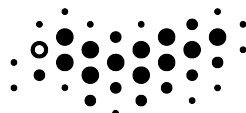


Федеральное государственное автономное
образовательное учреждение высшего образования
"Национальный исследовательский университет ИТМО"



УНИВЕРСИТЕТ ИТМО

Дополнительные главы физики
Задание после лекции 27.03.2023
"Уравнение Шредингера для атома водорода.
Квантовые числа."

Выполнил:
Лопатенко Г. В., М32021

Преподаватель:
Музыченко Я. Б.

Март, 2023

Содержание

1	Провокационный вопрос про GPT	2
2	Волновые функции в 1s, 2s	3
3	Характеристика спина	7

1 Провокационный вопрос про GPT

Как можно эффективно и полезно использовать ChatGPT в образовательном процессе при изучении физики?

Для ответа на данный вопрос можно как раз обратиться к подобным сервисам и проанализировать сгенерированные ответы:

1. Помощь в изучении физических понятий и теорий. С помощью ChatGPT и введения физических терминов и понятий можно составить дополнительные определения, примеры, схемы и иллюстрации к изучаемой теме. Модель сможет генерировать текст, дополняющий и раскрывающий изучаемый материал.
2. Помощь в решении физических задач. ChatGPT может использоваться в качестве средства подсказки, подачи необходимых справочных данных и формул, проведения необходимых преобразований и расчетов при решении задач по физике. С помощью диалога с моделью можно получить решения сложных задач.
3. Обсуждение и анализ результатов выполненных заданий. С помощью диалога с ChatGPT преподаватель и обучающиеся смогут обсудить решения задач, провести их анализ и дать дополнительные рекомендации по их выполнению.

С этими примерами внедрения генеративных нейросетей в образовательный процесс сложно согласиться полностью, потому что уровень доверия к подобным сервисам не всегда можно считать полным: в сложных теоретических выкладках или в более свежем материале ChatGPT ходит вокруг трех сосен и пытается сформировать наиболее вероятный верный ответ. Для простых задач такой подход вполне оправдывает себя, ведь с точки зрения временного ресурса, что может быть приятнее для ленивого мозга? Концепция быстрой выдачи простого ответа пленит мысли типичного пользователя ChatGPT, однако никакого развития в понимании материала, к сожалению, не происходит.

2 Волновые функции в 1s, 2s

Записать волновые функции для состояний 1s и 2s атома водорода. Построить графики радиальных плотностей вероятностей. Найти наиболее вероятные значения для радиусов в этих состояниях.

Радиальные волновые функции в явном виде:

$$\psi_{10} = 2 \left(\frac{Z}{a} \right)^{3/2} \cdot \exp \left(-\frac{Zr}{a} \right), \text{ где } a = \frac{\hbar^2}{kme^2}$$

$$\psi_{20} = \frac{1}{2\sqrt{2}} \left(\frac{Z}{a} \right)^{3/2} \left(2 - \frac{Zr}{a} \right) \cdot \exp \left(-\frac{Zr}{2a} \right)$$

