

ҚАТТЫ ДЕНЕЛЕР ҮШІН ШРЕДИНГЕР ТЕҢДЕУІ.

Орындаған : Тұтқыш М

Тобы : 110-14

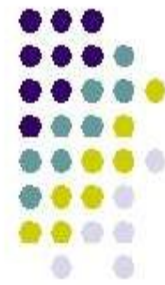
Қабылдаған: Налтаев А



Шредингер Эрвин (1887 – 1961) – австрийский физик-теоретик, один из создателей квантовой механики. Основные работы в области статистической физики, квантовой теории, квантовой механики, общей теории относительности, биофизики.

Разработал теорию движения микрочастиц – волновую механику, построил квантовую теорию возмущений – приближенный метод в квантовой механике. За создание волновой механики удостоен Нобелевской премии.

Общее уравнение Шредингера



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

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \quad \begin{array}{l} \text{оператор} \\ \text{Лапласа;} \end{array}$$

$$U(x, y, z, t) \quad \begin{array}{l} \text{потенциальная} \\ \text{функция частицы.} \end{array}$$

$$\Psi(x, y, z, t) \quad \begin{array}{l} \text{волновая} \\ \text{функция частицы.} \end{array}$$



ШРЁДИНГЕР, ЭРВИН австрийский физик. Нобелевская премия по физике 1933 (с **П.Дираком**).

Барлық бөлшектердің стационар күйі Шредингер теңдеуімен сипатталады:

$$\hat{H}\psi = E\psi$$

Бөлшек жүйесінің гамильтонианы:

$$\hat{H} = \hat{K} + U$$

Қарастырып отырған қатты дене үшін кинетикалық энергия операторы:

$$\hat{K} = -\left(\sum_i \frac{\hbar^2}{2m} \Delta_i + \sum_k \frac{\hbar^2}{2M_k} \Delta_k\right)$$

Мұндағы $\Delta_i = \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_i^2}$ бөлшек үшін Лаплас операторы.

Қатты денені құрайтын бөлшек жиынтығының потенциалды энергиясы мынадай екі бөлшектердің өзара әсер энергиясынан шығады: электрондардың электрондармен, ядролардың ядролармен және электрондардың ядролармен :

$$U = \frac{1}{2} \sum_i \sum_{j \neq i} \frac{e^2}{4\pi\epsilon\epsilon_0 |r_i - r_j|} + \frac{1}{2} \sum_k \sum_{L \neq k} \frac{Z_k Z_L e^2}{4\pi\epsilon\epsilon_0 |R_k - R_L|} -$$

$$- \frac{1}{2} \sum_i \sum_k \frac{Z_k e^2}{4\pi\epsilon\epsilon_0 |r_i - R_k|}$$

Осылайша, Шредингер теңдеуін мына түрде жазамыз:

$$\left[-\left(\sum_i \frac{\hbar^2}{2m} \Delta_i + \sum_k \frac{\hbar^2}{2M_k} \Delta_k \right) + \frac{1}{2} \sum_i \sum_{j \neq i} \frac{e^2}{4\pi\epsilon\epsilon_0 |r_i - r_j|} + \right. \\ \left. + \frac{1}{2} \sum_k \sum_{L \neq k} \frac{Z_k Z_L e^2}{4\pi\epsilon\epsilon_0 |R_k - R_L|} - \frac{1}{2} \sum_i \sum_k \frac{Z_k e^2}{4\pi\epsilon\epsilon_0 |r_i - R_k|} \right] \Psi = E \Psi \quad (7.7)$$

(7.7) теңдікке кіретін толқындық функция барлық бөлшектің координаттарына байланысты, яғни

$$\Psi = \Psi(r_1, r_2, r_3, \dots, r_n, R_1, R_2, \dots, R_N) \quad (7.8)$$

Ядролардың өзара әсерлесуінің потенциалды энергиясы кейбір тұрақтыға тең болады, яғни

$$\frac{1}{2} \sum_k \sum_{L \neq k} \frac{Z_k Z_L e^2}{4\pi\epsilon\epsilon_0 |R_k - R_L|} = const. \quad (7.9)$$

Энергияның бастапқы есептеуін таңдай отырып оны нөлге тең деп алуға болады. Осыны ескергенде Шредингер теңдеуі мына түрде жазылады:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \sum_i \Delta_i + \frac{1}{2} \sum_i \sum_{j \neq i} \frac{e^2}{4\pi\epsilon\epsilon_0 |r_i - r_j|} - \frac{1}{2} \sum_i \sum_k \frac{Z_k e^2}{4\pi\epsilon\epsilon_0 |r_i - R_{0k}|} \right] \Psi_e = E_e \Psi_e \quad (7.10)$$

