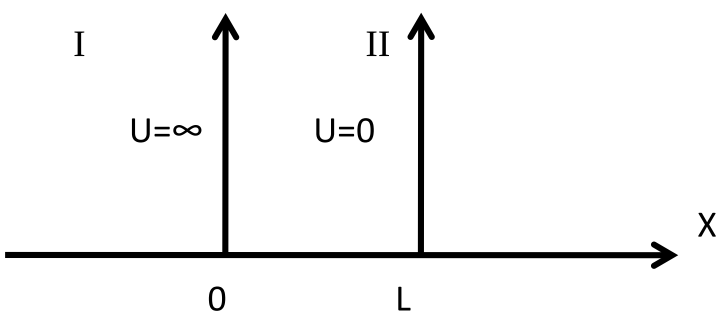
Лекция №14

Уравнение Шредингера

Микрочастица в бесконечно глубокой одномерной потенциальной яме Атом водорода по Шредингеру. Момент импульса и его проекция на направление магнитного поля. Опыт Штерна-Герлаха

Опорный конспект

Микрочастица в бесконечно глубокой одномерной потенциальной яме



Пусть микрочастица массой m находится в одномерной потенциальной яме шириной L. Потенциальная энергия микрочастицы в яме равна нулю. Поскольку яма бесконечно глубока, то потенциальная энергия слева и справа от ямы скачком обращается в ∞ и вероятность обнаружения микрочастицы слева и справа от ямы равна нулю.

Волновую функцию ψ, описывающую поведение микрочастицы на всем протяжении оси X, разобьем на три части:

I-ая часть – x≤0 описывается волновой функцией ψ_1,
II -ая часть - 0 ≤ x ≤L описывается волновой функцией ψ_2,
III-ья часть - x≥L описывается волновой функцией ψ_3.

Поскольку в I и III областях вероятность обнаружения микрочастицы равна нулю, то $\psi_1(x)\equiv 0$ и $\psi_3(x)\equiv 0$. В силу непрерывности волновой функции ψ при x=0 и x=L ψ_2 также должна обращаться в ноль: $\psi_2(0)=0$, $\psi_2(L)=0$ (граничные условия).

Уравнение Шредингера для II-ой области имеет вид: $\frac{d^2\psi_2}{dx^2} + k^2 \cdot \psi_2 = 0$

Решение этого уравнения удобнее всего записать в виде: $\psi_2(x) = A\sin(k \cdot x + \alpha)$

Граничные условия: $\psi_2(0) = \psi_1(0) = 0$ откуда $\alpha = 0$

$\psi_2(L) = \psi_3(L) = 0$ откуда $k = \frac{n \cdot \pi}{L}$

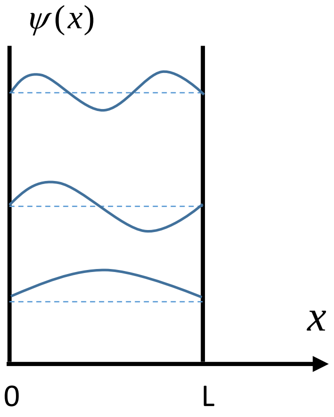
Оказалось, что решения уравнения Шредингера существуют только при определенных, дискретных значениях k !

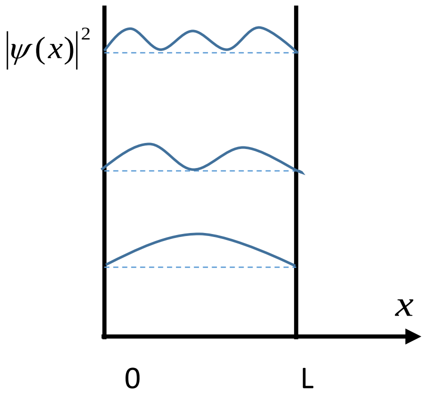
Условие нормировки: $\int_0^L [\Psi]^2 = \int_0^L [A]^2 sin^2\left(\frac{\pi \cdot n}{L}x\right)dx = 1$ откуда $A = \sqrt{\frac{2}{L}}$

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}}\sin(\frac{\pi \cdot n}{L}x)$$ - это собственная функция

Примечание: в данном случае знак «n» означает не область на оси X, а номер собственной волновой функции во II-ой области

Собственные значения энергии $E=\dfrac{\hbar^2}{2m}k^2=\dfrac{\hbar^2 n^2\pi^2}{2mL^2}=\dfrac{h^2n^2}{8mL^2}$



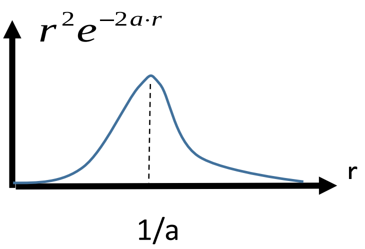


Дискретность энергетических состояний в макромире не играет никакой роли. В микро-мире дискретностью состояний микрочастиц уже пренебрегать нельзя.

