

БЕЛОРУССКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
Факультет радиофизики и компьютерных технологий

Лабораторная работа №5
Распределение электронной плотности
атома водорода

Выполнил: Коновальчук Н.Н.

3 курс, 2+8 АРИСТ

Преподаватель: Зезюля П.А.

Минск 2020

Цель работы: рассчитать распределение радиальной электронной плотности вероятности в различных состояниях для атома водорода.

Краткая теория

Состояние некоторой частицы в квантовой (волновой) механике задаётся так называемой волновой функцией $\Psi(r, t)$. Её вид получается из решения уравнения Шрёдингера:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi + U\Psi = i\hbar\frac{d\Psi}{dt}.$$

Для нахождения волновой функции Ψ необходимо записать вид функции $U(r, t)$ для данной конкретной задачи и решить уравнение Шрёдингера относительно Ψ . Если силовое поле, в котором движется частица, стационарно, то уравнение Шрёдингера примет вид:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}e^{-\frac{i}{\hbar}Et}\Delta\Psi + U\Psi e^{-\frac{i}{\hbar}Et} = i\hbar\left(-\frac{i}{\hbar}E\right)\Psi e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$$

и решение Ψ можно представить в виде двух сомножителей:

$$\Psi(r, t) = \psi(r)e^{-\frac{i}{\hbar}Et}.$$

Потенциальная энергия водорода не зависит от времени и равно

$$U(r) = -\frac{e^2}{r}.$$

Волновые функции состояний атома водорода:

$$\Psi_{100} = \frac{1}{\sqrt{\pi r_1^3}} \cdot e^{-\frac{r}{r_1}}$$

$$\Psi_{200} = \frac{1}{2\sqrt{2\pi r_1^3}} \cdot \left(1 - \frac{r}{r_1}\right)^2 \cdot e^{-\frac{r}{2r_1}}.$$

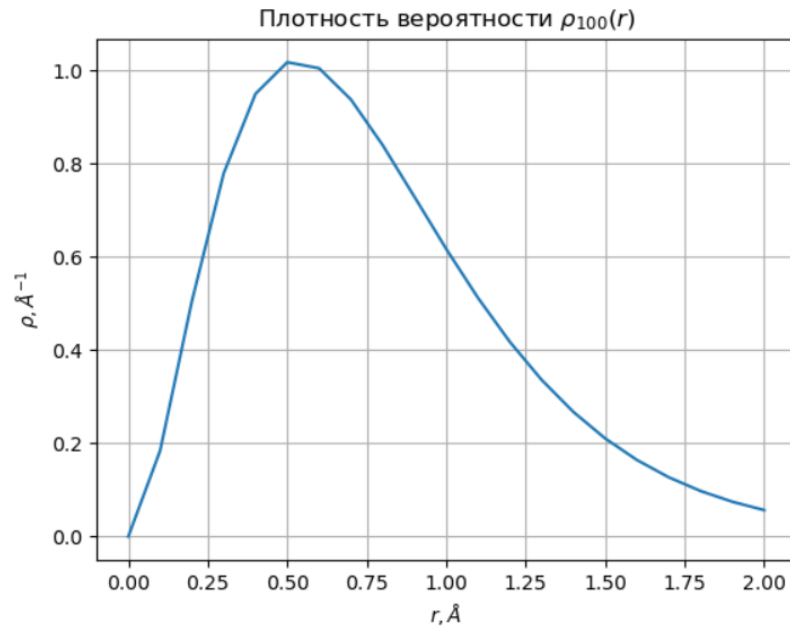
Радиальная плотность вероятности вычисляется следующим образом:

$$\rho_{100}(r) = \frac{dW}{dr} = \frac{4}{r_1^3} \cdot e^{-\frac{2r}{r_1}} \cdot r^2$$

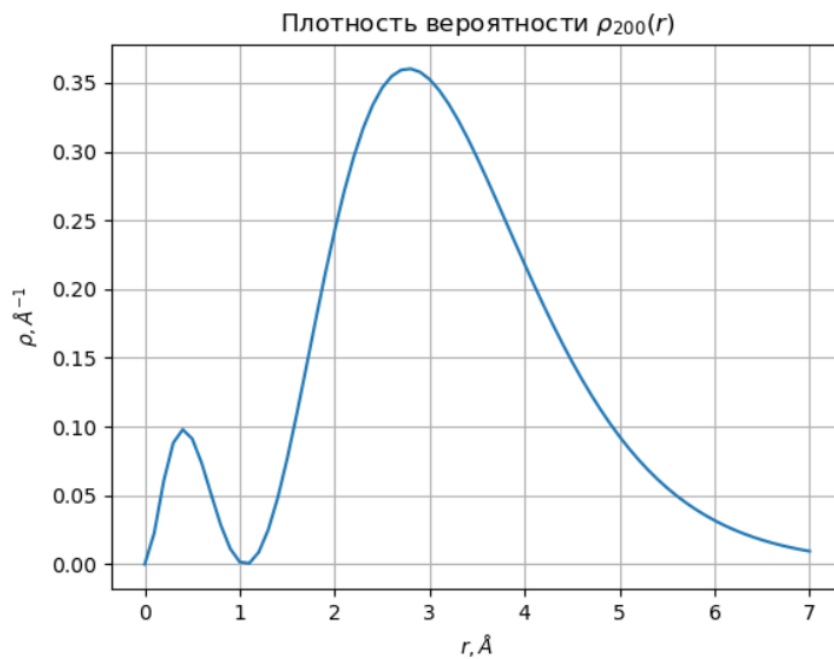
$$\rho_{200}(r) = \frac{1}{2r_1^3} \cdot \left(1 - \frac{r}{2r_1}\right)^2 e^{-\frac{r}{r_1}} \cdot r^2$$

Ход работы

- 1) Для состояния $n = 1, l = 0, m = 0$ распределение плотности вероятности ρ_{100} выглядит следующим образом



- 2) Для состояния $n = 2, l = 0, m = 0$ распределение плотности вероятности ρ_{200} выглядит следующим образом



Вывод: в ходе работы было рассчитано распределение радиальной электронной плотности вероятности в различных состояниях для атома водорода