

10. Получите в соответствии с правилами определения погрешностей косвенных измерений формулы для расчета погрешностей и рассчитайте, погрешности для  $\lambda$ ,  $E$ ,  $p$  и  $N$ . Проверьте, удовлетворяют ли погрешности в измерении импульса и координаты соотношению неопределенностей Гейзенберга.

### **Контрольные вопросы**

1. Что такое корпускулярно-волновой дуализм частиц света и вещества?
2. Каковы экспериментальные и теоретические предпосылки возникновения гипотезы де Бройля?
3. В чем содержание гипотезы де Бройля?
4. Что такое волновой пакет и в чем необходимость применения волновых пакетов для описания движения частиц?
5. С какой из скоростей волны – фазовой или групповой – следует отождествлять скорость частицы?
6. Исходя из гипотезы де Бройля, вывести выражения, связывающие импульс частицы с волновым вектором и энергию с частотой.
7. Применима ли рассматриваемая теория для релятивистских частиц? нерелятивистских частиц?
8. Будет ли различаться длина волны де Бройля для одного электрона и для большого числа электронов, движущихся в электронном пучке с той же скоростью?
9. Может ли одиночный электрон создать полную дифракционную картину?
10. Каковы особенности применения понятия "траектория" в микромире? Как они связаны с принципом неопределенности?

## **612. МОДЕЛИРОВАНИЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ЭЛЕКТРОННОГО ЗАРЯДА В АТОМЕ ВОДОРОДА**

### **612.1. Цель работы**

Изучение особенностей движения микрочастиц, наблюдение на практике вероятностного характера законов квантовой механики, практическое применение способа описания движения микрочастиц, основанного на понятии волновой функции. Проверка применимости боровской модели атома.

### 612.2. Разделы теории

Принцип неопределенности. Уравнение Шредингера. Физический смысл волновой функции. Квантование энергии и момента импульса. Атом водорода. Боровская теория атома водорода. Принцип Паули. Спин электрона. Распределение электронов по энергетическим уровням. [1. Гл. 3, §17, Гл. 4, §20 – §24, §28, §36]; [2. Гл. 28, §213 – §237]

### 612.3. Приборы и принадлежности

Персональный компьютер. Работа выполняется методом численного моделирования.

### 612.4. Теоретическое введение

Атом водорода является простейшим из всех атомов. Он состоит из одного протона и одного электрона. Согласно боровской теории атома, электрон может двигаться вблизи ядра (в данном случае – протона) по определенным орбитам, радиусы которых определяются выражением

$$r_n = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{m_e e^2} n^2, \quad (612.1)$$

где  $r_n$  – радиус орбиты с номером  $n$ ;  $m_e$  – масса электрона;  $e$  – его заряд;  $\hbar = \frac{h}{2\pi}$  – постоянная Планка;  $n$  – главное квантовое число, которое может принимать ряд целых значений.

Энергия электрона в атоме водорода согласно теории Бора определяется по формуле

$$E = -\frac{m_e e^4}{32\pi^2 \varepsilon_0^2 \hbar^2} \cdot \frac{1}{n^2}. \quad (612.2)$$

Боровская теория, однако, не может объяснить всех свойств атомов, так как она содержит в себе внутреннее противоречие между попыткой описать движение электрона на языке классической механики и экспериментально доказанным квантовым характером излучения атомов. Эта теория противоречит также экспериментам по дифракции электронов, которые убедительно подтверждают наличие у электронов волновых свойств.

Решить задачу о движении электрона в атоме водорода удастся с помощью уравнения Шредингера. Это уравнение, записанное для атома водорода, имеет вид

$$\nabla^2 \psi + \frac{2me}{\hbar^2} \left( E + \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r} \right) \psi = 0, \quad (612.3)$$

где  $\psi$  – волновая функция электрона;  $r$  – расстояние до ядра.

Электрическое поле протона, в котором движется электрон, в данном случае сферически симметрично, поэтому состояние электрона можно характеризовать набором из трех квантовых чисел  $n, l, m$ , где  $n$  – главное квантовое число,  $l$  – орбитальное квантовое число (иногда его называют азимутальным квантовым числом),  $m$  – магнитное квантовое число. Волновые функции электрона в атоме  $\psi(r, \theta, \varphi)$  в сферических координатах можно записать в виде произведения двух сомножителей, один из которых зависит только от расстояния до ядра  $r$ , а другой – только от углов  $\theta$  и  $\varphi$

$$\psi_{nlm} = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi). \quad (612.4)$$

Здесь  $R_{nl}$  зависит от квантовых чисел  $n$  и  $l$ , а  $Y_{lm}$  – от  $l$  и  $m$ . В сферической системе координат функции  $R_{nl}$  и  $Y_{lm}$  могут быть найдены независимо.

