat{H}_i\Psi(\vec{r}_i) = E_n\Psi(\vec{r}_i), \quad (3)$$

где E_n — одноэлектронная энергия, то есть энергия электрона в водородоподобном атоме.

Хотя предложенный способ построения волновой функции математически обоснован, волновая функция не является антисимметричной, поэтому правильно построенная волновая функция будет представлять из себя линейную комбинацию волновых функций вида (2).

1.4. Многоэлектронная волновая функция

Поскольку гамильтониан не зависит от спина, волновую функцию можно представить в виде произведения спиновой и координатной части

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \Phi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)\chi(s_1, s_2),$$

где $\Phi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ зависит только от координат, а $\chi(s_1, s_2)$ только от спинов.

В соответствии с принципом Паули волновая функция системы двух электронов должна быть антисимметрична относительно перестановки электронов. Возможны две ситуации: координатная часть волновой функции симметрична, а спиновая часть антисимметрична и координатная часть антисимметрична, а спиновая симметрична.

Координатные части волновой функции

$$\Phi_a(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_n(\vec{r}_1)\psi_m(\vec{r}_2) - \psi_n(\vec{r}_2)\psi_m(\vec{r}_1)] \quad (4)$$

— антисимметричная,

$$\Phi_s(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_n(\vec{r}_1)\psi_m(\vec{r}_2) + \psi_n(\vec{r}_2)\psi_m(\vec{r}_1)] \quad (5)$$

— симметричная.

$\psi_n(\vec{r}_i), \psi_m(\vec{r}_i)$ — одноэлектронные волновые функции, соответствующие n -му и m -му энергетическому состоянию.

Традиционно спиновую часть волновой функции, соответствующую проекции спина, направленной вверх, обозначают α , а проекции спина, направленной вниз — β . В случае системы двух электронов спиновая часть волновой функции может иметь вид $\alpha\alpha, \alpha\beta, \beta\alpha, \beta\beta$, что соответствует ситуациям: оба спина направлены вверх; один вверх, другой вниз; оба спина направлены вниз.

Спиновые части волновой функции

$$\chi_s = \alpha\alpha, \quad \chi_s = \beta\beta, \quad \chi_s = \frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha\beta + \beta\alpha) \quad (6)$$

— симметричная,

$$\chi_a = \frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha\beta - \beta\alpha) \quad (7)$$

— антисимметричная.

χ_s соответствует полному спину системы равному 1, а χ_a — полному спину, равному 0.

Таким образом, имеем одну волновую функцию вида

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \Phi_s(\vec{r}_1, \vec{r}_2)\chi_a(s_1, s_2) \quad (8)$$

и три волновые функции вида

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \Phi_a(\vec{r}_1, \vec{r}_2)\chi_s(s_1, s_2). \quad (9)$$

Обратите внимание, что волновая функция $\Phi_a(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ обращается в ноль, если $m = n$, тем самым выполняется требование принципа запрета Паули: два электрона не могут находиться в одинаковом квантовом состоянии.

1.5. Энергия атома в нулевом приближении

Если пренебречь межэлектронным взаимодействием, то гамильтониан системы представляет сумму одночастичных гамильтонианов. Действие одночастичного гамильтониана на волновую функцию определяется уравнением (3). Прямой подстановкой волновых функций (29) и (5) в уравнение Шрёдингера можно получить очевидный результат, что энергия системы равна сумме одноэлектронных энергий $E_n + E_m$.

$$\begin{aligned} (\hat{H}_1 + \hat{H}_2) \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_n(\vec{r}_1)\psi_m(\vec{r}_2) \pm \psi_n(\vec{r}_2)\psi_m(\vec{r}_1)] &= \\ = \frac{1}{\sqrt{2}} [(E_n + E_m) \psi_n(\vec{r}_1)\psi_m(\vec{r}_2) \pm (E_n + E_m) \psi_n(\vec{r}_2)\psi_m(\vec{r}_1)] &= \\ = (E_n + E_m) \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_n(\vec{r}_1)\psi_m(\vec{r}_2) \pm \psi_n(\vec{r}_2)\psi_m(\vec{r}_1)] & \quad (10) \end{aligned}$$

В дальнейшем мы будем полагать, что энергия межэлектронного взаимодействия много меньше одноэлектронных энергий, и будем рассматривать межэлектронное взаимодействие как малую поправку (возмущение) к гамильтониану. Тогда разумно предположить, что и волновая функция системы изменится незначительно при учете межэлектронного взаимодействия, и в качестве начального приближения мы можем воспользоваться волновыми функциями (4) и (5) для дальнейшего уточнения решения.

