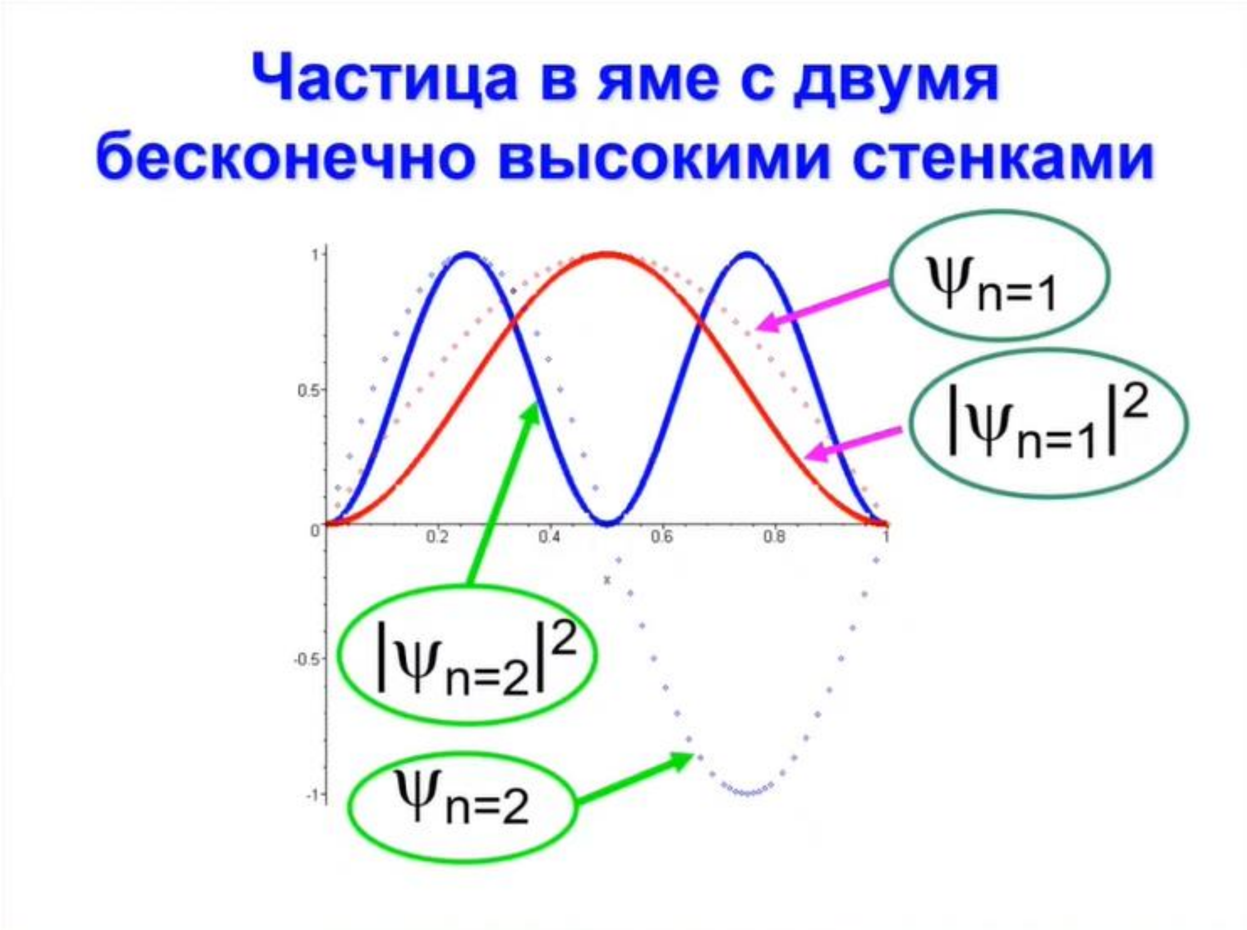


Частица в яме с двумя бесконечно высокими стенками

Частица в яме с двумя бесконечно высокими стенками

# комментарии

*Как следует из квантовой теории минимальное значение энергии частицы $E_1 = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$ не равно нулю . То есть частица не может находиться в состоянии покоя.* m=1 г, a=10 м

$$v = \sqrt{\frac{2E_1}{m}} = \frac{\pi\hbar}{m\,a} = \frac{\pi \cdot 1,05 \cdot 10^{-27}\ \text{эрг} \cdot \text{с}}{1\ \text{г} \cdot 10^{3}\ \text{см}} \approx 10^{-30}\frac{\text{см}}{\text{с}}.$$

$$\tau = \frac{l}{v} \approx \frac{10^{-2}\ \text{см}}{10^{-30}\ \text{см/с}} = 10^{28}\text{с} \approx 10^{21}\ \text{лет}.$$

*Наличие дискретного спектра у частицы, с точки зрения классической теории, означает, что мы не можем сообщить частице произвольную скорость.* $\Delta E \approx \hbar^2$ Но для модели H

$$\triangle \approx \frac{\hbar^2}{ma^2} = \frac{(1,05 \cdot 10^{-27}\text{эрг} \cdot \text{с})^2}{9,1 \cdot 10^{-28}\ \text{г} \cdot (10^{-8}\ \text{см})^2} \approx 10^{-11}\ \text{эрг} = 6,24\ \text{эВ}$$

комментарии
Как следует из квантовой теории минимальное значение энергии
частицы не равно нулю. То есть частица не
может находиться в состоянии покоя.
Наличие дискретного спектра у частицы, с точки зрения классической
теории, означает, что мы не можем сообщить частице
произвольную скорость
Но для модели H

*Из решения уравнения Шрёдингера найдено, что энергия частицы и есть физическая величина, определяющая её состояние.*

То есть волновая функция в дираковских обозначениях есть скалярное произведение вида $\Psi(x,t) = \langle x \,|\, E_n \rangle$. В этом смысле решение уравнения Шрёдингера и есть правило вычисления проекции вектора состояния на вектор с определённым значением координаты.

- *Из решения уравнения вытекает, что координата не имеет определённого значения.*