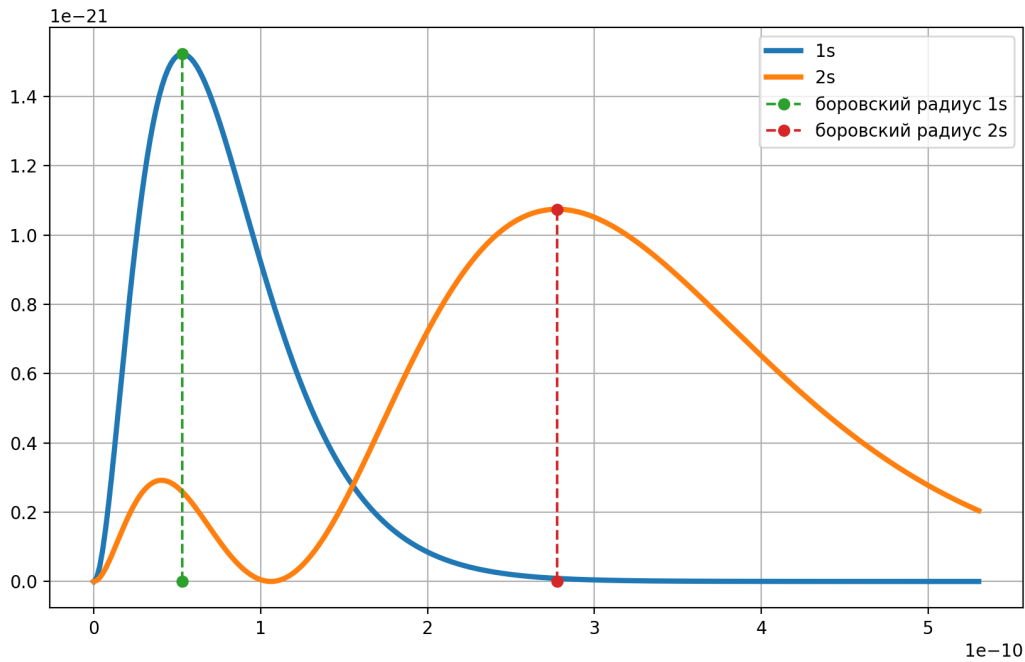


Рис. 1: Радиальные функции распределения

При этом не стоит путать $2s$ и $2p$, состояния. Для $1s$ состояния пик наблюдаемости полагается на боровский радиус a , значение для $2s$ состояния в $(3 + \sqrt{5}) > 4$ раз больше.

Для большего погружения в задание обратимся к моему моделированию в этом модуле, посвященному угловым распределениям вероятности нахождения электронов в атоме: конфигурация строилась по двум квантовым числам l и m , формировались полиномы Лежандра и отображались соответствующие проекции функций распределения вероятности.

Присоединенные полиномы Лежандра по квантовым числам:

```

1 | def get_joined_legendre(l: int, m: int, x: ArrayLike) ->
2 |     ArrayLike:
3 |     check_parameter(l)
4 |     if m == 0 and l < 2:
5 |         if l == 0:
6 |             return 1
7 |         if l == 1:
8 |             return x
9 |     elif m == l:
10 |         return (2 * l - 1) * np.sqrt(1 - x ** 2) *
11 |             get_joined_legendre(l - 1, l - 1, x)
12 |     else:
13 |         if l - 1 < m:
14 |             return 0
15 |         elif l - 2 < m:
16 |             return (2 * l - 1) * x * get_joined_legendre(l -
17 |                 1, m, x) / (l - m)
18 |         else:
19 |             return ((2 * l - 1) * x * get_joined_legendre(l -
20 |                 1, m, x) - (l - 1 + m) * get_joined_legendre(l
21 |                 - 2, m, x)) / (l - m)

```

Получение комплексной экспоненты (формула Эйлера):

```

1 | def get_euler_entity(m: int, x: ArrayLike):
2 |     return np.e ** (m * x * 1j)

```

Получение вида распределения электронной плотности:

```

1 | def get_module_polar_orbital_trajectory(l: int, m: int, theta:
2 |     ArrayLike) -> ArrayLike:
3 |     return abs(get_joined_legendre(l, m, np.array(np.cos(theta
4 |         ))) * get_euler_entity(m, theta)) ** 2
5 |
6 | def show_polar_possibility_plot(l: int, m: int, theta_start:
7 |     float, theta_end: float):
8 |     thetas = np.linspace(theta_start, theta_end, 1000)
9 |     ros = get_module_polar_orbital_trajectory(l, m, thetas)
10 |     fig = plt.figure(figsize=(10, 10))
11 |     ax = plt.subplot(1, 1, 1, projection="polar")
12 |     plt.polar(thetas, ros, label=f"Absolute outline for $Y_{l}^{m}$ ")
13 |     ax.set(title=f"Orbital geometrically probabilistic plot l
14 |         = {l}, m = {m}")
15 |     ax.legend()
16 |     plt.show()
17 |
18 | phi_0, phi_1 = 0, 2 * np.pi
19 | show_polar_possibility_plot(1, 0, phi_0, phi_1)