Уравнение Шредингера

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} + \frac{8\pi^2 m}{\hbar^2} (E - E_n) \psi = 0$$

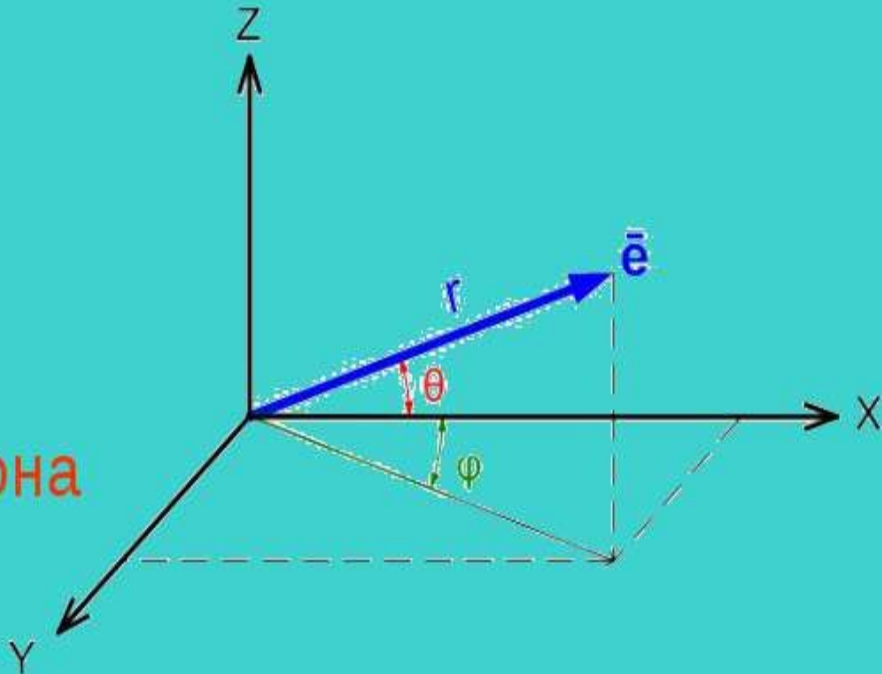
где:

x, y, z – расстояние,

$\hbar$ – постоянная Планка ($6,626 \times 10^{-34}$ Джс);

m – масса частицы, E и E_n полная и потенциальная энергия частицы

Квадрат модуля
функции ψ
определяет
вероятность
нахождения электрона
в пространстве
в атоме.



ШРЕДИНГЕР ТЕНДЕУІ.

Н. Бордың постулаттары қазіргі заманғы атом моделінің негізгі болып табылады. Шредингер тендеулері және кванттық механика қазіргі кезге дейін қолданылатын атомның моделін құруға мүмкіндік жасады. Микробөлшектердің қасиеттеріндегі корпускалық-толқындық дуализм ($\lambda = \frac{h}{p}$ де-Бройль толқындары) және Гейзенбергінің анықталмағандық принципі ($\Delta x * \Delta p \geq h$) микроәлем нысаналарының қасиеттерін бейнелеуде ықтималдық тәсіл қажеткендігін, сонымен бірге микробөлшектің корпускалық және толқындық қасиеттері жайлы ақпаратты тасымалдаушы екенін және М. Борн бойынша ықтималдылық амплитудасы болып табылатын жаңа толқындық $\psi(x, y, z)$ функциясын енгізу керектігін айқындады.

Бұл пси-функция үшін Шредингер өзінің әйгілі тендеуін алды.

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

немесе

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

ПСИ-ФУНКЦИЯНЫҢ МАҒЫНАСЫ ҚАНДАЙ?

Борн бойынша пси-функцияның модулының квадраты dP ықтималдылықты анықтайды

$$dP = |\psi|^2 dV = \psi^* \psi dV,$$

Ал,

$\int \psi^* \psi dV = 1$ қалыптасу шарты деп аталады.

Шредингер теңдеуі $v < c$ жылдамдықпен қозғалатын және энергияның фиксацияланған мәндеріндегі күйлерінде болатын микробөлшектердің толқындық қасиеттерін бейнелей алады. Шредингер теңдеуі релятивистік емес кванттық механиканың негізгі теңдеуі болып табылады.



