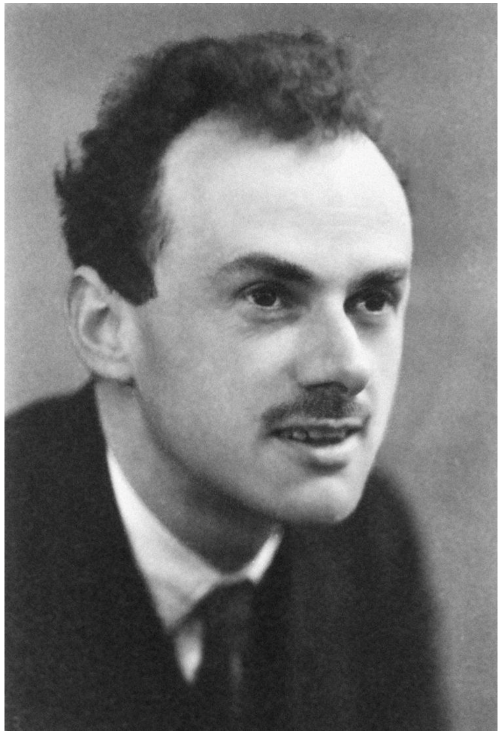
Основи квантової механіки та атомної фізики

Оператори. Власні значення та власні функції операторів. Самоспряжені оператори

Ві́льям Ро́вен Га́мільтон



Поль Адріен Моріс Дірак

Оператор

циркумфлекс

$$\underbrace{\hat{A}}_{\text{оператор}}\varphi = \phi$$

функція

$\frac{d}{dx}(3x^2) = 3\cdot\frac{d}{dx}x^2$

$\varphi = 3x^2$ $\qquad \hat{A}_1 = \frac{d}{dx}$ $\qquad \hat{A}_2 = 3$ $\qquad \hat{A}_3 = \sqrt{\ }$

$\phi_1 = 6x$ $\qquad \phi_2 = 9x^2$ $\qquad \phi_3 = \pm\sqrt{3}x$

лінійний оператор

сталі

$$\hat{A}(\underbrace{C_1\varphi_1 + C_2\varphi_2}_{\varphi}) = C_1\underbrace{\hat{A}\varphi_1}_{\varphi_1} + C_2\underbrace{\hat{A}\varphi_2}_{\varphi_2}$$

сума двох операторів

$$\hat{C} = \underbrace{\hat{A} + \hat{B}} \qquad \hat{C}\varphi = \hat{A}\varphi + \hat{B}\varphi$$

добуток двох операторів

$$\hat{C} = \hat{A} \cdot \hat{B} \qquad \hat{C}\varphi = (\hat{A}\hat{B})\varphi = \underbrace{\hat{A}\underbrace{(\hat{B}\varphi)}_{\varphi\text{-я}}}_{\varphi\text{-я}}$$

$\hat{B}\,(\hat{A}\varphi)$

комутатор двох операторів

$$[\hat{A}\,\hat{B}] = \hat{A}\cdot\hat{B} - \hat{B}\cdot\hat{A}$$

оператори комутують між собою

$$\underbrace{[\hat{A}\,\hat{B}]}\varphi = 0$$

φ – довільна функція

рівняння на власні функції та власні значення

число

$$\hat{F}\varphi = f\,\varphi$$

в загальному випадку

$\{\varphi\}$

$\{f\}$

$$\hat{F}\varphi_1 = f_1\,\varphi_1$$

$$\hat{F}\varphi_2 = f_2\,\varphi_2$$

$$\ldots$$

$$\hat{F}\varphi_N = f_N\,\varphi_N$$

{ f } - *спектр оператора*

$f = 1;\ -2{,}5;\ 2+i4\ldots$

- *дискретний*
- *неперервний*

$0 < f < 5$

1, 2, 3, 4

1,5 ; 1,551

$$\hat{F}\varphi_1 = f \cdot \varphi_1$$

$$\hat{F}\varphi_2 = f \cdot \varphi_2$$

$$\ldots$$

$$\hat{F}\varphi_n = f \cdot \varphi_n$$

$f \to \varphi_1, \varphi_2, \ldots, \varphi_n$

виродження з кратністю n

$\vec{a}\cdot\vec{b} = a\cdot b\cdot\cos\alpha = a_x b_x + a_y b_y + a_z b_z$

скалярний добуток двох функцій

$\varphi_1 \quad \varphi_2$

$$I = \int \varphi_1^* \varphi_2 \, d\tau$$

** - комплексне спряження (i -> -i)*

$i \to -i$

дужки Дірака

$$I = <\varphi_1 | \varphi_2>$$

«бра» «кет»

I=0 ⇔ функції ортогональні

середнє значення оператора $\hat{F}$ *у стані, що описується функцією* φ

$$\overline{F} = \langle F \rangle = \int \varphi^* \hat{F} \varphi \, d\tau = \langle \varphi | \hat{F} | \varphi \rangle$$

ермітово спряжені оператори

$$\hat{F} \qquad\qquad \hat{F}^{+}$$

$$\int \varphi_1^* \hat{F} \varphi_2 d\tau = \int (\hat{F}^{+} \varphi_1)^* \varphi_2 d\tau$$

$$(\hat{F}^{+})^{+} = \hat{F}$$ завжди

$$\hat{F}^{+} = \hat{F}$$ для самоспряженого оператора

середні значення самоспряжених операторів дійсні

$(\varphi^*)^* = \varphi$

$$\overline{F} = \int \varphi^* \hat{F} \varphi d\tau$$

$\hat{F}^+ = \hat{F}$

$$\left(\overline{F}\right)^* = \int \varphi (\hat{F}\varphi)^* d\tau = \int (\hat{F}\varphi)^* \varphi d\tau = \int \varphi^* \hat{F}^+ \varphi d\tau =$$

$$= \int \varphi^* \hat{F} \varphi d\tau = \overline{F}$$

$$\int \varphi_1^* \hat{F} \varphi_2 d\tau = \int (\hat{F}^+ \varphi_1)^* \varphi_2 d\tau$$

різні власні функції самоспряженого оператора ортогональні

$$\hat{F}\varphi_n = f_n\,\varphi_n \qquad \hat{F}\varphi_n = f_n\,\varphi_n \qquad \int \varphi_m^* \bullet \quad \hat{F}\varphi_n = f_n\,\varphi_n$$

$$\hat{F}\varphi_m = f_m\,\varphi_m \qquad \left(\hat{F}\varphi_m\right)^* = f_m\,\varphi_m^* \qquad \int \varphi_n \bullet \quad \left(\hat{F}\varphi_m\right)^* = f_m\,\varphi_m^*$$

$$\int \varphi_m^* \hat{F}\varphi_n\,d\tau - \int \varphi_n \left(\hat{F}\varphi_m\right)^* d\tau = \int (\varphi_m^* \hat{F}\varphi_n - \varphi_m^* \hat{F}\varphi_n)\,d\tau = 0$$

$$0 = \underbrace{(f_n - f_m)}\int \varphi_m^* \varphi_n\,d\tau$$

$$\boxed{f_n \neq f_m} \quad \Leftrightarrow \quad \underbrace{\int \varphi_m^* \varphi_n\,d\tau = 0}$$