1.6. Энергия атома с учетом межэлектронного взаимодействия

Для нахождения энергии умножим уравнение Шрёдингера

$$\left(\hat{H}_1 + \hat{H}_2 + k \frac{e^2}{r_{12}} \right) \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = E \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2), \quad (11)$$

слева на $\Psi^*(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ и проинтегрируем по всему объему по координатам \vec{r}_1 и \vec{r}_2

$$\iint \Psi^*(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \hat{H} \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) dV_1 dV_2 = E \iint \Psi^*(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) dV_1 dV_2. \quad (12)$$

Интеграл в правой части уравнения в силу ортонормированности волновых функций равен 1. Интеграл в левой части разбивается на два слагаемых: одночастичное, совпадающее с (10), и двухчастичное

$$\iint \Psi^*(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \hat{V} \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) dV_1 dV_2. \quad (13)$$

Поскольку оператор межэлектронного взаимодействия не действует на спиновые части волновых функций, интеграл может быть переписан в виде

$$\iint \Phi^*(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \hat{V} \Phi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) dV_1 dV_2. \quad (14)$$

Подставим явные выражения для координатной части волновой функции и оператора межэлектронного взаимодействия

$$\begin{aligned} \iint \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_n^*(\vec{r}_1) \psi_m^*(\vec{r}_2) \pm \psi_n^*(\vec{r}_2) \psi_m^*(\vec{r}_1)) k \frac{e^2}{r_{12}} \frac{1}{\sqrt{2}} \times \\ \times (\psi_n(\vec{r}_1) \psi_m(\vec{r}_2) \pm \psi_n(\vec{r}_2) \psi_m(\vec{r}_1)) dV_1 dV_2 \end{aligned} \quad (15)$$

где знак “−” соответствует антисимметричной по координатной части волновой функции (4), а знак “+” — симметричной (5). Раскрывая скобки, получаем следующие слагаемые:

1.

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} k e^2 \iint \psi_n^*(\vec{r}_1) \psi_m^*(\vec{r}_2) \frac{1}{r_{12}} \psi_n(\vec{r}_1) \psi_m(\vec{r}_2) dV_1 dV_2 = \\ = \frac{1}{2} k e^2 \iint \frac{|\psi_n(\vec{r}_1)|^2 |\psi_m(\vec{r}_2)|^2}{r_{12}} dV_1 dV_2 = \\ = \frac{1}{2} k e^2 \iint \frac{\rho(\vec{r}_1, E_n) \rho(\vec{r}_2, E_m)}{r_{12}} dV_1 dV_2. \end{aligned}$$

Квадрат модуля волновой функции — плотность вероятности того, что электрон с заданной энергией находится в объеме dV_i с координатой r_i . Плотность вероятности умноженная на заряд — плотность распределения заряда электрона;

2. такое же слагаемое, в котором индексы 1 и 2 поменялись местами;

3.

$$\pm \frac{1}{2} k e^2 \iint \psi_n^*(\vec{r}_1) \psi_m^*(\vec{r}_2) \frac{1}{r_{12}} \psi_m(\vec{r}_1) \psi_n(\vec{r}_2) dV_1 dV_2;$$

4. такое же слагаемое, в котором индексы 1 и 2 поменялись местами.

Слагаемые 1) и 2) описывают кулоновское взаимодействие электрона с координатой \vec{r}_i и энергией E_n и электрона с координатой \vec{r}_j и энергией E_m . Очевидно, что эти слагаемые равны между собой. Обозначим их C .

Слагаемые 3) и 4), очевидно также равны между собой. Обозначим их A . Эти слагаемые также описывают кулоновское взаимодействие между электронами, но взаимодействие специфическое, отсутствующее в классической физике. Такое взаимодействие называют *обменным*. Обменное взаимодействие возникает из-за перераспределения электронной плотности в пространстве. Слагаемое 3) можно интерпретировать как энергию кулоновского взаимодействия электрона с энергией E_n с электроном с энергией E_m , причем каждый электрон находится одновременно в объемах с координатами \vec{r}_i и \vec{r}_j . В частном случае, когда электроны находятся в состояниях с одинаковой энергией ($n = m$), энергия обменного взаимодействия в точности равна кулоновской энергии ($C = A$).

