Расчет состояний атома гелия

Станислав Иевлев

19 декабря 2002 г.

1 Теоретические основы

Математический аппарат квантовой механики Свойства квантовых объектов описываются с помощью волновой функции. Волновая функция является комплексной, однозначной и непрерывной функцией радиус-вектора частицы r и времени t.

$$\Psi = \Psi(\overrightarrow{r}, t) \tag{1}$$
$$\overrightarrow{r} = \overrightarrow{r}(x, y, z) \tag{2}$$

Подставив в выражение (1) вектор-функцию (2), волновую функцию можно записать в виде $\Psi = \Psi(x, y, z, t)$. Квадрат модуля волновой функции взятый в точке (x, y, z) в момент времени t, умноженный на элементарный объем $\triangle x \triangle y \triangle z$, включающий эту точку дает вероятность того, что в момент времени t мы обнаружим частицу в этом объеме. Если дополнительно выполнено условие нормировки $\int\limits_V |\Psi(x, y, z, t)|^2 \, dx \, dy \, dz = 1$, то квадрат модуля может быть назван плотностью вероятности. Вся работа производится в линейном пространстве функций. Скалярное произведение определено следующим образом:

$$\langle f, g \rangle = \int f(r)^* g(r) \, dr \tag{3}$$

где x^* операция комплексного сопряжения Каждой физической величине соответствует некоторый линейный оператор. Среднее значение физической величины, заданной оператором L вычисляется по формуле

$$\langle f \rangle = \int \psi^*(r) L \psi(r) \, dr \tag{4}$$

, где ψ - нормированная волновая функция А состояние частицы описывается уравнениями, содержащими операторы. Решение такого уравнения - волновая функция. Вот несколько основных операторов физических величин:

Физ. величина	Формула	Оператор
Координата	$\begin{cases} r \\ x, y, z \end{cases}$	$\begin{cases} r \\ x, y, z \end{cases}$
Импульс	$\begin{cases} \mathbf{p} \\ p_x, p_y, p_z \end{cases}$	$\begin{cases} -i\hbar\nabla \\ -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}, -i\hbar\frac{\partial}{\partial y}, -i\hbar\frac{\partial}{\partial z} \end{cases}$
Угловой момент	$\begin{cases} L = [r \times p] \\ L_x = yp_z - zp_y \\ L_y = zp_x - xp_z \\ L_z = xp_y - yp_x \end{cases}$	$\begin{cases} \hat{L} = -i\hbar[r \times \nabla] \\ \hat{L}_x = -i\hbar(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}) \\ \hat{L}_y = -i\hbar(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}) \\ \hat{L}_z = -i\hbar(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial z}) \end{cases}$
Полная энергия	$E = \frac{p^2}{2m} + U(r)$	$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\triangle + U(r)$

В таблице $\triangle = \nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial x^2}$ - оператор Лапласа (лапласиан). Оператор энергии $\hat{H}$ называется также гамильтониан.