повнота системи власних функцій

$\vec{i}, \vec{j}, \vec{k}$

бурв-уна

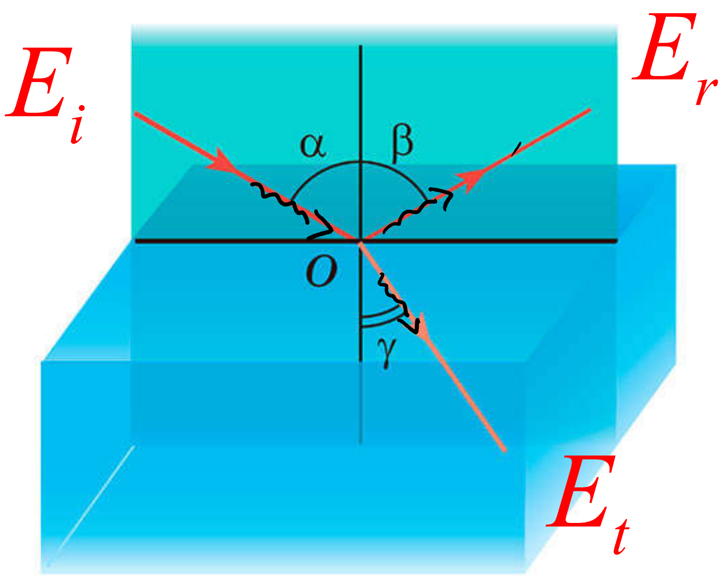
$$\psi = \sum_{n=1}^{N} C_n \varphi_n$$

$$[\hat{F}\hat{G}] = 0 \quad \Leftrightarrow \quad \begin{aligned} \hat{F}\psi_n &= f_n \psi_n; \\ \hat{G}\psi_n &= g_n \psi_n \end{aligned}$$

Роль вимірювання при дослідженні квантових мікросистем. Квантовий постулат Бора

Хто не шокований квантовою теорією, той її не зрозумів

Нільс Ге́нрик Дави́д Бор



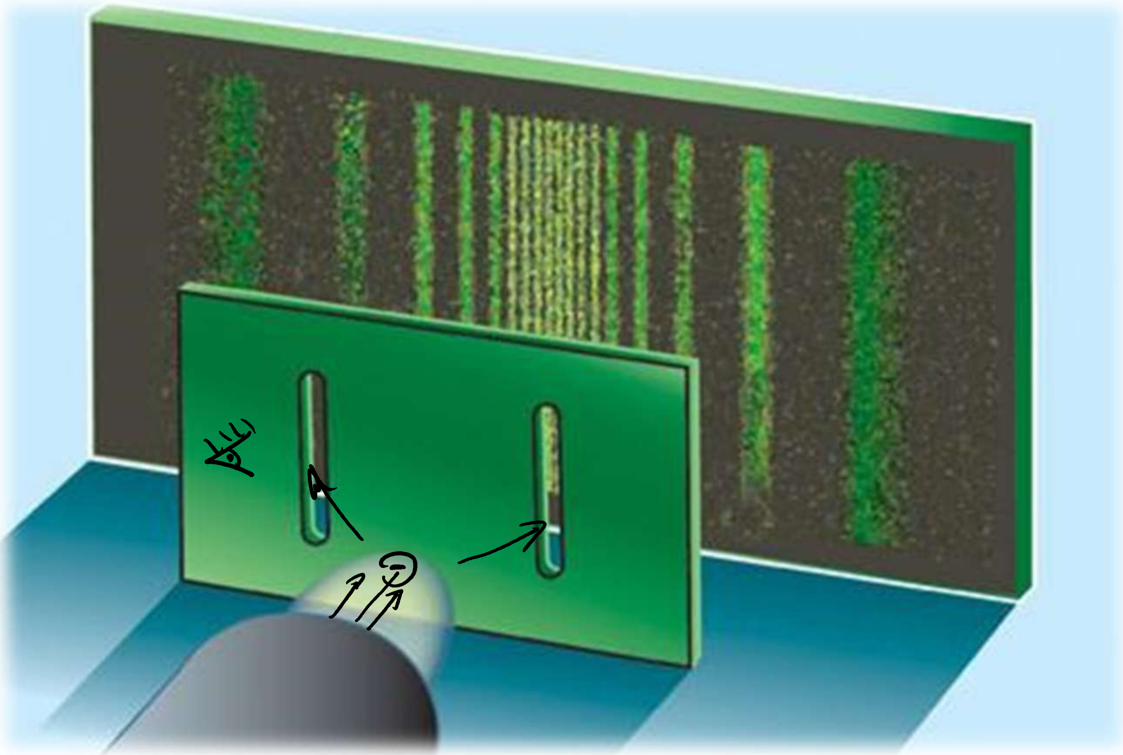
$E = \hbar\omega = h\nu$

$$E_i = E_{i0}\cos(k_i r_i - \omega_i t)$$

$$E_r = E_{r0}\cos(k_r r_r - \omega_r t)$$

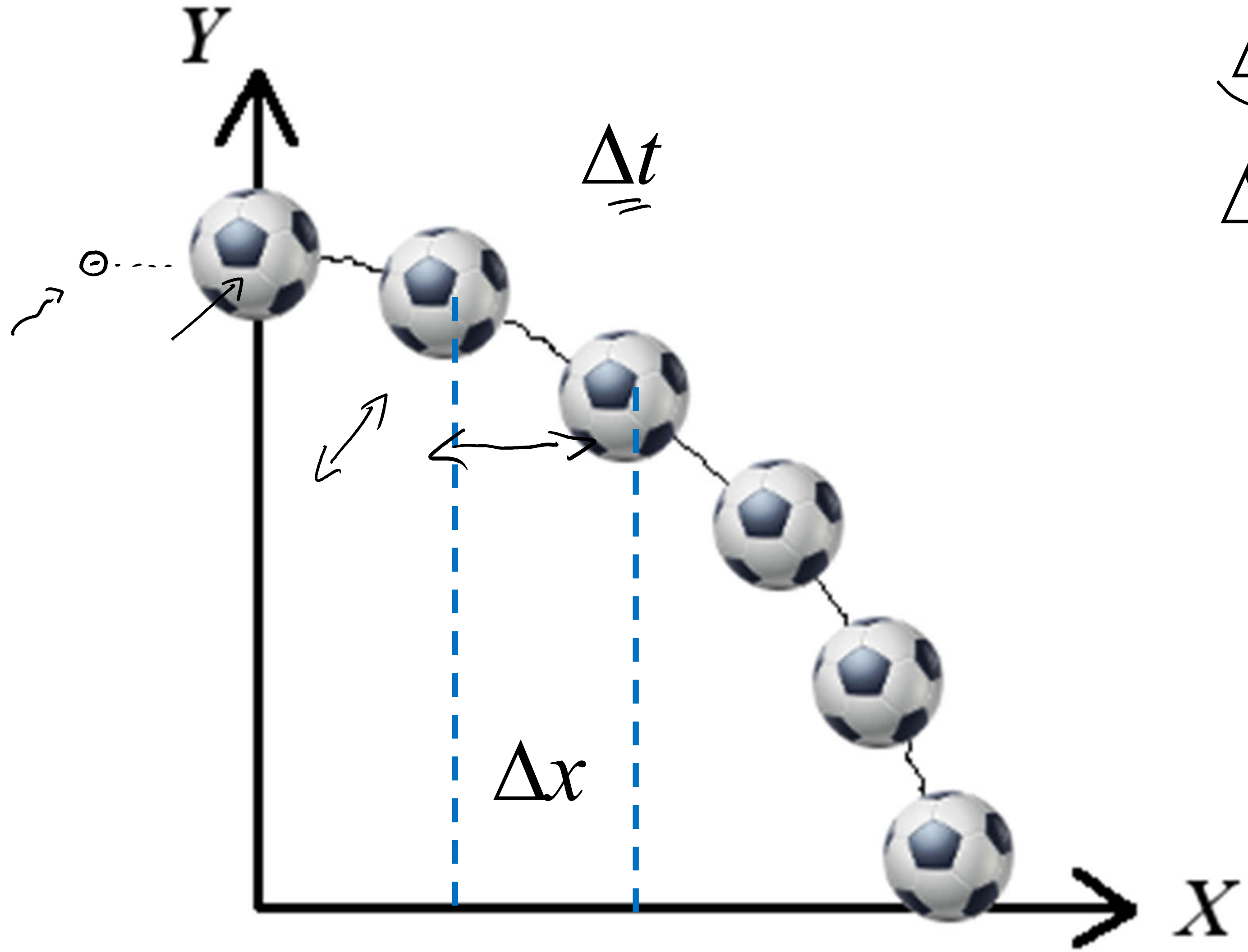
$$E_t = E_{t0}\cos(k_t r_t - \omega_t t)$$