1926 год

Австрия

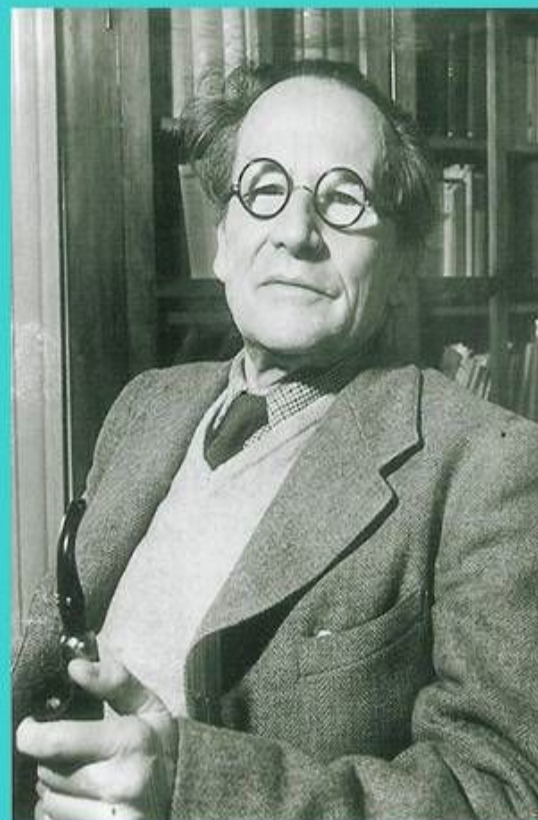
Эрвин Шредингер
(1887-1961)



Лауреат
нобелевской премии
по физике
(1933)

Уравнение Шредингера

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} + \frac{8\pi^2 m}{\hbar^2} (E - E_n) \psi = 0$$



ЕРКІН БӨЛШЕКТІҢ ҚОЗҒАЛЫСЫ ҮШІН ШРЕДИНГЕР ТЕҢДЕУІ.

• Еркін қозғалыстағы бөлшектің бағыты x осіне бағыттас болсын. Сөйтіп осы стационар күйдегі бөлшегі үшін Шредингердің теңдеуі:

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar} E\Psi = 0$$

Осы теңдеудің шешімі мынадай болады;

$$\Psi B e^{-i/\hbar(\sqrt{2mE} x} + C e^{-i/\hbar(\sqrt{2mE} x}$$

Олай болса, Шредингердің жалпы түрдегі теңдеуінің шешуі мына түрде :

$$\begin{aligned} & \Psi(x, y, z, t) \\ &= B e^{-i[(\varepsilon/\hbar)t - (\sqrt{2mE}/\hbar) x]} + C e^{-i[(\varepsilon/\hbar)t - (\sqrt{2mE}/\hbar) x]} \end{aligned}$$

R_{0k} координаттары (7.10) теңдеуге айнымалы түрінде емес, параметр түрінде енеді. Оларды таңдау қатты дененің энергиясына E_e және толқындық функциясына ψ_e әсер етеді:

$$\Psi_e = \Psi_e(r_1, r_2, \dots, r_n, R_{01}, R_{02}, \dots, R_{0N}). \quad (7.11)$$

Шредингер теңдеуін (7.10) айтарлықтай қысқартқанмен, оны шешу мүмкін емес. Сондықтан қосымша жуықтауларды қолданады. Олардың бірі валентті аппроксимация деп аталады. Атомның ішкі қабығындағы барлық электрондар ядромен бірге тыныштық күйдегі атомдық қалдықты құрайды деп есептеледі, яғни ионды, және (7.10) жылжымайтын иондардың қорытынды өрісінде қозғалатын валентті электрондар үшін жазылады. Бірақ бұл жағдайда да көп бөлшектердің есебінің шешімін табу керек болады, ал оны шешу мүмкін емес.

□ БІРЭЛЕКТРОНДЫ ЖУЫҚТАУ.

Көп электронды есеп бір электронды есепке келуі мүмкін. Негізінен бұл үшін Харти – Фок – тың әдісін қолданады. Оның негізгі идеясы (7.10)

теңдеуіндегі $\frac{1}{2} \sum_i \sum_{j \neq i} \frac{e^2}{4\pi\epsilon\epsilon_0 |r_i - r_j|}$ электрондардың өзара әсерлесуінің

потенциалды энергиясын $\sum_i \tilde{U}_i(r_i)$ түрдегі потенциалды энергиямен алмастыру

болып табылады. Бұл энергия барлық электрондары тәуелсіз қозғалатын эффективті өрісі бар i –ші электронның өзара әсер энергиясын көрсетеді. Бұл эффективті өріс барлық қалған электрондардың i –ші электронға әсерін сипаттайды.