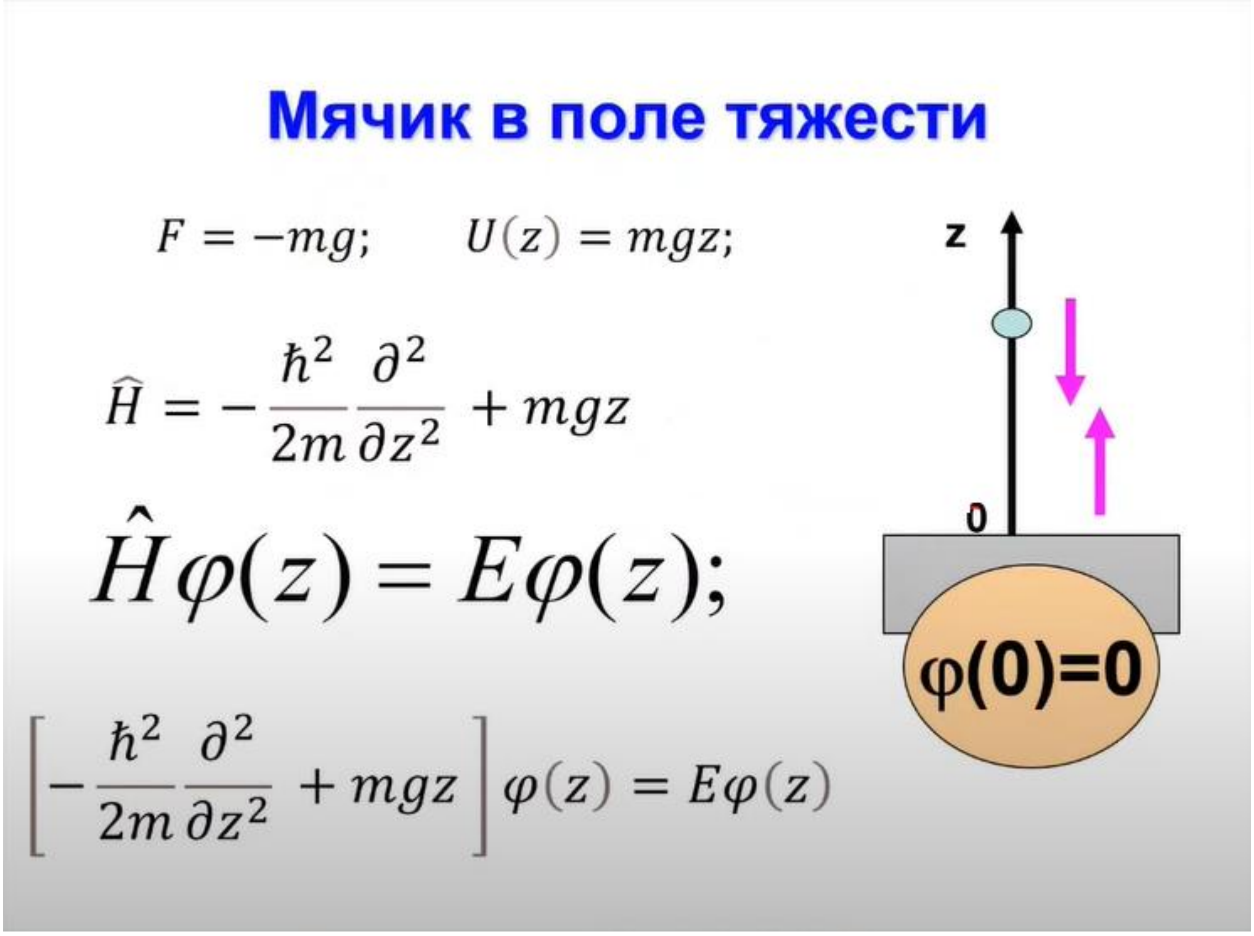
  Частица не локализована в какой-то точке. Имеется ненулевая вероятность найти частицу в произвольной точке внутри отрезка $0 - a$. Вероятность обнаружить частицу в интервале $x \div x + dx$ не зависит от времени и определяется выражением

$$|\Psi_{E_n}(x,t)|^2 \, dx = |\Phi_{E_n}(x)|^2 \, dx = \boxed{\frac{2}{a}\sin^2\left(\frac{n\pi}{a}x\right)} \, dx. \qquad (1.178)$$

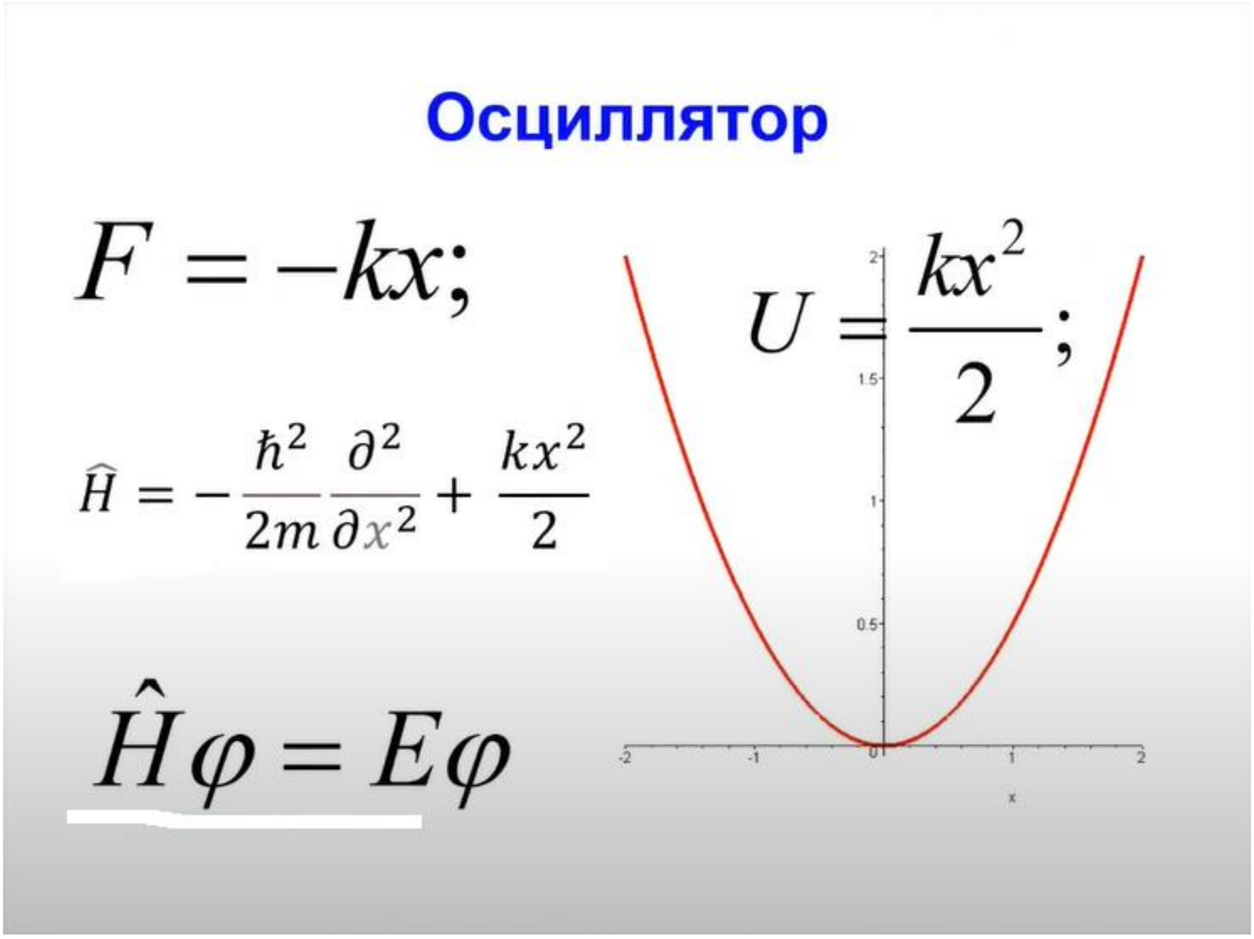
Из решения уравнения Шрёдингера найдено, что энергия частицы
и есть физическая величина, определяющая её состояние.
То есть волновая функция в дираковских обозначениях есть
скалярное произведение вида. В этом смысле
решение уравнения Шрёдингера и есть правило вычисления
проекции вектора состояния на вектор с определённым значением
координаты.
Из решения уравнения вытекает, что координата не имеет
определённого значения.
Частица не локализована в какой-то точке. Имеется ненулевая
вероятность найти частицу в произвольной точке внутри
отрезка. Вероятность обнаружить частицу в интервале
не зависит от времени и определяется выражением.