$$\omega_i = \omega_t = \omega_r = \omega$$



e^-

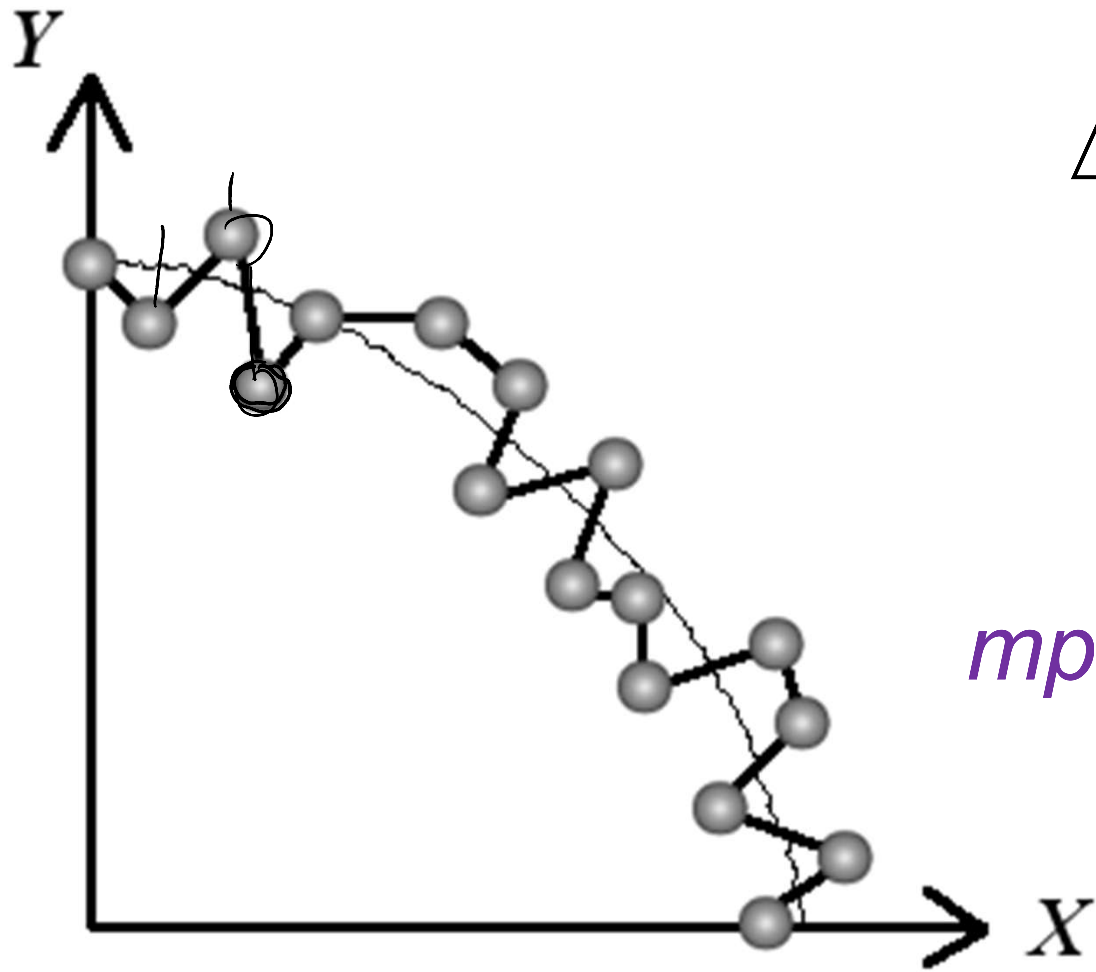
Система має описуватися статистично !