Атом водорода по Шредингеру

$\Delta\psi+\dfrac{2m}{\hbar^2}(E+\dfrac{e^2}{r})\psi=0$ уравнение Шредингера для атома водорода

Решение этого уравнения ищется в виде: $\psi(r)=e^{-r\cdot a}$ *



$$a=\frac{m\cdot e^2}{\hbar^2} \qquad E=-\frac{m\cdot e^4}{2\hbar^2}$$

$$\frac{1}{a}=\frac{\hbar^2}{m\cdot e^2}\to 0{,}53A^o \qquad E=-\frac{m\cdot e^4}{2\hbar^2}=-13{,}6\,эВ$$

Эти данные в точности совпадают с параметрами электрона, находящегося на первой стационарной орбите в атоме водорода по Бору.

Сравнительное описание состояния электрона в атоме водорода по Бору и по Шредингеру

1. Для отыскания параметров электрона в атоме водорода Бору пришлось выдвинуть постулат о существовании стационарных орбит, на которых электрон не излучает энергии.

Задачу о состоянии электрона в атоме водорода Шредингер решает чисто математически, не прибегая к различного рода постулатам.

2. Бор рассматривает электрон в атоме водорода как шарик, движущийся по круговой орбите.

Шредингер отказывается от наглядных представлений о поведении электрона в атоме водорода, используемых Бором, и определяет лишь вероятность обнаружения электрона на том или ином расстоянии от ядра. По Шредингеру существует отличная от нуля вероятность обнаружения электрона и вне радиуса стационарной боровской орбиты. Однако, максимальная вероятность обнаружения электрона в атоме водорода соответствует первой боровской орбите, а значение энергии электрона на первой боровской орбите соответствует собственному значению энергии электрона по Шредингеру.

3. Теория атома по Бору применима только к водороду и водородоподобным атомам (щелочные металлы), тогда как с помощью уравнения Шредингера можно описать состояние электронов не только в атоме водорода, но и
в других элементах периодической таблицы Менделеева.
4. Общий недостаток теории Бора и Шредингера – и одна и другая теория не затрагивает вопрос о времени пребывания электрона в том или ином состоянии. По существу стационарными являются только состояния, в которых
электрон имеет минимальное из разрешенных значений энергии.

При решении уравнения Шредингера для атома водорода в общем случае возникают три целочисленных параметра - n, m, *l*, которые были названы квантовыми числами.

n – главное квантовое число. Оно определяет энергию $E_n = -\frac{m \cdot e^4}{2\hbar^2}\frac{1}{n^2}$

электрона в атоме водорода:

l- азимутальное квантовое число. Оно определяет величину $L = \hbar\sqrt{l(l+1)}$

момента импульса электрона:
m- магнитное квантовое число. Оно определяет проекцию
момента импульса электрона на некоторое преимущественное $L_z = m \cdot \hbar$
направление (например, направление магнитного поля):
l- изменяется в пределах от 0 до n-1, *m*- изменяется в пределах от -*l* до + *l*

Число собственных функций $\Psi_{n,l,m}$, соответствующих данному значению n или одному и тому же значению энергии равно n^2.

Опыт Штерна-Герлаха

Штерн и Герлах провели систематическое изучение магнитных свойств атомов различных веществ. В их экспериментах исследуемое вещество наносилось на нить. При нагреве нити оно испарялось с поверхности нити и при помощи цилиндра со щелью формировался атомный пучок ленточного типа. Атомы, проходя через неоднородное магнитное поле, отклонялись от первоначального направления своего движения, и попадали на экран.

Оказалось, что атомы могут ориентироваться в магнитном поле только в строго определенных направлениях, причем число этих направлений различно для различных атомов.

$$L = \hbar\sqrt{l(l+1)} \qquad L_z = m \cdot \hbar$$

Пример $l = 3 \quad L = \hbar\sqrt{12}$

$$L_z = (-3,-2,-1,0,+1,+2,+3) \cdot \hbar$$