Среднее значение

Среднее значение координаты рассматриваемой частицы
в любом состоянии не зависит от времени и равно,
так как по определению среднего значения име-




Мячик в поле тяжести

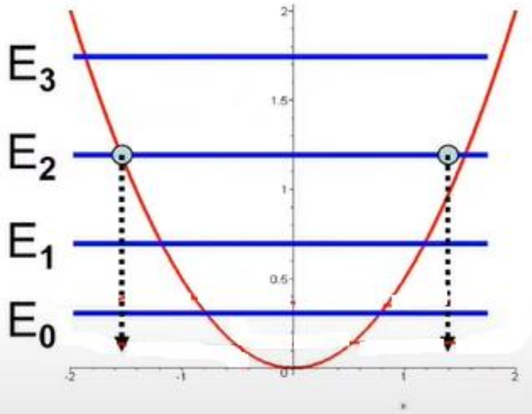



Осциллятор

# Осциллятор

$$E = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)$$, n=0,1,2,…

$$\varphi_n(\xi) = N_n exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right) H_n(\xi)$$



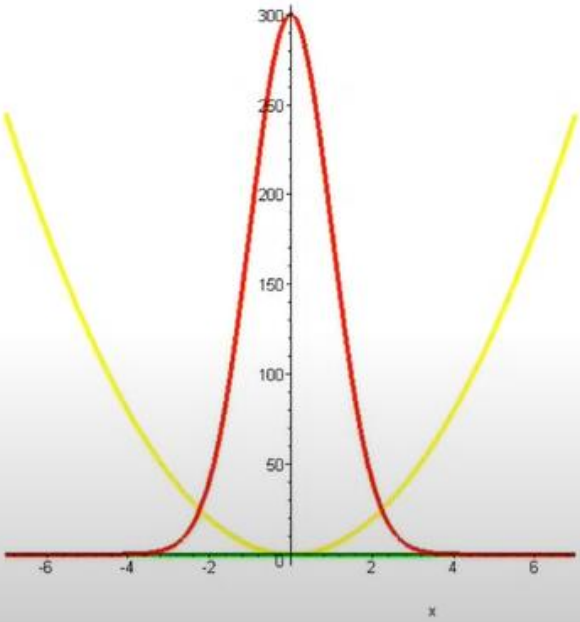

$$\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}\ ; \qquad \xi = x\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} = \frac{x}{a}$$