$$\Delta t \to dt$$

$$\Delta x \to dx$$

$$\upsilon = \frac{dx}{dt}$$



$$\Delta t \to dt$$

$$\Delta x \to ?\, dx$$

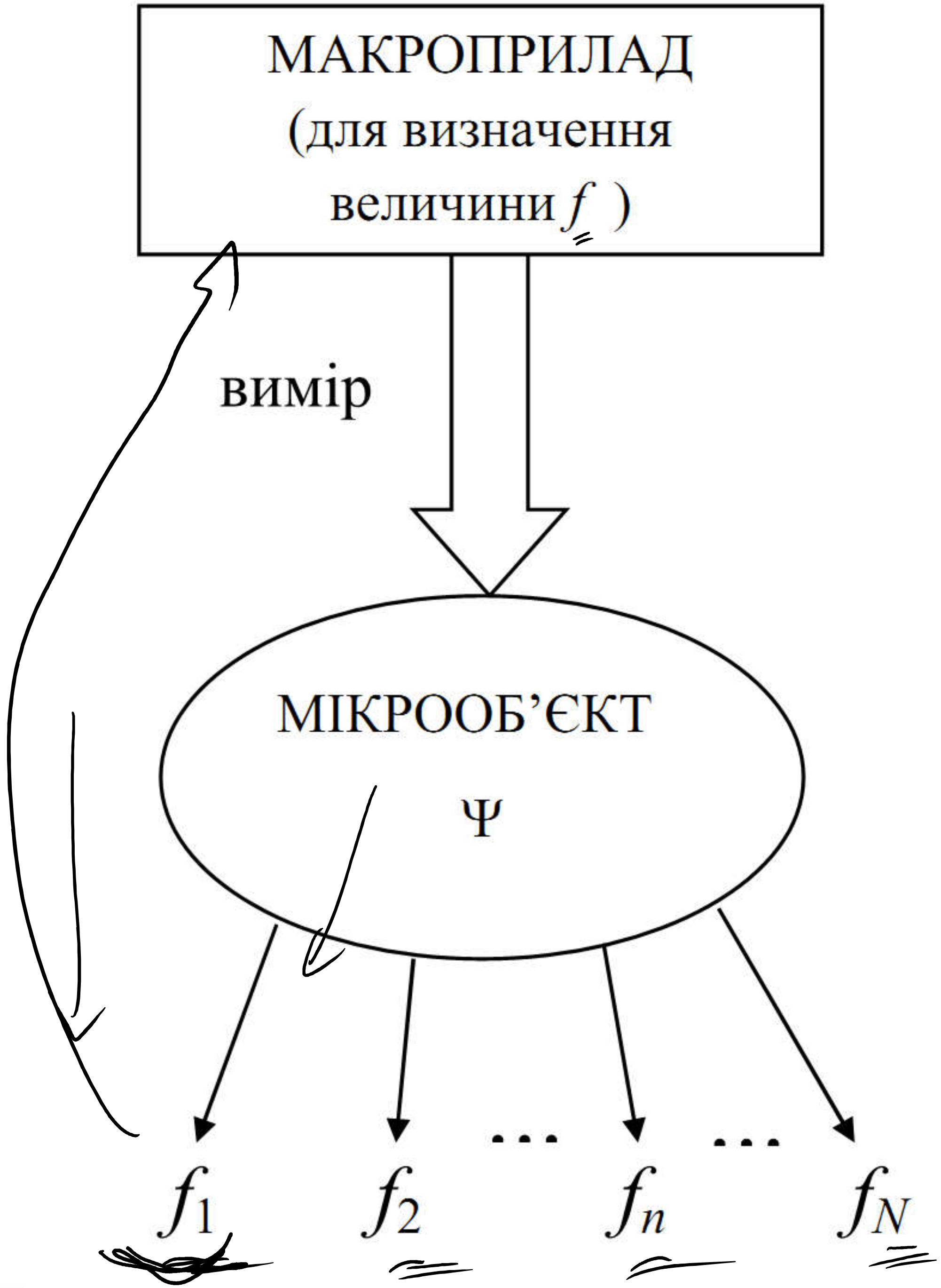
$$\upsilon - ?$$

траєкторія?

Не можна нехтувати взаємодією з приладом !

Квантовий постулат Бора:

будь-яке спостереження квантового мікрооб'єкта обов'язково передбачає його взаємодію з засобами спостереження, причому величина взаємодії не менша $\underset{\sim}{\hbar}$


МАКРОПРИЛАД
(для визначення
величини f)
вимір
МІКРООБ'ЄКТ
Ψ
…
…
f_1
f_2
f_n
f_N

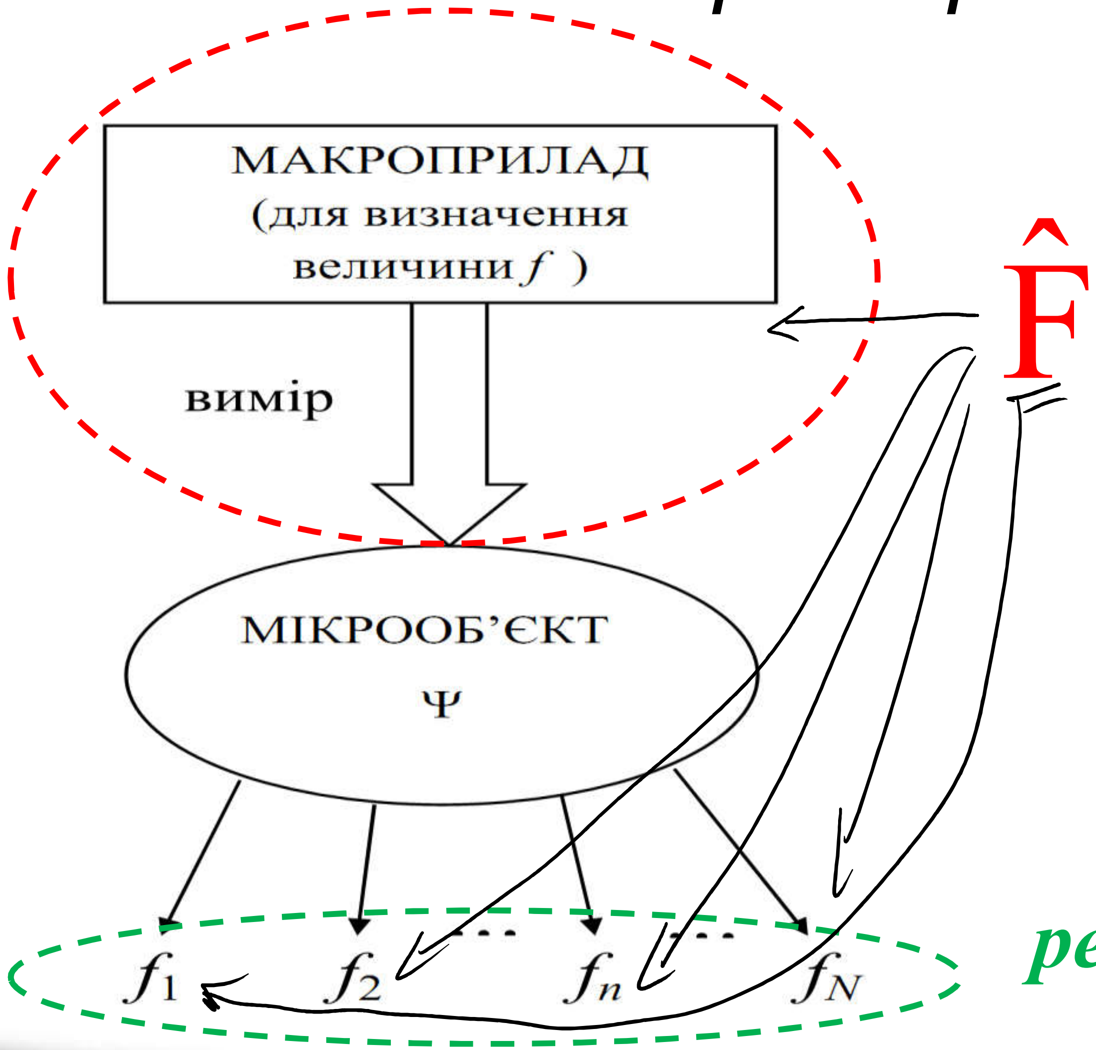
Постулати квантової механіки. Фізичний зміст хвильової функції