Вероятность того, что частица будет обнаружена в пределах объема  $dV$ , определяется ее волновой функцией

$$dP = |\psi|^2 dV = \psi^* \psi dV. \quad (612.5)$$

Так как радиальная составляющая волновой функции  $R_{nl}(r)$  действительна, а элемент объема в сферических координатах

$$dV = r^2 \sin \theta dr d\theta d\varphi = r^2 dr d\Omega, \quad (612.6)$$

где  $d\Omega$  – элемент телесного угла, и так как интегрирование по угловым переменным функций  $Y_{lm}^* Y_{lm}$  дает единицу, вероятность обнаружить электрон в тонком шаровом слое на расстоянии  $r$  от ядра равна

$$dP(r) = R_{nl}^2(r) r^2 dr. \quad (612.7)$$

Функция  $P(r)$ , которая, как это видно из формулы (612.7), имеет смысл плотности вероятности, и рассчитывается в данной работе. Для этого численно решается уравнение Шредингера и определяется волновая функция  $R_{nl}(r)$ , а затем вычисляются значения  $P_{nl}$ , в зависимости от  $r$ .

### 612.5. Описание установки и методика проведения расчетов измерения

Лабораторная работа выполняется методом численного моделирования на персональном компьютере. Но сначала надо получить допуск у преподавателя.

В начале работы на экране монитора вы увидите главное меню (рис. 612.4). В меню «О программе» приводятся справочные данные о программе и ее авторах. Меню «Выход» служит для выхода из программы. При выполнении работы вам необходимо пользоваться разделами меню «Данные» – для ввода исходных данных, и «График» – для просмотра графического и табулированного результатов расчетов. Передвижение по главному меню осуществляется при помощи клавиш «←», «↑», «→» и «↓». Вход в каждое меню

осуществляется при помощи клавиши «Enter».

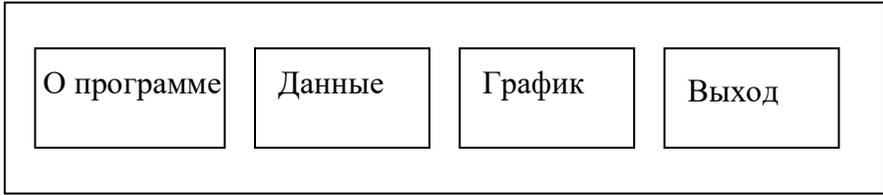


Рис. 612.4

Войдя в меню «Данные», на экране вы увидите сообщение: «Введите значение главного квантового числа». Необходимо ввести это значение с клавиатуры. После ввода главного квантового числа  $n$ , необходимо определить энергию исследуемого состояния. Прежде чем вводить значение этой энергии, ее следует выразить через  $E_0$  – **модуль** энергии основного состояния электрона в атоме водорода (см. (612.2)) ( $E = A \cdot E_0$ ). Значение  $A$  надо вводить в ответ на запрос компьютера: "Пусть  $E_0$  – энергия основного состояния электрона в атоме водорода. На какое число  $A$  надо умножить  $E_0$ , чтобы получить энергию исследуемого состояния?".

Помните, что для связанных состояний электрона в атоме полная энергия отрицательна. Далее, по запросу компьютера, нужно ввести значение орбитального квантового числа  $l$ .

**Внимание.** Проверка на правильность введенных значений не производится, и программа работает, если это возможно, с любыми введенными с клавиатуры значениями.

Получив значения главного квантового числа  $n$ , энергии исследуемого состояния и значение орбитального квантового числа  $l$ , программа предлагает вам выбрать формулу, по которой вычисляется потенциал электрического поля ядра атома водорода. Правильной является только одна из пяти предлагаемых формул, но вычисления могут быть выполнены с использованием каждой из них. В формулах под  $e$  подразумевается **модуль** элементарного заряда. Помните, что

заряд электрона отрицателен, потенциальная энергия в случае действия сил притяжения также меньше нуля.

После этого компьютер численно решает уравнение Шредингера и определяет радиальную часть  $R_{nl}(r)$  волновой функции (612.4) и распределение плотности вероятности  $P(r)$  нахождения электрона в тонком сферическом слое толщиной  $dr$ , на расстоянии  $r$  от ядра (612.7). По окончании решения задачи, на экране появляется главное меню. Переходя в меню «График» и войдя в него, на экране появляется график полученной зависимости  $P(r)$ . Правильность полученных результатов определяются либо самостоятельно, либо преподавателем. Это можно сделать, основываясь лишь на свойствах  $P(r)$ . Для просмотра таблицы результатов необходимо нажать клавишу «Enter», а затем на вопрос «Выводить таблицу?» (Y/N) ответить «Y». Вычисления  $P(r)$  проводятся с достаточно мелким шагом по  $r$ , а на экран выводятся только 40 значений  $P(r)$ . Сначала выводятся первые 20 точек. Для просмотра оставшихся 20 точек необходимо еще раз нажать клавишу «Enter». Значения  $r$  в таблицах приводятся в боровских радиусах. Для выхода в главное меню нажмите клавишу «Enter».

### 612.6. Порядок выполнения работы

1. Исследовать распределение плотности вероятности нахождения электрона в тонком сферическом слое толщиной  $dr$ , на расстоянии  $r$  от ядра для трех состояний в соответствии с номером своей бригады, приведенным в таблице.