$$N_n = \frac{1}{\sqrt{n!\ 2^n a\sqrt{\pi}}}$$

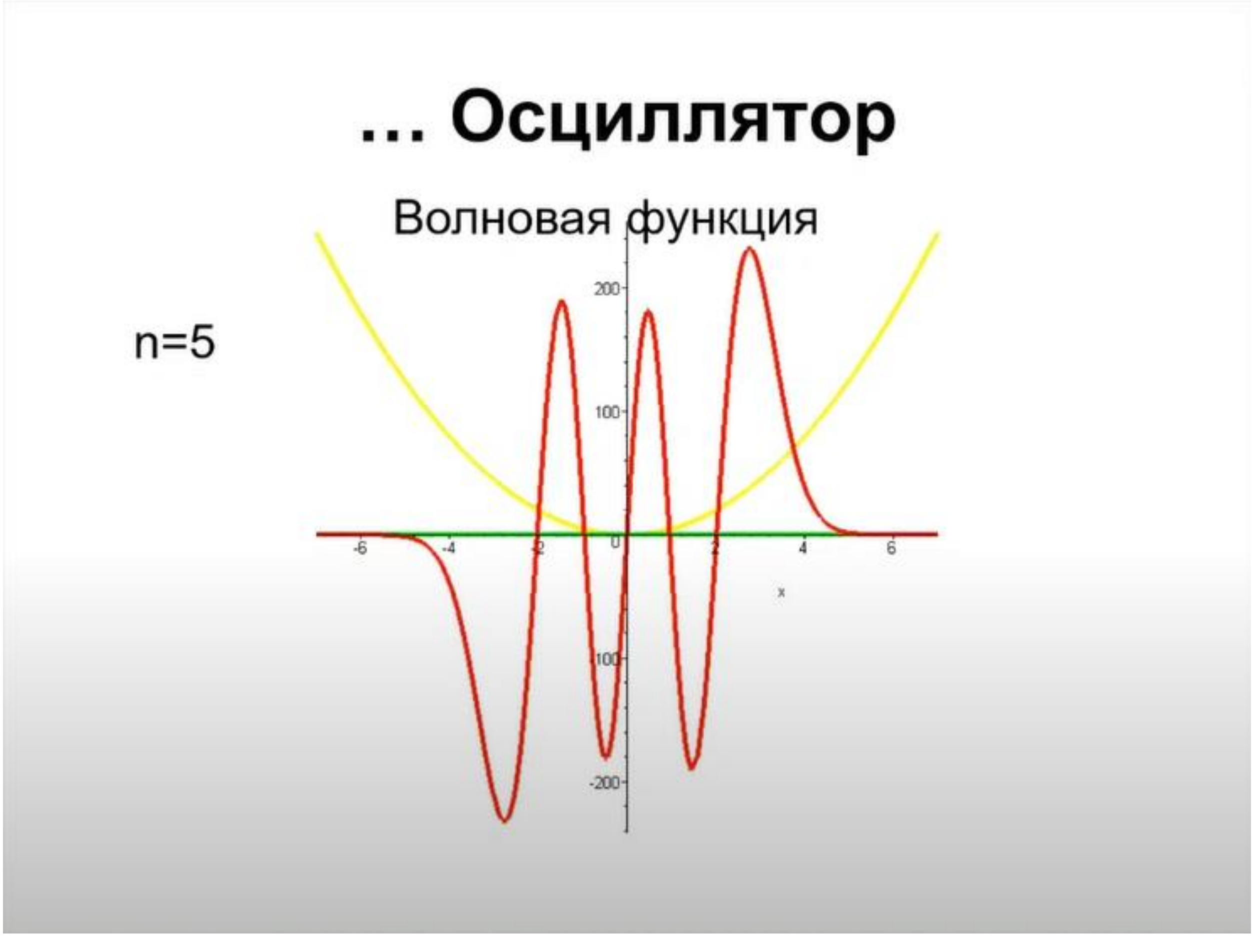
Осциллятор

# Осциллятор

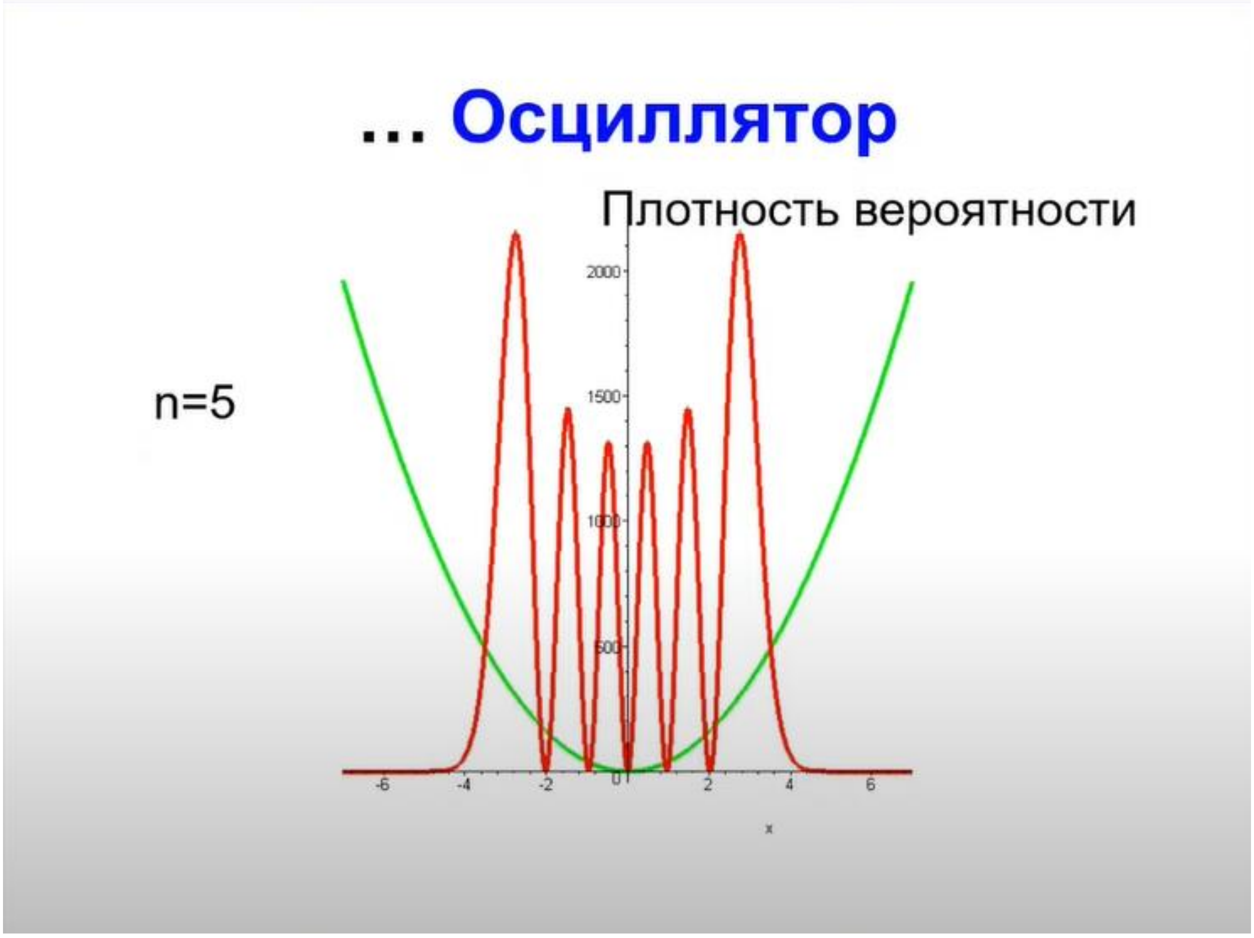
n=0



Осциллятор
n=0




... Осциллятор
Волновая функция
n=5



… Осциллятор
Плотность вероятности
n=5

## Трехмерное уравнение Шредингера. Свободное движение

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \widehat{\mathrm{H}}\Psi; \quad \Psi\,(x, y, z, t) = \Psi(\vec{r}, t); \quad \mathrm{U=0}$$

$$i\hbar\frac{\partial\Psi(\vec{r})}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\right]\Psi(\vec{r})$$

$$\Psi_{\vec{p}}(\vec{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi\hbar)^3}}exp\left[i\left(\vec{k}\cdot\vec{r} - \omega t\right)\right]$$

$$\vec{k} = \frac{\vec{p}}{\hbar}; \quad \omega = \frac{E}{\hbar}; \quad E = \frac{p^2}{2m}$$

Трехмерное уравнение Шредингера.
Свободное движение

## Волновые свойства

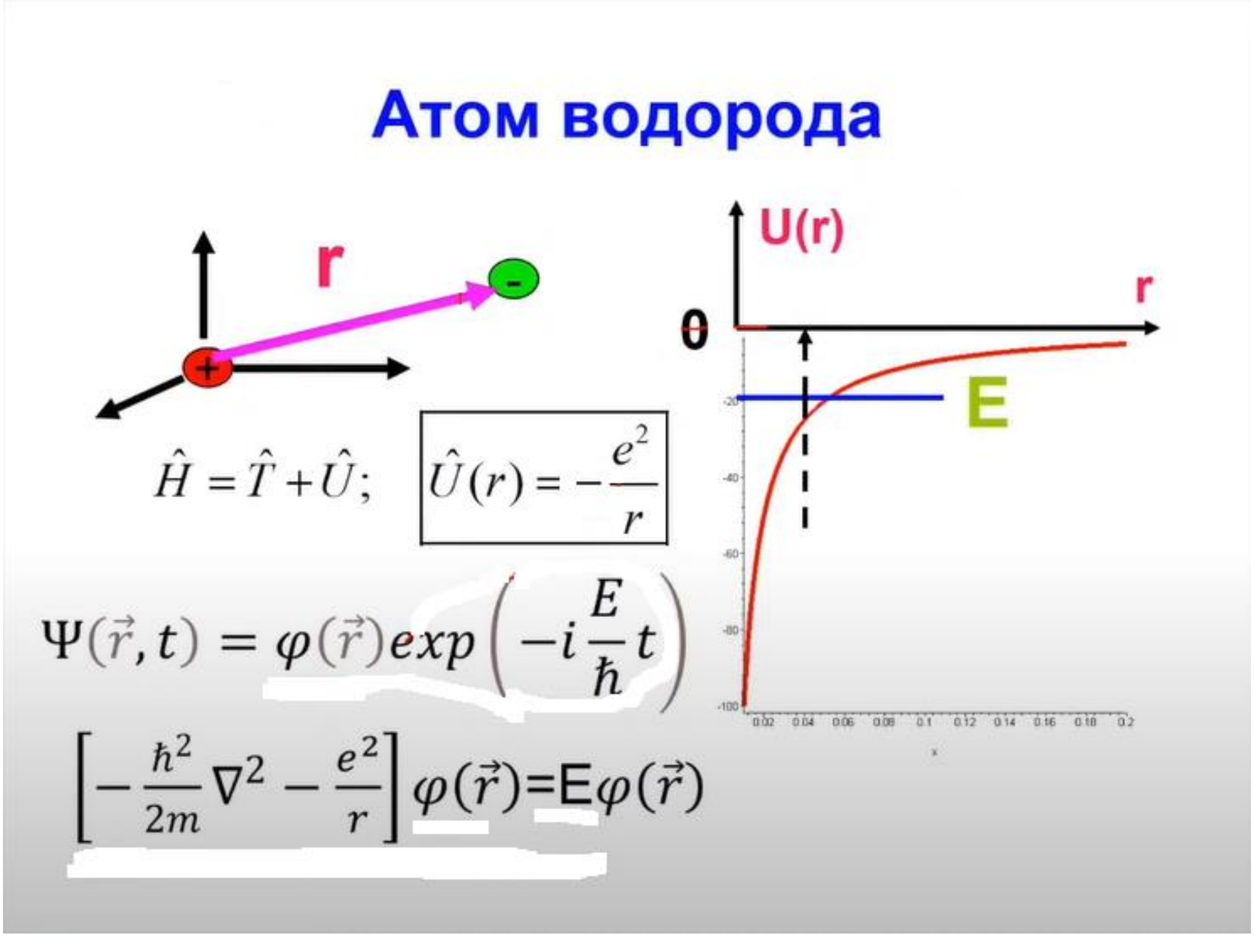
- **Волна де Бройля**

$$\Psi(\vec{\mathrm{r}},\mathrm{t}) = \mathrm{A}\exp\left[\mathrm{i}\left(\frac{\vec{p}}{\hbar}\cdot\vec{r} - \frac{\varepsilon}{\hbar}\mathrm{t}\right)\right]$$