Джеймс Франк

Макс Борн

Постулат 1. *Кожній фізичній величині ставиться у відповідність певний оператор*

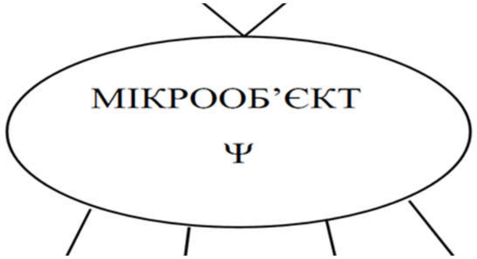
$\hat{F}^+ = \hat{F}$

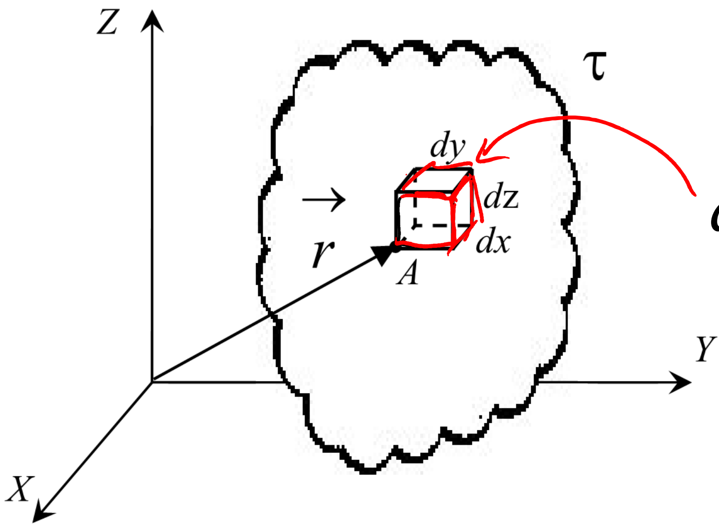


результат вимірювання

Постулат 2. *Стан квантової мікросистеми може бути описаний певною комплексною функцією координат та часу* $\psi(\vec{r},t)$

М. Борн, 1926

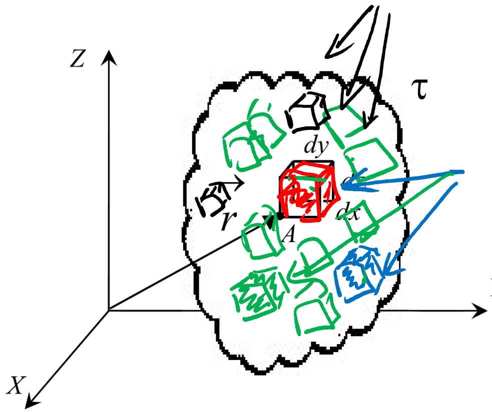




ймовірність знаходження частинки в об'ємі $d\tau$ з координатами ($x \div x+dx$; $y \div y+dy$; $z \div z+dz$)

$$dP(x,y,z,t) = \psi(\vec{r},t)\cdot\psi^*(\vec{r},t)\,dxdydz = |\psi|^2\, d\tau$$

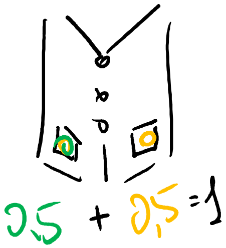
$$\frac{dP}{d\tau} = |\psi|^2 \qquad d\tau = 1 \;\Rightarrow\; dP = |\psi|^2$$



достовірна подія

$\psi = \psi(x, y, z, t)$

$$P = \int_{\tau} dP = \iiint_{x\,y\,z} |\,\psi\,|^2 \, dx \, dy \, dz = 1$$

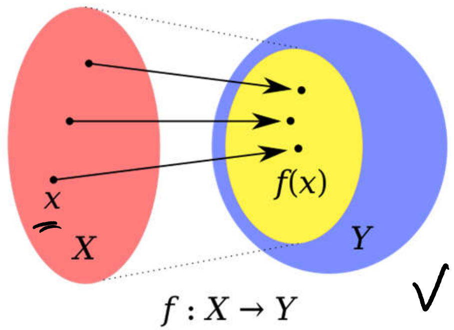


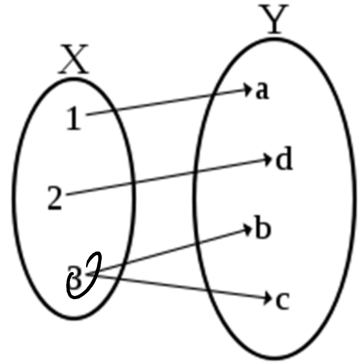
умова нормування хвильової функції

$$\int |\,\psi\,|^2 \, d\tau = 1$$

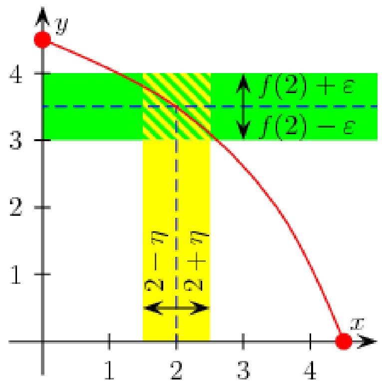
хвильова функція має бути

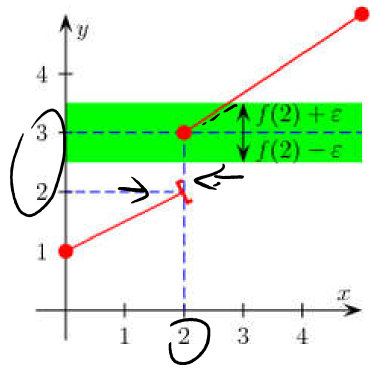
- ✓*однозначною*





- ✓*неперервною*





- ✓*скінченною*

частинок дві

$$dP = |\psi(x_1, y_1, z_1, x_2, y_2, z_2, t)|^2 \underbrace{\overbrace{dx_1 dy_1 dz_1}^{dV_1}\overbrace{dx_2 dy_2 dz_2}^{dV_2}}_{d\tau}$$

вимір f в стані

$$\hat{F}\psi = \varphi$$

f

$$\hat{F}\psi_n = f_n\psi_n$$

власне знач.

передбачуване вимірювання

Постулат 3. *Принцип суперпозиції станів*

$$\hat{F}\psi_n \Rightarrow f_n$$

$$\hat{F}\psi_m \Rightarrow f_m$$

$$\hat{F}(C_1\psi_n + C_2\psi_m) \Rightarrow \quad ?$$

$$\hat{F}\Phi \to \begin{matrix} f_1 \\ f_2 \\ \vdots \\ f_n \end{matrix}$$

$$\hat{F} : \{\psi_n\}, \{f_n\}$$

довільний стан

$$\Phi = \sum_n C_n \psi_n$$

?

$$\int_\tau \psi_m^* \Phi d\tau = <\psi_m | \Phi> = \int_\tau \psi_m^* (\sum_n C_n \psi_n) d\tau = \sum_n C_n \int_\tau \psi_m^* \psi_n d\tau$$

