ТЕМА 4.2
«МОДЕЛЬ АТОМА РЕЗЕРФОРДА-БОРА. КВАНТОВОМЕХАНИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ АТОМА ВОДОРОДА»

Вопросы:

1. Элементы квантовой механики. Уравнение Шредингера

Элементы квантовой механики. Уравнение Шрёдингера.

1. Задание состояния частицы в квантовой механике. Волновая функция, ее физический смысл как амплитуды вероятности.
2. Условие нормировки волновой функции. Принцип суперпозиции состояний.
3. Операторы физических величин. Оператор Гамильтона.
4. Уравнения Шредингера: временное и стационарное. Квантовые уравнения движения. Квантовые состояния.
5. Решения уравнения Шредингера. Собственные функции.

1. Задание состояния частицы в квантовой механике. Волновая функция, ее физический смысл как амплитуды вероятности.

Состояние частицы в квантовой механике задается волновой функцией (или пси-функцией) **Ψ(r,t),** зависящей от координат и времени.

Волновая функция – основной носитель информации о корпускулярных и волновых свойствах микрочастиц.

В частном случае свободного движения частицы волновая функция – плоская волна де Бройля:

$$\boxed{\Psi(x,t) = A \cdot e^{-\frac{i}{h}(E \cdot t - p \cdot x)}}$$

Вероятность нахождения частицы в момент времени **t** с координатами **x** и **x+dx**, **y** и **y+dy**, **z** и **z+dz** определяется интенсивностью волновой функции, т. е. квадратом пси-функции.

$$\boxed{|\Psi|^2 = \Psi \cdot \Psi^*}$$

т.к. **Ψ** — комплексная функция, а вероятность должна быть всегда действительной и положительной величиной, за меру интенсивности принимается квадрат модуля волновой функции. $\boldsymbol{\Psi}^*$ — функция, комплексно сопряженная **Ψ.**

Вероятность нахождения частицы в элементе объема **dV** в момент времени **t**:

$$\boxed{dW = |\Psi|^2 dV}$$

Плотность вероятности, т. е. вероятность нахождения частицы в момент времени t в окрестности данной точки пространства. Плотность вероятности — величина, наблюдаемая на опыте, в то время как сама волновая функция, являясь комплексной, наблюдению недоступна.

$$\boxed{w = \frac{dW}{dV} = |\Psi|^2}$$

Вероятность найти частицу в момент времени **t** в некотором объеме **V** :

$$\boxed{W = \int_V dW = \int_V |\Psi|^2 dV}$$

2. Условие нормировки волновой функции. Принцип суперпозиции состояний.

$$\boxed{W = \int_V dW = \int_V |\Psi|^2 dV}$$

Проинтегрировав это выражение в бесконечных пределах, получим вероятность того, что частица в момент времени **t** находится где-то в пространстве. Это есть вероятность достоверного события, а ее в теории вероятностей считают равной **1**.

$$\boxed{\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x, y, z, t)|^2 dV = 1}$$

Волновая функция - объективная характеристика состояния микрочастиц и должна удовлетворять ряду ограничений, и должна быть:

конечной (вероятность не может быть больше единицы);

однозначной (вероятность не может быть неоднозначной величиной);

непрерывной (вероятность не может изменяться скачком).

Принцип суперпозиции состояний для волновых функций:

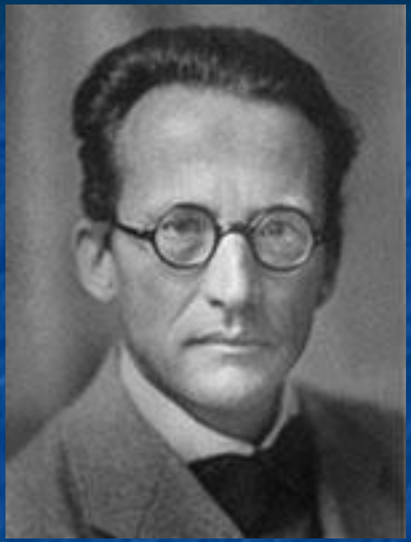
Если какая-либо система (частица или их совокупность) может находиться в различных состояниях, описываемых волновыми функциями $\Psi_1, \Psi_2, \ldots, \Psi_n$, то она может находиться в состоянии Ψ, описываемом линейной комбинацией этих функций.

$$\boxed{\Psi = \sum_n C_n \Psi_n}$$

3. Операторы физических величин. Оператор Гамильтона.

Самостоятельно

4. Уравнения Шрёдингера: временное и стационарное. Квантовые уравнения движения. Квантовые состояния.



Временное уравнение Шредингера:

$$\boxed{\frac{\hbar}{2m}\Delta\Psi + U(x,y,z,t)\Psi = i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}}$$

В случае стационарного силового поля волновая функция представляется в виде произведения двух функций: одна – функция только координат, другая – только времени.

$$\boxed{\Psi(x,y,z,t) = \psi(x,y,z)\cdot e^{-\frac{i}{h}Et}}$$

Стационарное уравнение Шредингера:

$$\boxed{\Delta\psi + \frac{2m}{\hbar^{2}}(E-U)\psi = 0}$$

Д

В

5. Решения уравнения Шредингера. Собственные функции.

Самостоятельно