Таким образом, решением уравнение (11) является энергия

$$E = E_n + E_m + C \pm A. \quad (16)$$

1.7. Анализ результатов

Знак “-” в уравнении (16) соответствует волновой функции с антисимметричной координатной частью. Таких функций 3, следовательно, состояния с энергией

$$E_T = E_n + E_m + C - A. \quad (17)$$

трехкратно вырождены (являются триплетными) и соответствуют ортоголию. Поскольку при $n = m$ волновая функция обращается в ноль, уравнение (17) справедливо только для случаев $n \neq m$.

Знак “+” в уравнении (16) соответствует волновой функции с симметричной координатной частью. Такая волновая функция только одна, следовательно, состояние однократно вырождено (синглет, парагелий).

$$E_C = E_n + E_m + C + A. \tag{18}$$

Очевидно, что основному состоянию атома соответствует энергия

$$E_C^{(0)} = 2E_0 + 2C. \tag{19}$$

Используя в качестве грубой иллюстрации планетарную модель атома, состояния орто- и парагелия можно представить в следующем виде

	основное состояние	возбужденное состояние
парагелий		
ортогелий		

Энергия основного состояния ортогелия выше, чем энергия основного состояния парагелия, однако переход ортогелия в парагелий невозможен, так как должен сопровождаться переворотом спина, поэтому состояния ортогелия устойчивы. Перевести ортогелий в парагелий возможно, например, путем бомбардировки атома пучком электронов, тогда, возможно, один из электронов в атоме заместится на электрон с противоположным спином из числа падающих на атом электронов, и состояние ортогелия превратится в возбужденное состояние парагелия.

На самом деле оказывается, что сделанное нами в п. 1.5 предположение о малости межэлектронного взаимодействия неверно: по порядку величины одноэлектронные энергии и энергия межэлектронного взаимодействия

близки. Следовательно, полученные нами результаты не могут претендовать на количественную точность, а только качественно передают основные черты электронного строения атома гелия.

2. Молекула водорода

2.1. Постановка задачи и модельный гамильтониан

Молекула водорода H_2 является следующей по сложности после атома гелия многоэлектронной системой. Впервые задача об уровнях энергии молекулы водорода была решена в 1927 г. В. Гайтлером и Ф. Лондоном. Предложенный ими метод получил название *метода Гайтлера–Лондона*.

Молекула состоит из двух ядер водорода (протонов) и двух электронов. Как и в случае атома гелия мы будем использовать адиабатическое приближение, то есть будем считать, что ядра неподвижны. Энергия молекулы складывается из кинетической энергии электронов, энергии электростатического взаимодействия электронов с каждым из ядер, электронов между собой и ядер между собой.

Будем обозначать ядра индексами a и b , а электроны индексами 1 и 2. Расстояние между ядрами — r , расстояние между электронами — r_{12} , расстояние между j -м ядром и i -м электроном — r_{ji} . Тогда гамильтониан системы запишется в виде

$$\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2 + k \frac{e^2}{r} + k \frac{e^2}{r_{12}} - k \frac{e^2}{r_{a2}} - k \frac{e^2}{r_{b1}}, \quad (20)$$

$$\hat{H}_1 = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_1 - k \frac{e^2}{r_{a1}}, \quad \hat{H}_2 = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_2 - k \frac{e^2}{r_{b2}}. \quad (21)$$

2.2. Волновая функция системы

Пусть первоначально имеется два изолированных, то есть удаленных на бесконечное расстояние друг от друга, атома водорода. В такой системе электроны взаимодействуют только со своими ядрами и гамильтониан системы равен сумме одноэлектронных гамильтонианов изолированных атомов (первые два слагаемых в (20)). Волновая функция такой системы равна произведению волновых функций электронов отдельных атомов. Чтобы удовлетворить принципу Паули, следует построить линейные комбинации таких произведений, обладающие антисимметрией относительно перестановки электронов.