$m \neq n$

$m = n$

$$\int_\tau \psi_m^* \psi_n d\tau = \delta_{mn} = \begin{cases} 0, & m \neq n \\ 1, & m = n \end{cases}$$

$$<\psi_m | \Phi> = \sum_n C_n \delta_{mn} = C_m$$

$$C_m^* = \int_\tau \psi_m \Phi^* d\tau$$

символ Кронекера

$$f_1, f_8, f_4, f_4, f_7, f_1, f_2, f_7, f_3, f_1, f_5, f_6$$

$$\overline{F} = \frac{f_1 + f_8 + f_4 + f_4 + f_7 + f_1 + f_2 + f_7 + f_3 + f_1 + f_5 + f_6}{12} =$$

$$= \frac{3 \cdot f_1 + 1 \cdot f_8 + 2 \cdot f_4 + 2 \cdot f_7 + 1 \cdot f_2 + 1 \cdot f_3 + 1 \cdot f_5 + 1 \cdot f_6}{12} =$$

$$= \frac{N_{f_1} \cdot f_1 + N_{f_2} \cdot f_2 + N_{f_3} \cdot f_3 + N_{f_4} \cdot f_4 + N_{f_5} \cdot f_5 + N_{f_6} \cdot f_6 + N_{f_7} \cdot f_7 + N_{f_8} \cdot f_8}{N_{\text{заг}}} =$$

$$= \sum_n \frac{N_{f_n}}{N_{\text{заг}}} f_n \qquad P_n = \lim_{N_{\text{заг}} \to \infty} \left(\frac{N_{f_n}}{N_{\text{заг}}} \right)$$

$N_{\text{заг}} \to \infty$

$$\{f_n\} \qquad P_n = \lim_{N_{заг}\to\infty}\left(\frac{N_{f_n}}{N_{заг}}\right)$$

$$\overline{F} = \sum_n P_n f_n$$

ср. вл. ф-л $\hat{F}$

φ ''

$f_n \psi_n$

$$\overline{F} = \int \Phi^* \hat{F} \Phi \, d\tau = \int \sum_m C_m^* \psi_m^* \hat{F} \boxed{\sum_n C_n \psi_n} \, d\tau = \sum_{m,n} C_m^* C_n \int \psi_m^* \hat{F} \psi_n \, d\tau =$$

$C_m^* \cdot C_n$ ''

$$= \sum_{m,n} C_m^* C_n \int \psi_m^* f_n \psi_n \, d\tau = \sum_{m,n} C_m^* C_n f_n \delta_{mn} = \sum_n |C_n|^2 f_n$$

m=n

$$\boxed{P_n = |C_n|^2}$$

Постулат 4. *Хвильова функція може бути визначена шляхом розв’язку рівняння Шредінгера*

$\int_1^2 n(\vec{r},\omega)\,dl - \min$

$\int_1^2 \sqrt{2m(E-U)}\,dl - \min$

1926 р.

пот. енергія

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

$$ПДСК: \qquad \Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

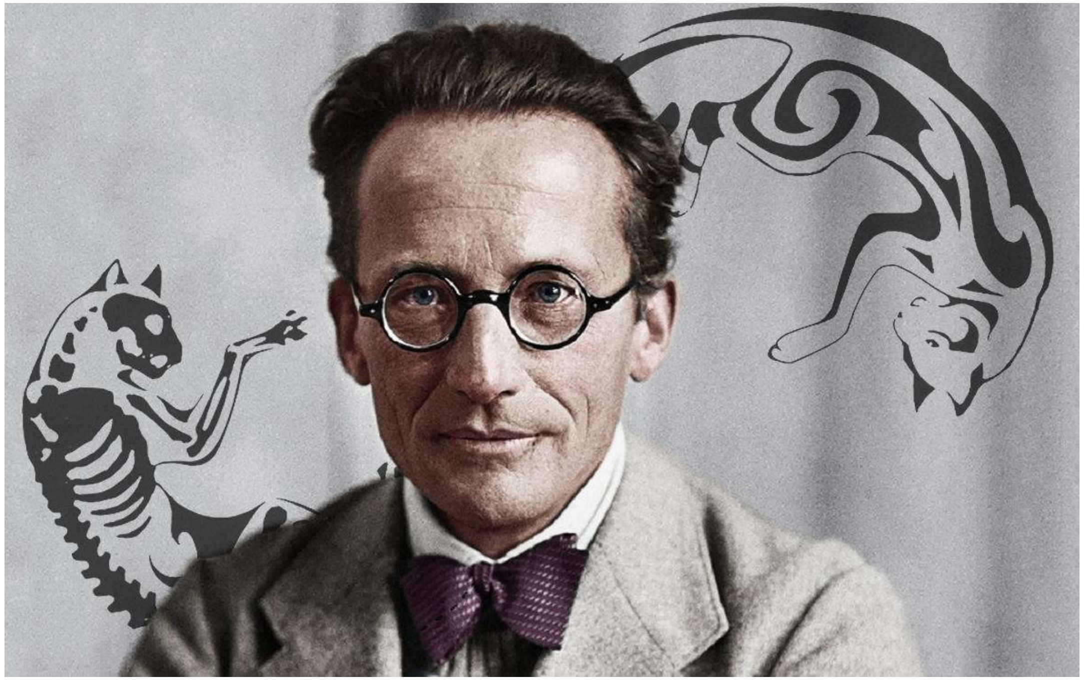
рівняння Дірака

$$\left(mc^2\alpha_0 + c\sum_{j=1}^{3}\alpha_j\hat{p}_j\right)\psi(\mathbf{x},t) = i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}(\mathbf{x},t)$$

рівняння Паулі

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \hat{H}\psi = \left[\frac{1}{2m}(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A})^2\hat{I} + e\varphi\hat{I} - \frac{e\hbar}{2mc}(\hat{\sigma}\cdot\mathbf{B})\right]\psi$$

Рівняння Шрьодинґера. Стаціонарне рівняння Шрьодинґера. Оператор Гамільтона



Éрвін Рýдольф Йóзеф Алексáндер Шрéдінгер

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

$$U(\vec{r},t) \equiv U(\vec{r})$$

$$\Psi(\vec{r},t) = \psi(\vec{r})\cdot\varphi(t)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta(\psi(\vec{r})\cdot\varphi(t)) + U(\vec{r})\psi(\vec{r})\cdot\varphi(t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}(\psi(\vec{r})\cdot\varphi(t))$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta(\psi(\vec{r})\cdot\varphi(t))+U(\vec{r})\psi(\vec{r})\cdot\varphi(t)=i\hbar\frac{\partial}{\partial t}(\psi(\vec{r})\cdot\varphi(t))$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\varphi\Delta\psi+U(\vec{r})\psi\varphi=i\hbar\psi\frac{\partial\varphi}{\partial t} \qquad \times\frac{1}{\psi\varphi}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\Delta\psi}{\psi}+U=i\hbar\frac{1}{\varphi}\frac{\partial\varphi}{\partial t}$$

координата *час*

стаціонарне рівняння Шредингера

$$\underbrace{\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U(\vec{r})\right]}\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r})$$