Таблица

Номер бригады	Исследуемые состояния		
	1, 7	1s	3s
2, 8	2s	2p	3d
3, 9	1s	2s	3d
4, 10	2s	3p	1s

5, 11	3s	2p	3p
6, 12	1s	2p	2s

2. Записать значения  $r$  и  $P(r)$ , полученные при моделировании. Можно записать не все значения, выводимые на экран, а столько, сколько необходимо для достаточно точного построения графика. При этом также можно ограничиться записью значений  $P(r)$  и  $r$  с точностью до двух значащих цифр.

3. Построить по полученным значениям графики  $P(r)$  для трех исследуемых состояний. По оси  $r$  отложить радиусы боровских орбит, соответствующих исследуемым состояниям.

### Контрольные вопросы

1. Основные положения боровской теории атома водорода. Правило квантования круговых орбит и собственные значения энергии электрона в атоме.

2. В чем заключается принцип неопределенности Гейзенберга, и каков его физический смысл?

3. Что такое волновая функция, и каков ее физический смысл?

4. Что такое гамильтониан (оператор Гамильтона), и в чем состоит его физический смысл?

5. Как записывается уравнение Шредингера в случае движения электрона в атоме водорода и в общем случае?

6. В каких случаях энергетический спектр микрочастиц является дискретным, а в каких непрерывным? Каков энергетический спектр атома водорода?

7. Что такое квантование энергии? Квантование момента импульса?

8. Какие квантовые числа характеризуют энергию электрона в атоме, его момент импульса? Какие значения эти числа могут принимать?

9. Что такое вырожденное и невырожденное состояния? Что такое кратность вырождения?

10. Что такое спин электрона?

11. Какие состояния электронов обозначаются буквами  $s$ ,  $p$ ,  $d$ ,  $l$  и т.д.?
12. В чем заключается принцип Паули? Сколько электронов могут находиться в атоме в  $s$ -,  $p$ -,  $d$ -состояниях (с учетом спина)?
13. Какие значения может принимать энергия электрона в атоме водорода?
14. Что такое основное состояние атома?
15. Как движется электрон в атоме?
16. Какие значения может принимать главное квантовое число?
17. Какие значения может принимать орбитальное квантовое число электрона в атоме?
18. Сколько электронов может одновременно находиться в  $2p$ -состоянии? в  $3d$ -состоянии?  $3s$ -состоянии?
19. Чему равно главное и орбитальное квантовые числа  $3d$ -электронов?  $2p$ -электронов?  $4s$ -электронов?
20. Какие значения может принимать магнитное квантовое число электрона в атоме, если его орбитальное квантовое число равно  $l$ ?

## БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Савельев И.В. Курс общей физики. В 3-х тт. Т.3.– СПб.: Изд – во "Лань", 2007. – 320 с.
2. Трофимова Т.И. Курс физики. – М.: Высшая школа, 1990. – 487 с.
3. Шпольский Э.В. Атомная физика. Т.2. – М. – Л. Изд – во ГИТТЛ, 1951.
4. Волощенко В.Ю., Сапогин В.Г. Оценка погрешностей при физических измерениях. – Таганрог.: Изд – во ТРТУ, 2004. –

## Содержание

Введение.....	3
601. Определение постоянной Планка из законов теплового излучения.....	6
602. Дистанционное измерение температуры нагретых светящихся тел яркостным пирометром.....	14
603. Изучение внешнего фотоэлектрического эффекта.....	27
604. Изучение спектров испускания водорода с помощью монохроматора.....	39
606. Исследование зависимости сопротивления металлов и полупроводников от температуры.....	54
610. Исследование вторичного космического излучения.....	66
611. Моделирование процесса дифракции электронов.....	76
612. Моделирование распределения электронного заряда в атоме водорода.....	86
Библиографический список.....	93

Арзуманян Грайер Вагаршакович  
Гатько Людмила Евстафьевна  
Доценко Игорь Борисович  
Колпачев Алексей Борисович  
Красюк Игорь Иванович  
Набоков Геннадий Михайлович  
Нестюрина Елена Евгеньевна  
Сапогин Владимир Георгиевич  
Филипенко Наталья Андреевна  
Филиппева Наталья Николаевна

## ПРАКТИКУМ

по дисциплине ФИЗИКА  
раздел КВАНТОВАЯ ФИЗИКА

(по направлениям подготовки: естественные науки и математика;  
информационная безопасность; техника и технологии)

Ответственный за выпуск Нестюрина Е.Е.  
Редактор Проценко И.А.  
Корректор Селезнева Н.И.

ЛР №020565 от 23.06.1997 г. Подписано к печати 20.12.2007 г.

Формат 60x84<sup>1</sup>/<sub>16</sub>

Бумага офсетная

Офсетная печать. Усл. п.л. – 6,0.

Уч. – изд.л. – 5,7.

Заказ №

Тираж 750 экз.

"С"

---

Издательство Технологического института  
Южного федерального университета  
ГСП 17А, Таганрог, 28, Некрасовский, 44  
Типография Технологического института  
Южного федерального университета  
радиотехнического университета  
ГСП 17А, Таганрог, 28, Энгельса, 1