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = N^\pm (\psi_a(\vec{r}_1) \psi_b(\vec{r}_2) \pm \psi_a(\vec{r}_2) \psi_b(\vec{r}_1)) \chi(s_1, s_2). \quad (22)$$

Знак “+” соответствует антисимметричной спиновой части волновой функции (спин системы равен нулю), знак “−” — симметричной (спин системы равен единице). N^\pm — нормировочный множитель. Будем полагать, что при сближении атомов и образовании молекулы энергия взаимодействия меньше одноэлектронной энергии. Тогда волновые функции системы изменятся незначительно, и в качестве волновых функций молекулы в первом приближении можно использовать функции (1). Найдем нормировочные множители N^\pm из условия ортонормированности волновых функций

$$\iint \Psi^*(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) dV_1 dV_2 = 1. \quad (23)$$

Подставим явные выражения для волновой функции (1)

$$\begin{aligned} (N^\pm)^2 \int \psi_a^*(\vec{r}_1) \psi_a(\vec{r}_1) dV_1 \cdot \int \psi_b^*(\vec{r}_2) \psi_b(\vec{r}_2) dV_2 \pm \\ \pm \int \psi_a^*(\vec{r}_1) \psi_b(\vec{r}_1) dV_1 \cdot \int \psi_a^*(\vec{r}_2) \psi_b(\vec{r}_2) dV_2 + \dots \end{aligned} \quad (24)$$

Многоточием обозначены аналогичные слагаемые, в которых индексы 1 и 2 поменялись местами. В силу ортонормированности атомных волновых функций первое слагаемое равно единице. Во втором слагаемом под интегралом стоят волновые функции, центрированные на различных атомах. Такие интегралы называют *интегралами перекрытия*. Они показывают, на сколько сильно перекрываются волновые функции электронов на соседних атомах. Очевидно, что в случае бесконечно удаленных атомов интеграл перекрытия равен нулю, а в случае, когда $a = b$ — единице. Интеграл перекрытия принято обозначать S ($0 \leq S \leq 1$). Тогда выражение в скобках можно переписать в виде $2(1 \pm S^2)$, где $S = \int \psi_a^*(\vec{r}_i) \psi_b(\vec{r}_i) dV_i$. В данном случае, для простоты мы предположили, что оба атома находятся в одинаковом квантовом состоянии.

Таким образом, нормировочные коэффициенты определяются выражением

$$N^\pm = \frac{1}{\sqrt{2(1 \pm S^2)}}. \quad (25)$$

2.3. Энергия системы

Найдем энергию молекулы, умножая уравнение Шрёдингера слева на Ψ^* и интегрируем по переменным \vec{r}_1 и \vec{r}_2 .

$$\iint \Psi^*(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \hat{H} \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) dV_1 dV_2 = E \iint \Psi^*(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) dV_1 dV_2. \quad (26)$$

Интеграл в правой части (2) равен 1 по условию нормировки. Очевидно, что в левой части (2) при действии одночастичных слагаемых гамильтониана получатся просто энергии водородоподобного атома E_a и E_b . Энергия взаимодействия между ядрами не зависит от положения и состояния электронов и дает постоянный вклад в полную энергию молекулы.

Непосредственная подстановка в формулу (2) многочастичных волновых функций дает, что многоэлектронная часть разбивается на два слагаемых

$$C = ke^2 \iint \psi_a^*(\vec{r}_i) \psi_b^*(\vec{r}_j) \left(\frac{1}{r} + \frac{1}{r_{12}} - \frac{1}{r_{a2}} - \frac{1}{r_{b1}} \right) \psi_a(\vec{r}_i) \psi_b(\vec{r}_j) dV_i dV_j,$$

которое описывает кулоновское взаимодействие, и

$$A = \pm ke^2 \iint \psi_a^*(\vec{r}_i) \psi_b^*(\vec{r}_j) \left(\frac{1}{r} + \frac{1}{r_{12}} - \frac{1}{r_{a2}} - \frac{1}{r_{b1}} \right) \psi_a(\vec{r}_j) \psi_b(\vec{r}_i) dV_i dV_j,$$

которое описывает обменное взаимодействие. В обоих случаях для сокращения записи опущен множитель $(1 \pm S^2)^{-1}$.

Тогда полная энергия синглетного состояния

$$E_c = E_a + E_b + \frac{C + A}{1 + S^2}. \quad (27)$$

Полная энергия триплетного состояния

$$E_T = E_a + E_b + \frac{C - A}{1 - S^2}. \quad (28)$$

2.4. Анализ результатов

Анализ полученных формул полной энергии возможен только на основании численных расчетов. Будем считать, что электроны обоих атомов находятся в основном состоянии. Тогда их волновые функции

$$\psi(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi r_0^3}} \exp\left(-\frac{r}{r_0}\right), \quad (29)$$

где r_0 — боровский радиус.