оператор Гамільнона

- повна енергія частинки

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U(\vec{r})$$

$$\hat{\mathrm{H}}\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r})$$

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

оператор повної енергії

$$\hat{\mathrm{K}} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta$$

оператор кінетичної енергії

$$\hat{\mathrm{U}} = U(\vec{r})$$

оператор потенціальної енергії

$$E$$

можливі значення енергії системи

$$i\hbar \frac{1}{\varphi}\frac{d\varphi}{dt} = E$$

$$\int \frac{d\varphi}{\varphi} = \int -\frac{i}{\hbar} E dt$$

$$\frac{1}{i} = -i$$

$$\int \frac{d\varphi}{\varphi} = -\frac{i}{\hbar} E \int dt + \ln C$$

$$\ln \varphi = -\frac{i}{\hbar} E t + \ln C$$

$$\varphi(t) = C \exp\left(-i \frac{E}{\hbar} t \right) = \varphi(0) \exp\left(-i \frac{E}{\hbar} t \right)$$

хвильова функція частинки в стаціонарному стані

повна енергія

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

exp(0) = 1

$$|\Psi(\vec{r},t)|^2 = \psi(\vec{r})\exp\left(-i\frac{E}{\hbar}t\right)\cdot\psi^*(\vec{r})\exp\left(i\frac{E}{\hbar}t\right) = |\psi(\vec{r})|^2$$

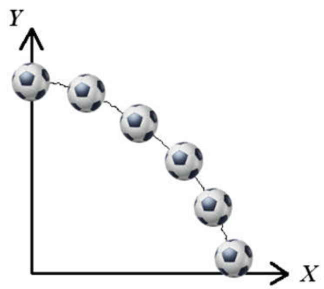
$\Psi_{живий}$ $\Psi_{мертвий}$

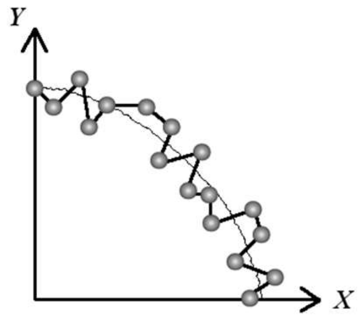
$$\Psi = C_1 \Psi_{мертвий} + C_2 \Psi_{живий}$$

Середнє значення фізичної величини. Диференціювання операторів за часом. Фізичні величини, що зберігаються

Юджин Пол Вігнер

Еммі Нетер





$\Delta t \to dt$

$\Delta x \not\to dx$

$$< F > = \bar{F} = \int \psi^* \hat{F} \psi d\tau$$

Похідною за часом від величини F називають таку величину, середнє значення якої дорівнює похідній за часом від середнього значення величини F

$$\hat{\dot{F}} \equiv \frac{d\hat{F}}{dt}$$

$$\left\langle \frac{dF}{dt} \right\rangle = \frac{d}{dt} < F >$$

$$\overline{\frac{dF}{dt}} = \frac{d}{dt}\overline{F}$$

$$\overline{\frac{dF}{dt}} = \frac{d}{dt}\overline{F} \qquad \overline{F} = \int \psi^* \hat{F}\, \psi\, d\tau$$

$$\frac{d}{dt}\overline{F} = \frac{d}{dt}\left(\int \psi^* (\hat{F}\psi)\, d\tau\right) =$$

$$= \int \left(\frac{\partial \psi^*}{\partial t} \hat{F}\psi + \psi^* \frac{\partial \hat{F}}{\partial t}\psi + \psi^* \hat{F} \frac{\partial \psi}{\partial t} \right) d\tau =$$

$$\hat{H}\psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} \qquad \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar}\hat{H}\psi = -\frac{i}{\hbar}\hat{H}\psi$$

$$\frac{\partial \psi^*}{\partial t} = \frac{i}{\hbar}\left(\hat{H}\psi\right)^*$$

$$\frac{d}{dt}\overline{F} = \int\left[\frac{i}{\hbar}\left(\hat{H}\psi\right)^{*}\hat{F}\psi + \psi^{*}\frac{\partial\hat{F}}{\partial t}\psi + \left(-\frac{i}{\hbar}\right)\psi^{*}\hat{F}\hat{H}\psi\right]d\tau$$

$$\int\left(\hat{H}\psi\right)^{*}\left(\hat{F}\psi\right)d\tau = \int\psi^{*}\hat{H}\,\hat{F}\psi\,d\tau$$

$$\frac{d}{dt} < F > = \int\psi^{*}\left[\frac{i}{\hbar}\hat{H}\hat{F} + \frac{\partial\hat{F}}{\partial t} - \frac{i}{\hbar}\hat{F}\hat{H}\right]\psi d\tau =$$

$$= \int\psi^{*}\left\{\frac{\partial\hat{F}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar}\left[\hat{H}\ \hat{F}\right]\right\}\psi d\tau = \left\langle\frac{dF}{dt}\right\rangle$$

$$\left\langle\frac{dF}{dt}\right\rangle = \frac{d}{dt} < F >$$

Оператор похідної:

$$\dot{\hat{F}} \equiv \frac{d\hat{F}}{dt} = \frac{\partial \hat{F}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar}[\hat{H}, \hat{F}]$$

закон збереження:

$$< F >= \text{const}, \quad \frac{d}{dt} < F >= 0 \Leftarrow \begin{cases} \frac{\partial \hat{F}}{\partial t} = 0 \\ [\hat{H}, \hat{F}] = 0 \end{cases}$$

Явний вигляд, власні функції і власні значення операторів координати, імпульсу, проекції моменту імпульсу та квадрата моменту імпульсу.

Жозе́ф-Луї́ Лагра́нж

Адріє́н-Марі́ Лежа́ндр

Принцип відповідності: співвідношення між операторами мають бути аналогічні співвідношенням між фізичними величинами у класичній фізиці

1) оператор часу

$$\hat{t} \equiv t$$

спектр неперервний

2) оператор координати (радіус-вектора)

$$|\psi(\vec{r})|^2$$

густина ймовірності знаходження частинки

$$<\vec{r}> = \int \vec{r}\,|\psi(\vec{r})|^2\, dV = \int \psi^* \underbrace{\vec{r}}_{=\hat{\vec{r}}} \psi\, dV$$