Осындай өріс табылды деп есептеп, (7.10) теңдігін мына түрде жазамыз:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \sum_i \Delta_i + \sum_i \tilde{U}_i(r_i) + \sum_i \tilde{U}_i(r_i) \right] \Psi_e = E_e \Psi_e \quad (7.12)$$

немесе

$$\left\{ \sum_i \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_i + \tilde{U}_i(r_i) + U_i(r_i) \right] \right\} \Psi_e = E_e \Psi_e \quad (7.13)$$

Мұндағы, $U_i(r_i)$ i –ші электронның потенциалды энергиясы (барлық ядролардың өрісіндегі $-\frac{1}{2} \sum_k \frac{Z_k e^2}{4\pi\epsilon\epsilon_0 |r_i - R_{ok}|}$). (7.13) – тегі қосынды астында i –

ші электронның гамильтонианы түр $\hat{H}_i = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_i + \tilde{U}_i(r_i)$ (7.14). Осылайша,

Шредингер тендеуі былай жазылады:

$$\hat{H}\Psi_e = \left(\sum_i \hat{H}_i \right) \Psi_e = E_e \Psi_e \quad (7.15)$$

Енді гамильтониан электрондардың өзара әсер энергиясына ие болмағандықтан және жеке электрондардың гамильтониан қосындысын сипаттайтындықтан, (7.15) теңдігінің шешімі бір электронды функциялардың туындысы болады:

$$\Psi_e(r_1, r_2, \dots) = \Psi_1(r_1) \Psi_2(r_2) \dots = \prod \Psi_i(r_i) \quad (7.16)$$

Әр $\psi_i(r_i)$ функциясы бір электронды Шредингер теңдігін қанағаттандырады

$$\hat{H}_i \Psi_i = E_i \Psi_i \quad (7.17)$$

бұл жердегі i –ші электронның басқалармен өзара әсері потенциалмен $\tilde{U}_i(r_i)$ сипатталады.

Осылайша эффективті өрісті енгізу көп электронды тендеуді бір электронды тендеуге келтіруге мүмкіндік береді. Және де жүйенің энергиясы мынадай болады:

$$E_e = \sum_i E_i \quad (7.18)$$

Антисимметриялық толқындық функцияны Слэтер анықтауышы түрінде жазады:

$$\Psi_e(q_1, q_2, \dots, q_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \Psi_1(q_1) & \Psi_1(q_2) & \dots & \Psi_1(q_N) \\ \Psi_2(q_1) & \Psi_2(q_2) & \dots & \Psi_2(q_N) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \Psi_N(q_1) & \Psi_N(q_2) & \dots & \Psi_N(q_N) \end{vmatrix} \quad (7.19)$$

(7.19) функциясының антисимметриялық қасиеттері анықтауыш қасиеттерінен шығады.

Енді эффективті өрісті $\tilde{U}_i(r_i)$ таңдау сұрағына қайта ораламыз. Бұл өрісті барлық қалған электрондардың әр электронына келетін орташа әсерді сипаттайтындай етіп таңдау керек. $\tilde{U}_i(r_i)$ анықтау үшін толқындық функцияларды $\psi_i(r_i)$ білу керек. Ал оны тек $\tilde{U}_i(r_i)$ білген кезде ғана табуға болады. Осылайша есептеу өзара келіскен болуы керек. Сондықтан эффективті өрісті көп жағдайда өзара келіскен деп атайды

Кристалдағы электронның потенциалды энергиясын $V(r)$ деп белгілейміз:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(r) \right] \Psi(r) = E \Psi(r) \quad (7.21)$$

Кристалдағы атомдар кеңістікте қатаң периодты түрде орналасқандықтан, кристалдың толық потенциалы $V(r)$ үш өлшемді периодтылыққа ие болу керек. Периодты потенциалдың $V(r)$ нақты түрі белгісіз, алайда кейбір диэлектриктер мен металдар үшін $V(r)$ мәні сенімді шығады. Қуанышқа орай, теорияның фундаментальді нәтижелерін алу үшін $V(r)$ потенциалының нақты түрін алмауға да болады екен. Тек $V(r)$ потенциалды функция болып табылатынын білсе болды екен. Оның периоды кристалды тордың периодымен сәйкес келеді.

НАЗАРЛАРЫҢЫЗҒА РАХМЕТ!!!