- **Свободное движение**

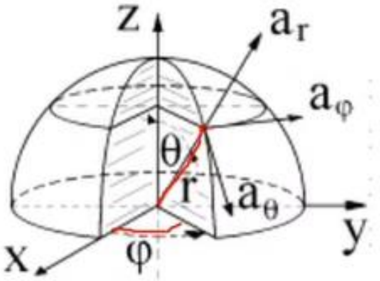
$$\Psi_{\vec{p}}(\vec{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi\hbar)^3}}exp\left[i\left(\vec{k}\cdot\vec{r} - \omega t\right)\right]$$

Волновые свойства
Волна де Бройля
Свободное движение




Атом водорода

## Сферическая система координат




$$\nabla^2 \equiv (\vec{\nabla} \cdot \vec{\nabla}) = \sum_{k=1}^{3} \frac{\partial^2}{\partial x_k^2}$$

$$x = r\sin\theta\,\cos\varphi, \quad y = r\sin\theta\,\sin\varphi, \quad z = r\cos\theta;$$

$$r = \sqrt{x^2+y^2+z^2}, \quad \varphi = \mathrm{arctg}\frac{y}{x}, \quad \theta = \arccos\frac{z}{\sqrt{x^2+y^2+z^2}}.$$

$$\nabla^2 f = \frac{1}{r^2\sin\theta}\left[\sin\theta\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial f}{\partial r}\right) + \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial^2 f}{\partial\varphi^2} + \frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial f}{\partial\theta}\right)\right];$$

Сферическая система координат

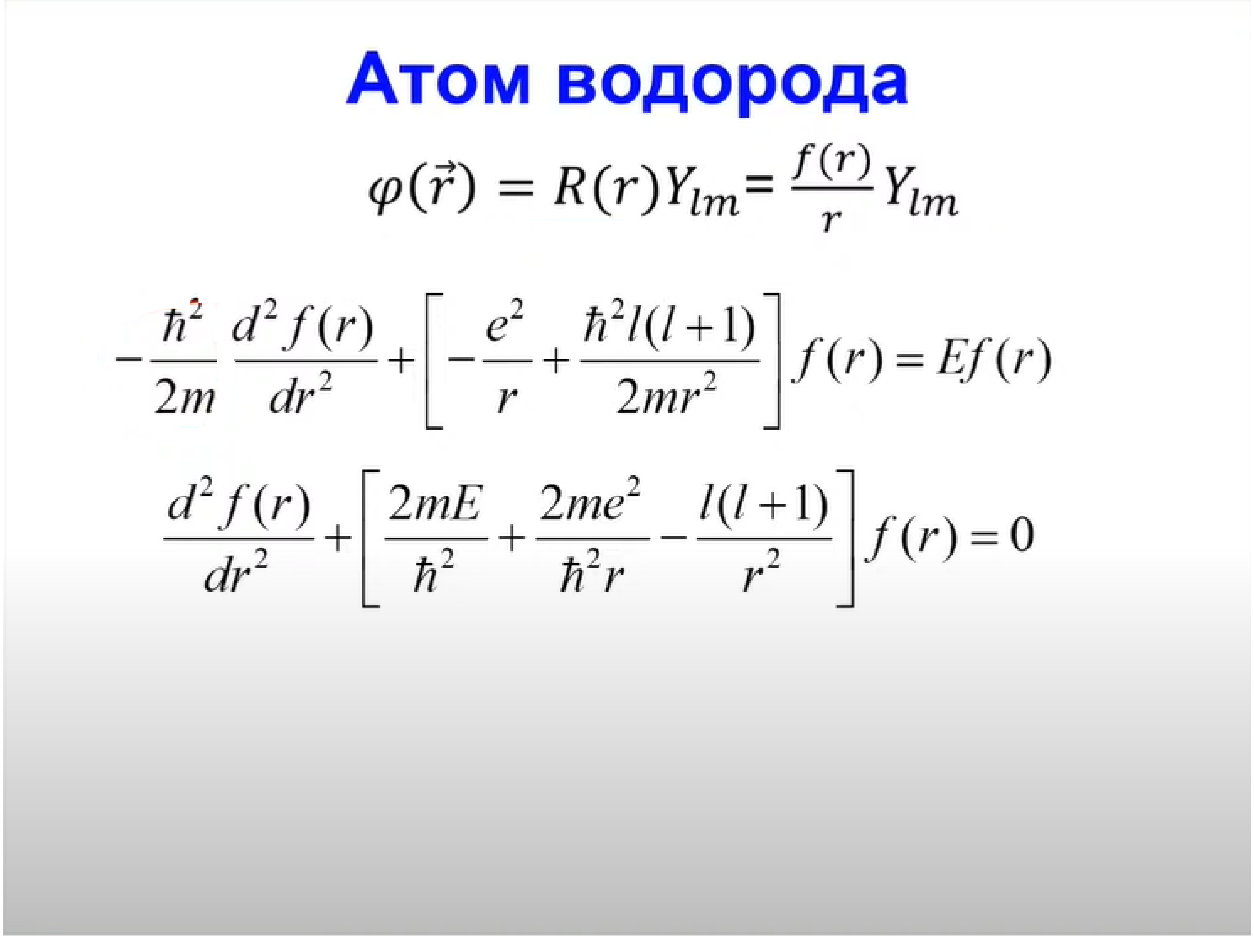
$$\Delta u = \Delta_r u + \frac{1}{r^2}\Delta_{\theta,\varphi} u,$$

$$\Delta_r u = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial u}{\partial r}\right),$$