Расчет показывает (рис. 1), что при сближении двух атомов водорода с одинаковой ориентацией спинов электронов, энергия системы больше энергии изолированных атомов. При сближении атомов с противоположной ориентацией спинов электронов энергия понижается, то есть данная конфигурация оказывается устойчивой. Связь, возникающую в молекуле водорода, принято называть *ковалентной* или *гомеополярной*. Связь возникает благодаря перераспределению электронной плотности в пространстве за счет обменного взаимодействия (рис. 2). Наглядно это можно представить себе следующим образом: между атомными ядрами возникает избыточная электронная плотность, притяжения положительных ядер к этому отрицательному облаку оказывается достаточно, чтобы удержать атомы вместе и образовать устойчивую молекулу. Спины с одинаковой ориентацией не могут находиться в одной области пространства, обменное взаимодействие приводит к расталкиванию электронов, поэтому такая конфигурация не может образовывать связанное состояние.

Список литературы

1. Борн М. Атомная физика — М.: Мир, 1967.
2. Ферми Э. Квантовая механика — М.: Мир, 1968.
3. Нерсесов Э. А. Основные законы атомной и ядерной физики — М.: Высшая школа, 1988.
4. Савельев И. В. Курс общей физики — М.: Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит., 1987. — т. 3.
5. Матвеев А. Н. Атомная физика — М.: Высшая школа, 1989.
6. Суханов А. Д. Лекции по квантовой физике — М.: Высшая школа, 1991.
7. Сивухин Д. В. Атомная и ядерная физика. Ч. 1. Атомная физика — М.: Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит., 1988. — Общий курс физики. Т.V.

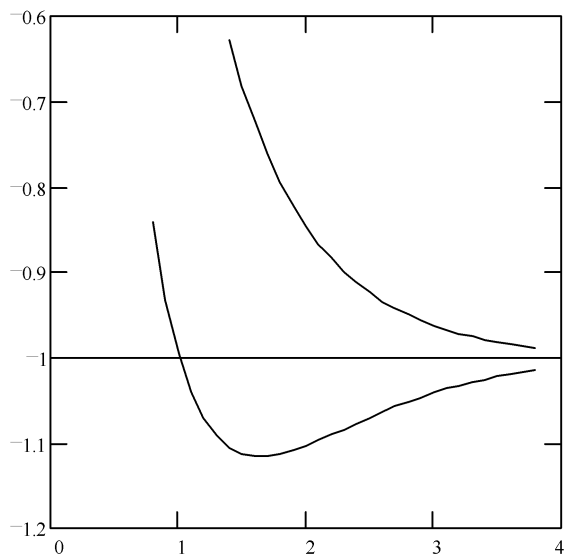
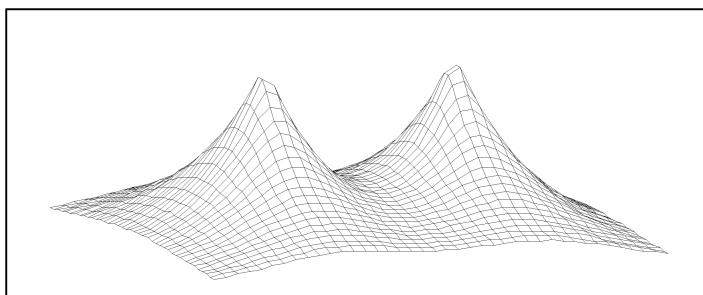
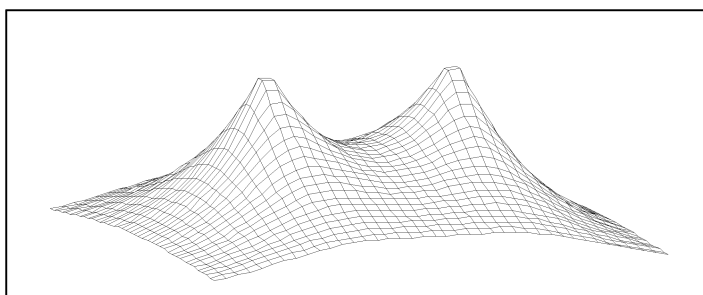


Рис. 1. Зависимость энергии молекулы водорода от расстояния между атомами. Верхний график соответствует триплетному состоянию, нижний — синглетному, горизонтальная линия — энергия невзаимодействующих атомов. Энергия измеряется в атомных единицах, расстояние — в радиусах первой боровской орбиты r_0



a



b

Рис. 2. Пространственное распределение электронной плотности: a – синглетное состояние, b – триплетное