```

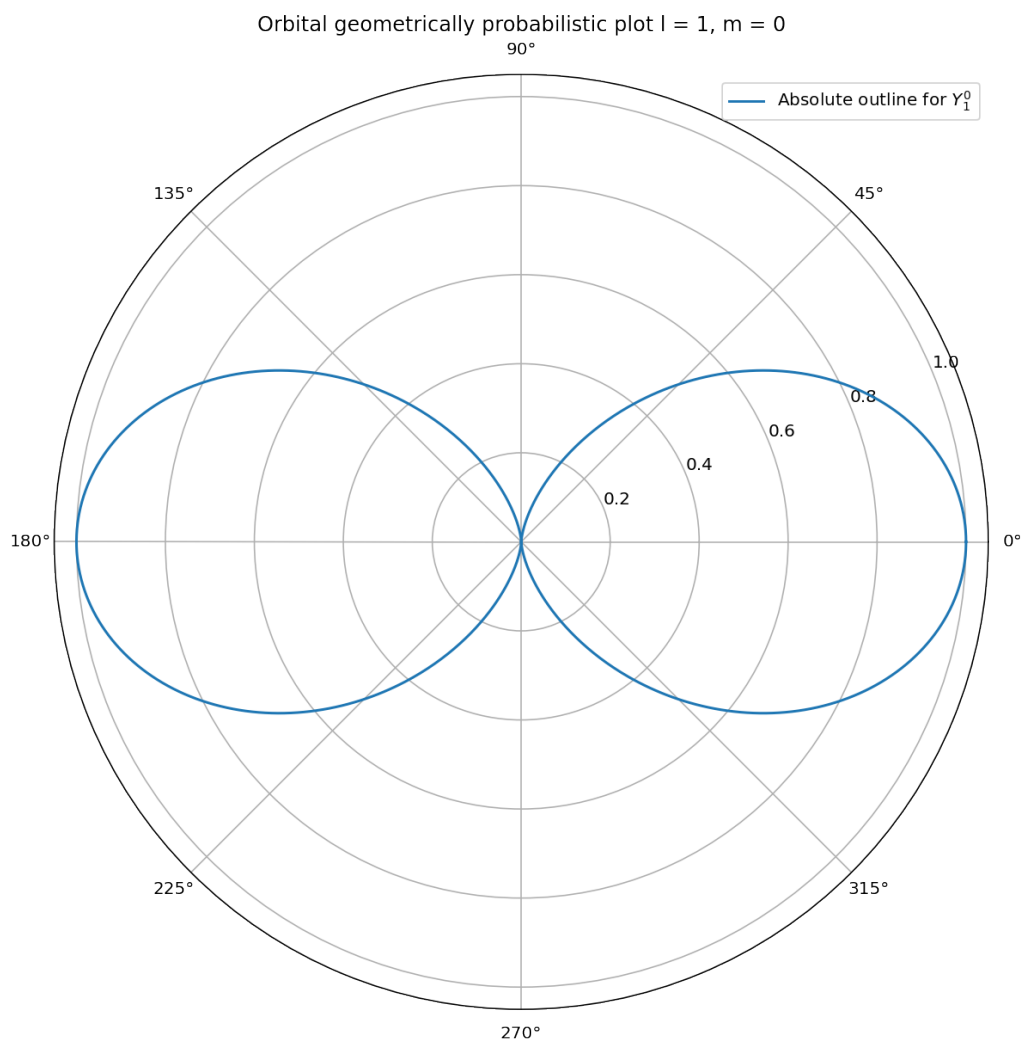


Рис. 2: Проекционная кривая для случая ψ_{10}

И для другой комбинации квантовых чисел:

1 || `show_polar_possibility_plot(2, 0, phi_0, phi_1)`

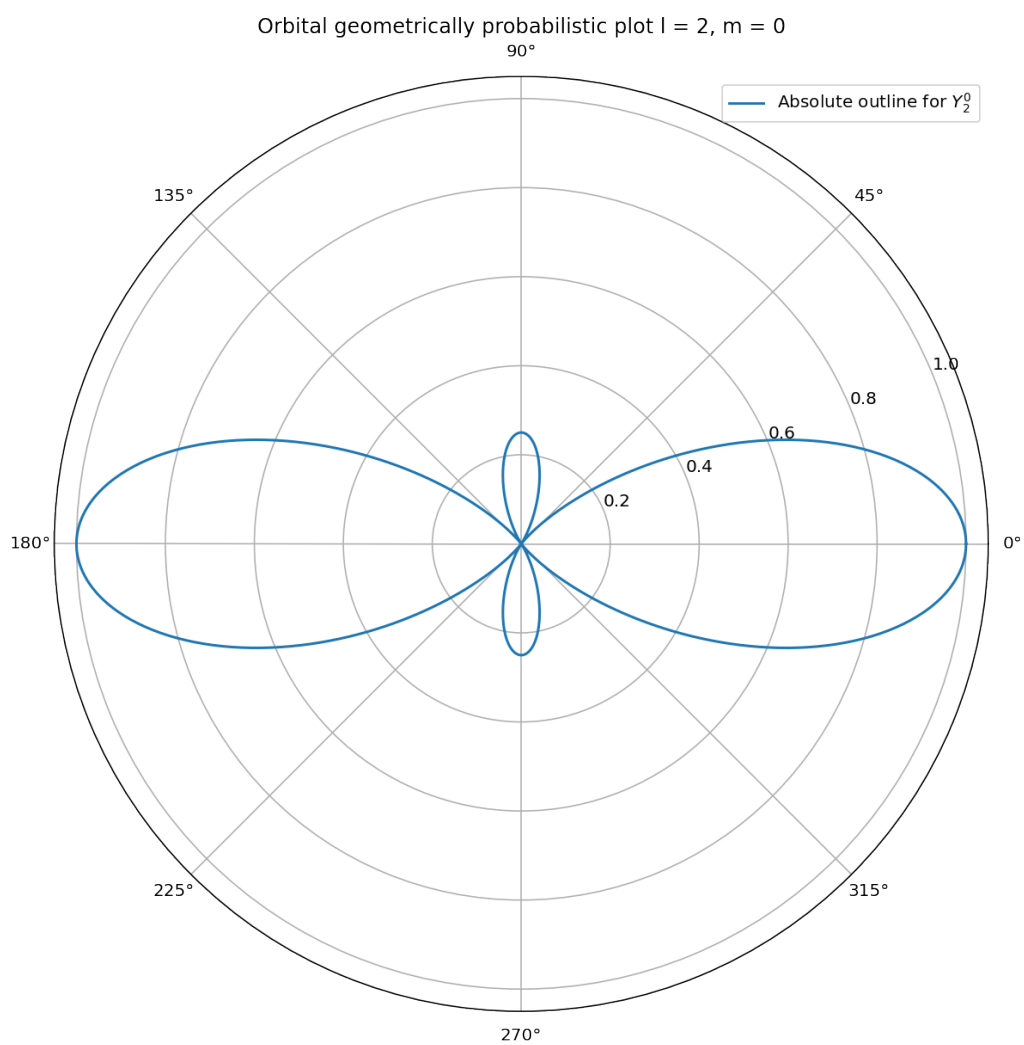


Рис. 3: Проекционная кривая для случая ψ_{20}

1. [ссылка на ноутбук с моделированием](#)

3 Характеристика спина

Привести предпосылки появления спина. Какое правило отбора накладывается на спиновое квантовое число и с чем оно связано?

При описании трехчисленной квантовой теории господи Штерн и Герлах доказали наличие у атомов магнитных моментов и их непосредственное квантование. Однако описание поведения пучка атомов в этом эксперименте требовало расширения квантовой теории: и трех квантовых чисел впервые стало не хватать для описания дублетной структуры спектральных термов щелочных металлов. Сущность гипотезы о наличии характеристики спина состоит в том, что у электрона есть не только момент количества движения и магнитный момент, связанные с перемещением частицы, но и собственный (внутренний) момент. Изначально спин электрона пытались истолковать как момент количества движения, возникающий при вращении электрона вокруг собственной оси. Но такой подход оказался несостоятельным, что понятно из выражения линейной скорости на поверхности частицы:

$$v > \frac{\hbar}{2m_e r} = \frac{\hbar}{2Er/c^2} > \frac{\hbar c^2}{2e^2} > c$$

Правило отбора $\Delta S = \{0, \pm 1\}$ можно интерпретировать как незначительность влияния спина на излучение и поглощение света в оптическом диапазоне: характеристика может меняться по модулю или вовсе не изменяться.

1. Сивухин. ПЗ6: Опыты Штерна и Герлаха. Спин электрона