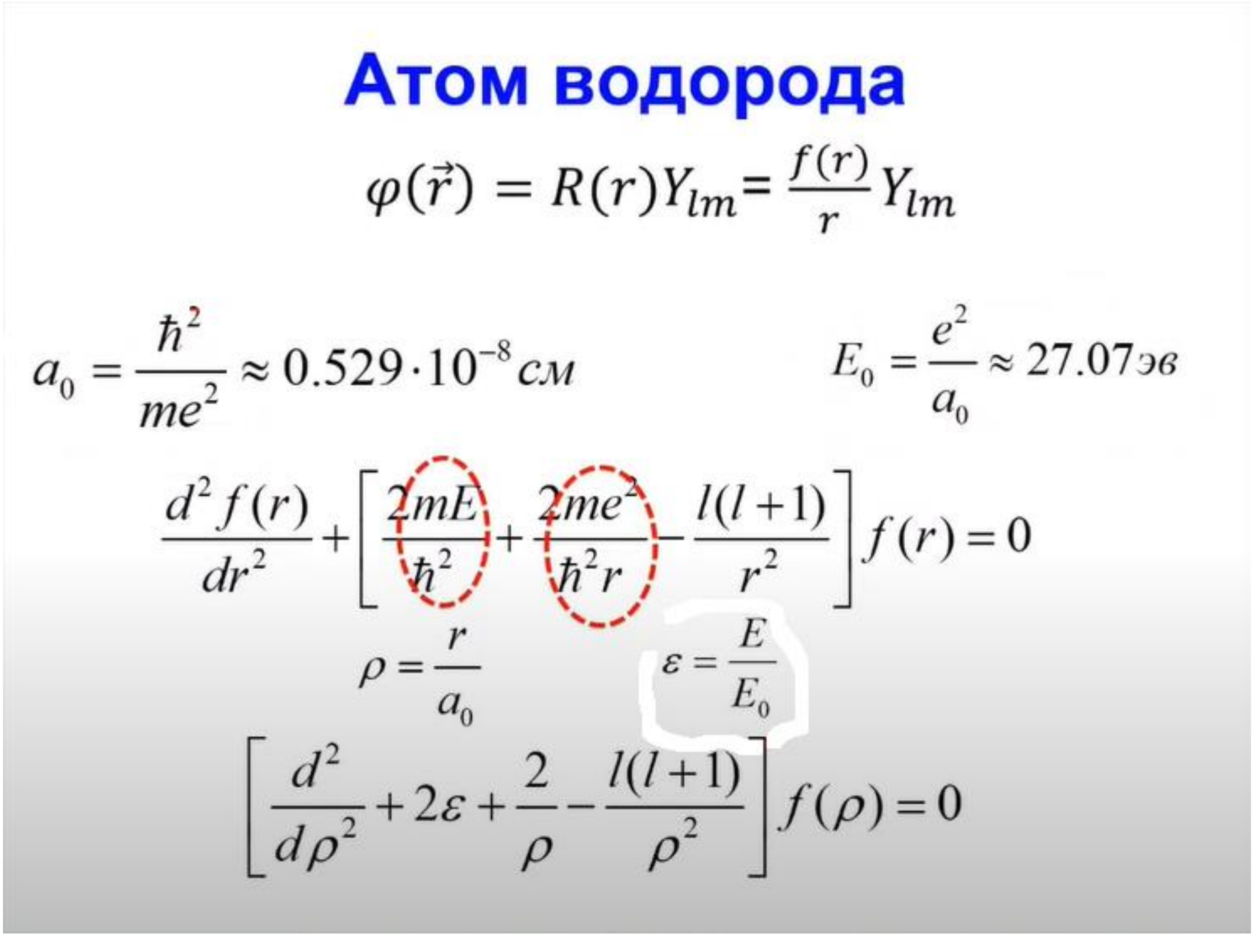
$$\Delta_{\theta,\varphi} u = \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial u}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2 u}{\partial\varphi^2}.$$

$$\frac{r^2\Delta_r R(r)}{R(r)} = -\frac{\Delta_{\theta,\varphi} Y(\theta,\varphi)}{Y(\theta,\varphi)}.$$

$Y_{lm}$; $l$ =0,1,2,…; m=0,±1, ±2,… ±l



Атом водорода

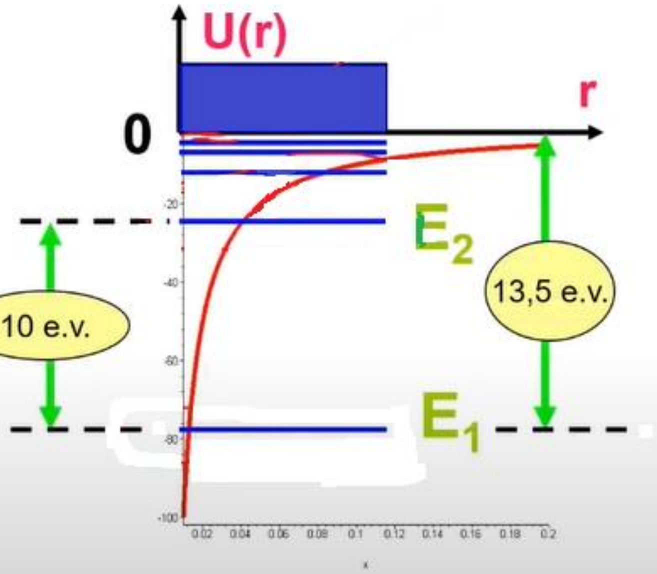


Атом водорода

# Атом водорода

$$\boxed{E_n = -\frac{1}{2n^2}\frac{e^2}{a_0}}$$

$$n = 1, 2, 3, \ldots \infty$$




Атом водорода

# Атом водорода решение

$$\Psi(\vec{r}, t) = \varphi(\vec{r}) exp\left(-i\frac{E}{\hbar}t\right)$$

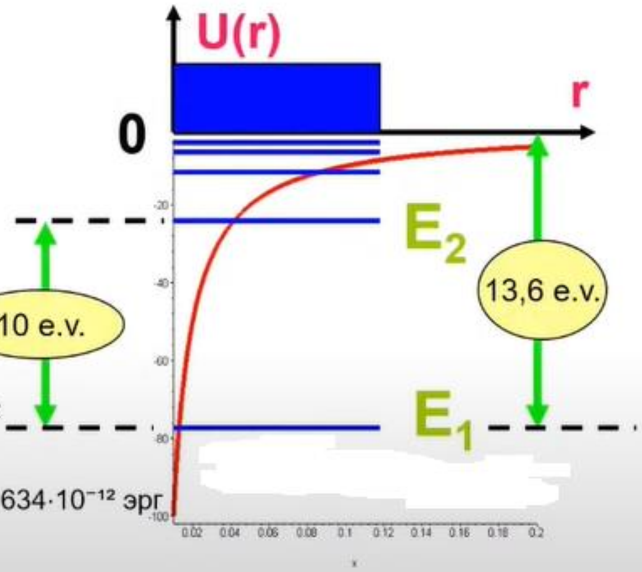
$$\varphi(\vec{r}) = R_{n,l}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi)$$

$$E_n = -\frac{1}{2n^2}\frac{e^2}{a_0}; \quad n = 1,2,..$$

$$\frac{e^2}{2a_0} = \frac{(-1.6 \cdot 10^{-19}\,K)^2}{2\,(0.53 \cdot 10^{-10}\,m)^2} \approx 2,17 \cdot 10^{-18}\text{Дж}$$

