



Группа	М32101	К работе допущен	
Студент	Аль Даббагх Харит Мазумдер Шоувик	Работа выполнена	08.06.2021
Преподаватель	Шоев Владислав Иванович	Отчет принят	

Рабочий протокол и отчет по моделированию № 2 Квантово-механическая модель атома водорода

Уравнение Шредингера позволяет вычислить стационарные состояния, а также временную эволюцию квантовых систем. Точные аналитические ответы доступны для нерелятивистского атома водорода.

Учитывая, что атом водорода содержит ядро и электрон, квантовая механика позволяет предсказать вероятность нахождения электрона на любом заданном радиальном расстоянии r . Она определяется квадратом математической функции, известной как "волновая функция", которая является решением уравнения Шредингера. Равновесное состояние атома водорода с наименьшей энергией известно как основное состояние. Волновая функция основного состояния известна как волновая функция $1s$. Она записывается как:

$$\psi_{1s}(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi}a_0^{3/2}} e^{-r/a_0}$$

Здесь a_0 - численное значение боровского радиуса. Плотность вероятности нахождения электрона на расстоянии r в любом радиальном направлении равна квадрату волновой функции:

$$|\psi_{1s}(r)|^2 = \frac{1}{\pi a_0^3} e^{-2r/a_0}$$

Волновая функция $1s$ сферически симметрична, а площадь поверхности оболочки на расстоянии r равна $4\pi r^2$, поэтому полная вероятность $P(r) dr$ нахождения электрона в оболочке на расстоянии r и толщиной dr равна:

$$P(r)dr = 4\pi r^2 |\psi_{1s}(r)|^2 dr$$

Основное состояние $1s$ также обозначается квантовыми числами ($n = 1, l = 0, m = 0$). Вторые низшие энергетические состояния, расположенные чуть выше основного состояния, обозначаются квантовыми числами $(2, 0, 0)$, $(2, 1, 0)$ и $(2, 1, \pm 1)$. Эти состояния $n = 2$ имеют одинаковую энергию и известны как состояния $2s$ и $2p$. Существует одно состояние $2s$ и три состояния $2p$.

Чтобы продемонстрировать орбитали атома водорода, нам нужны нормализованные позиционные волновые функции, которые в сферических координатах задаются функцией:

$$\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = \sqrt{\left(\frac{2}{na_0^*}\right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n(n+l)!}} e^{-p/2} p^l L_{n-l-1}^{2l+1}(p) Y_l^m(\theta, \varphi)$$

Где

$$p = \frac{2r}{na_0^*}$$

$a_0^* = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{\mu e^2}$ является уменьшенным боровским радиусом

$L_{n-l-1}^{2l+1}(p)$ является обобщенным полиномом Лагерра степени $n - l - 1$

$Y_l^m(\theta, \varphi)$ сферическая гармоническая функция степени l и порядка m .

Квантовые числа могут принимать следующие значения:

$$n = 1, 2, 3, \dots$$

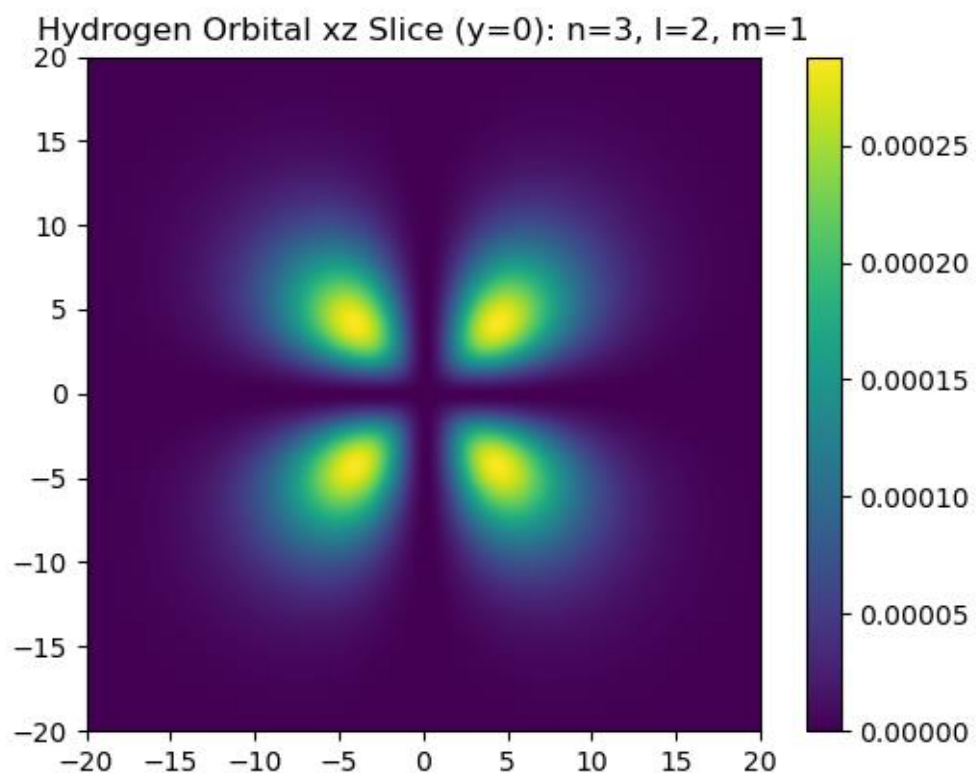
$$l = 0, 1, 2, \dots, n - 1$$

$$m = -l, \dots, l$$

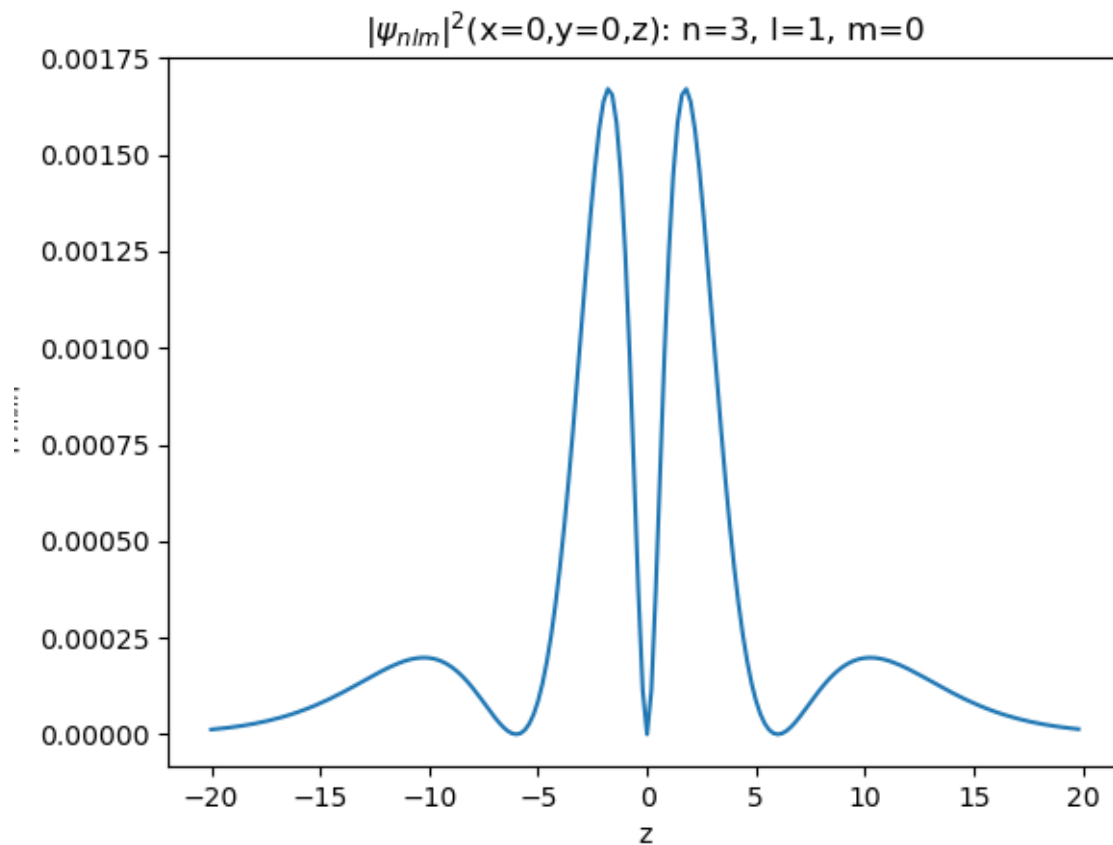
Результаты моделирования:

Все файлы моделирования можно найти здесь. Код разделен на 3 файла, HydrogenWF.py определяет функцию для вычисления волновой функции атома водорода.

PlotSlice.py Построит двухмерного среза $|\psi_{nlm}|^2$ на плоскости XZ. Например:



PlotOnZAxis.py строит графики пси вдоль оси Z. Например:



Выводы:

В процессе моделирования мы смогли смоделировать атом водорода с помощью его волновой функции. Результаты моделирования можно проверить по следующей таблице, в которой показаны орбитали.

[illegible]