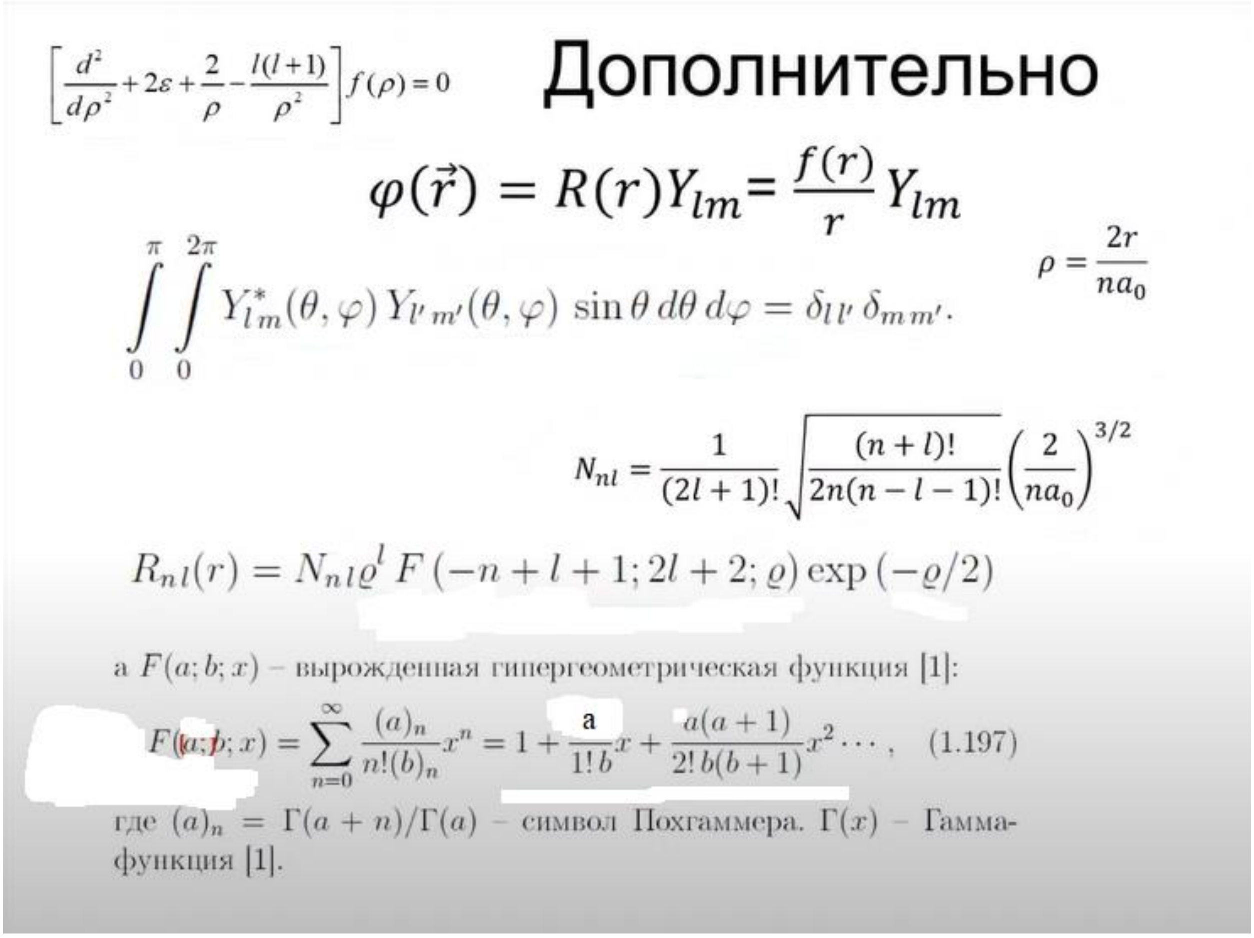
**1e.V.=1**,602 176 634·$10^{-19}$ Дж = **1**,602 176 634·$10^{-12}$ эрг

$$\frac{e^2}{2a_0} \approx 13.6 \text{ e.V.}$$

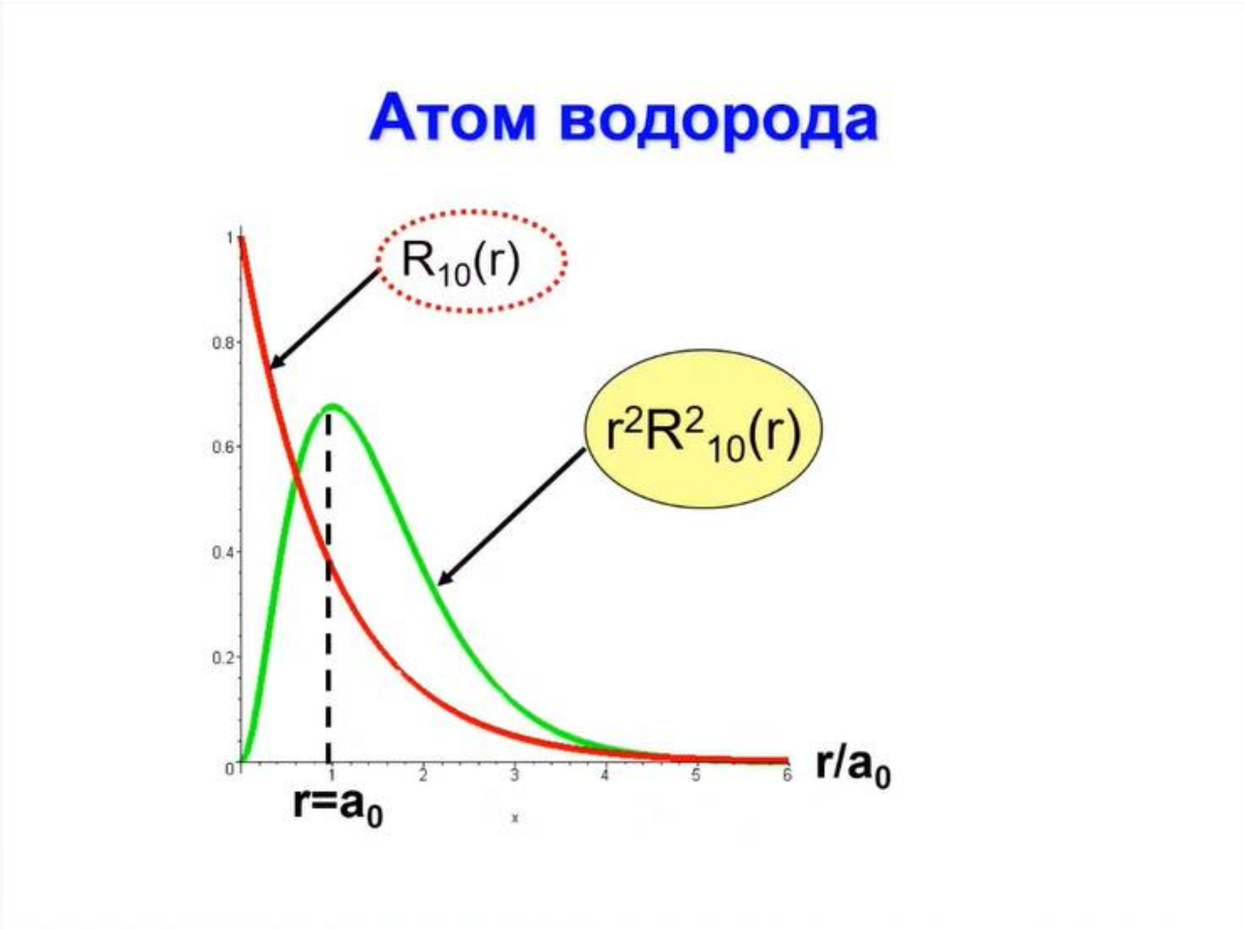



l=0,1,2,…,n-1; m=0, ±1, ±2,…, ±l; орбитальное и магнитное кв числа

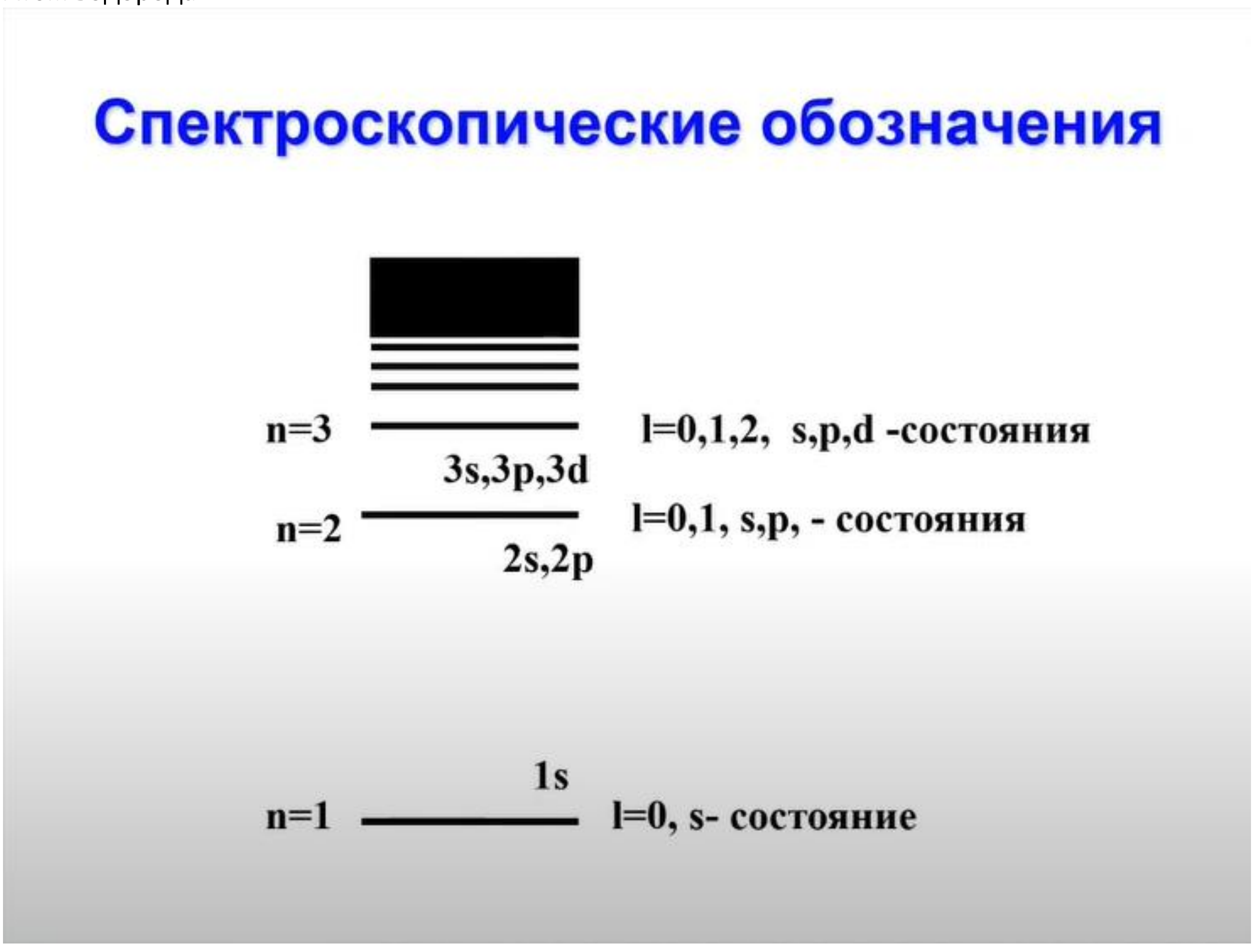
Атом водорода решение
орбитальное и магнитное кв числа




Дополнительно
- вырожденная гепергеометрическая функция [1]:
где – символ Похгаммера. – Гамма-функция [1].

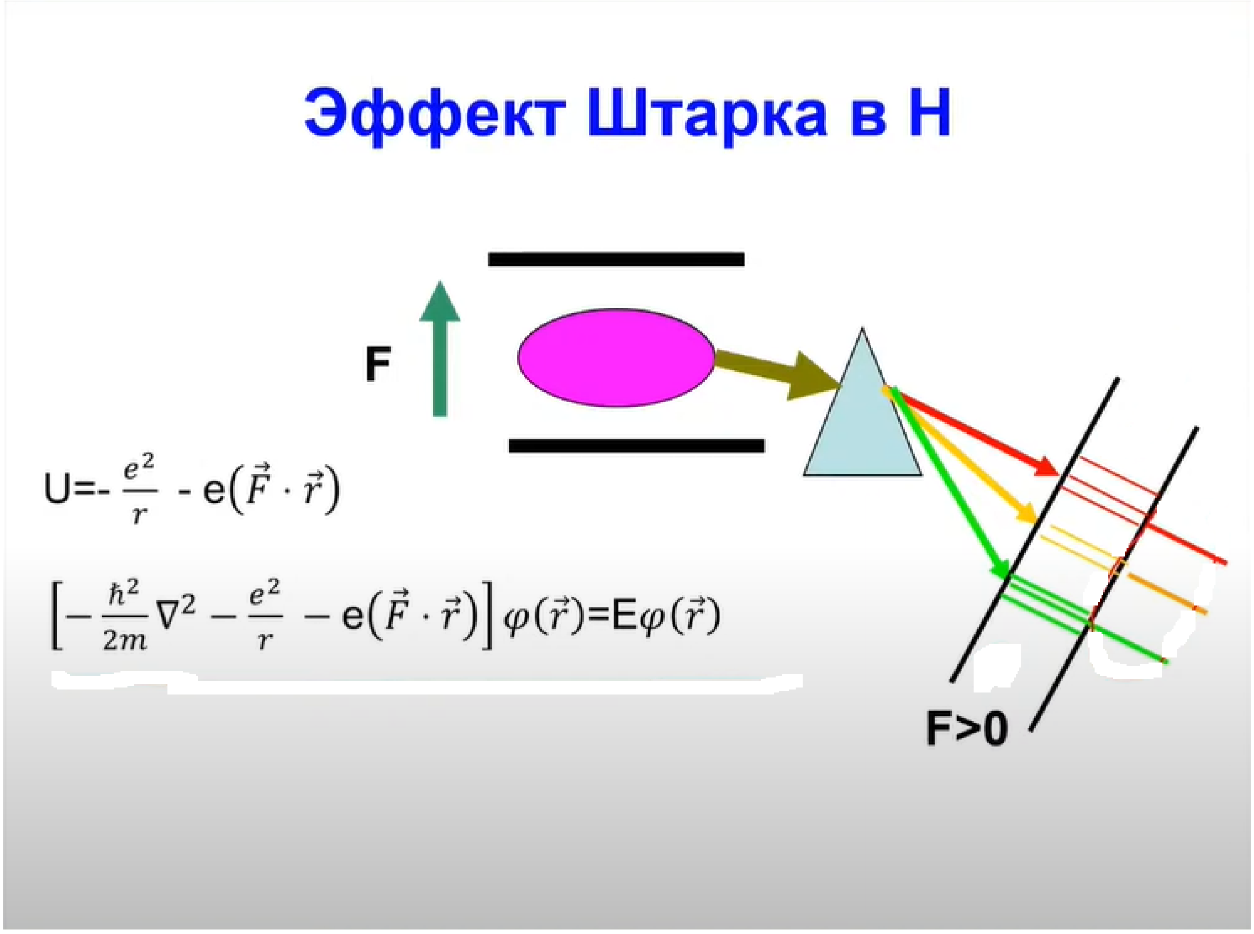


Атом водорода



Спектроскопические обозначения

n=3 l=0,1,2, s,p,d -состояния
n=2 l=0,1, s,p, - состояния
n=1 l=0, s- состояние




Эффект Штарка в H
F>0

# Эффект Штарка в H

- **Решение приближённое**

Эффект Штарка в H
Решение приближённое

# Эффект Зеемана

- Расщепление спектральных линий в магнитном поле
- Согласие с экспериментом не удовлетворительное (не полное)

Эффект Зеемана
Расщепление спектральных линий в
магнитном поле
Согласие с экспериментом не
удовлетворительное (не полное)