$$\hat{x} = x$$

$$\hat{r} = \vec{r} \qquad \hat{y} = y$$

$$\hat{z} = z$$

орти

$$\vec{r} = x\vec{i} + y\vec{j} + z\vec{k}$$

$$\hat{r} = \hat{x}\vec{i} + \hat{y}\vec{j} + \hat{z}\vec{k}$$

$\hat{x} = x$

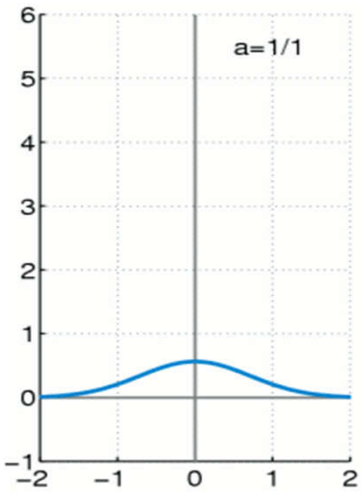
власне знач

$$\hat{x}\psi_{x_n} = x\cdot\psi_{x_n} = x_n\,\psi_{x_n}$$

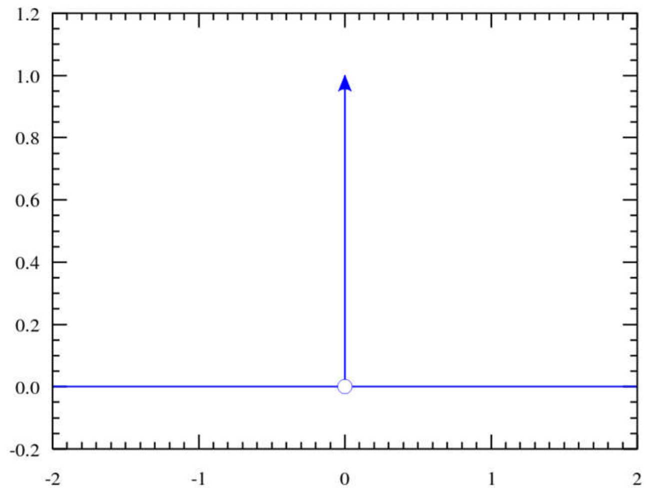
власна ф-я

$$\psi_{x_n} = \delta(x - x_n) = \begin{cases} 0, & x \neq x_n \\ \infty, & x = x_n \end{cases}$$

δ-функція Дірака



$$\delta(x) = \lim_{a\to 0}\frac{1}{a\sqrt{\pi}}e^{-x^2/a^2}$$



$$\hat{x}\,\psi_{x_n} = x\,\psi_{x_n} = x_n\,\psi_{x_n}$$

спектр неперервний

умова нормування

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*_{x_n} \psi_{x_m} dx = \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x - x_n)\delta(x - x_m) dx = \delta(x_m - x_n)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\,\delta(x - \tilde{x})dx = f(\tilde{x})$$

$$\psi_{\vec{r}_n} = \delta(\vec{r} - \vec{r}_n)$$

3) оператор енергії

➢*повної*

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U(\vec{r})$$

➢*кінетичної*

$$\hat{K} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta$$

оператор Лапласа

➢*потенціальної*

$$U = U(\vec{r})$$

4) оператор імпульсу

$$K = \frac{1}{2} m \upsilon^2 = \frac{p^2}{2m}$$

$$\hat{\mathrm{K}} = -\frac{\hbar^2}{2\mathrm{m}} \Delta$$

$\vec{p} = m\vec{\vartheta}$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta = \frac{\hat{p} \cdot \hat{p}}{2m}$$

$\hat{p} \cdot \hat{p} = \hat{p}^2$

$\vec{\nabla} = \frac{\partial}{\partial x}\vec{i} + \frac{\partial}{\partial y}\vec{j} + \frac{\partial}{\partial z}\vec{k}$

$$\hat{p} = -i\hbar \vec{\nabla}$$

$$\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \qquad \hat{p}_y = -i\hbar \frac{\partial}{\partial y} \qquad \hat{p}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial z}$$

$$\hat{p}_x \Psi_{p_x} = p_x \Psi_{p_x}$$

$$-i\hbar \frac{\partial \Psi_{p_x}}{\partial x} = p_x \Psi_{p_x}$$

$$\int \frac{d\Psi_{p_x}}{\Psi_{p_x}} = \int \frac{p_x}{-i\hbar} dx = i \frac{p_x}{\hbar} \int dx$$

$$\ln \Psi_{p_x} = i \frac{p_x}{\hbar} x + C'$$

$$\Psi_{p_x} = C \exp\left(\frac{i}{\hbar} p_x x \right) = \Psi_{p_x}(x)$$

спектр неперервний, p_x має бути дійсним

умова нормування

$$\psi_{p_x} = C \exp\left(\frac{i}{\hbar} p_x x\right)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*_{p_x} \psi_{p_x} dx = \int_{-\infty}^{\infty} C^* \exp\left(-\frac{i}{\hbar} p_x x\right) C \exp\left(\frac{i}{\hbar} p_x x\right) dx =$$

$$= |C|^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx \to \infty \neq 1$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*_{p_{x1}} \psi_{p_{x2}} dx = \delta\left(p_{x1} - p_{x2}\right)$$

умова нормування

$$2\pi\hbar|C|^2 = 1$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \exp[i\alpha(x-\tilde{x})]d\alpha = 2\pi\cdot\delta(x-\tilde{x})$$

$$\delta(bx) = \frac{\delta(x)}{b}$$

$$\psi_{p_x} = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\exp\left(\frac{i}{\hbar}p_x x\right)$$

$$-i\hbar\vec{\nabla}\Psi_{\vec{p}} = \vec{p}\Psi_{\vec{p}}$$

$$-i\hbar\left(\frac{\partial\Psi_{\vec{p}}}{\partial x}\vec{i} + \frac{\partial\Psi_{\vec{p}}}{\partial y}\vec{j} + \frac{\partial\Psi_{\vec{p}}}{\partial z}\vec{k}\right) = (p_x\vec{i} + p_y\vec{j} + p_z\vec{k})\Psi_{\vec{p}}$$

$$-i\hbar\frac{\partial\Psi_{\vec{p}}}{\partial x} = p_x\Psi_{\vec{p}}\ldots \qquad -i\hbar\frac{\partial\Psi_{\vec{p}}}{\partial y} = p_y\Psi_{\vec{p}} \qquad -i\hbar\frac{\partial\Psi_{\vec{p}}}{\partial z} = p_z\Psi_{\vec{p}}$$

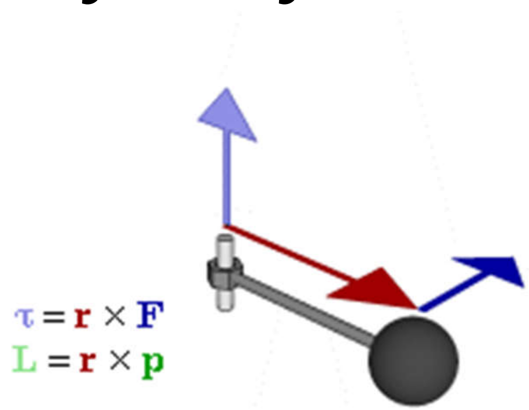
$$\left[\hat{p}_i, \hat{p}\right] = 0 \qquad \left[\hat{p}_i, \hat{p}_j\right] = 0$$

$$\Psi_{\vec{p}} = \Psi_{p_x}\cdot\Psi_{p_y}\cdot\Psi_{p_z} =$$

$$= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\exp\left(\frac{i}{\hbar}(p_x x + p_y y + p_z z)\right) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\exp\left(\frac{i}{\hbar}\vec{p}\vec{r}\right)$$

5) оператор моменту імпульсу

$$\vec{L} = [\vec{r}, \vec{p}] = \begin{vmatrix} \vec{i} & \vec{j} & \vec{k} \\ x & y & z \\ p_x & p_y & p_z \end{vmatrix}$$



$$\hat{L} = [\hat{r}, \hat{p}] = -i\hbar[\vec{r}, \vec{\nabla}] = -i\hbar \begin{vmatrix} \vec{i} & \vec{j} & \vec{k} \\ x & y & z \\ \dfrac{\partial}{\partial x} & \dfrac{\partial}{\partial y} & \dfrac{\partial}{\partial z} \end{vmatrix}$$

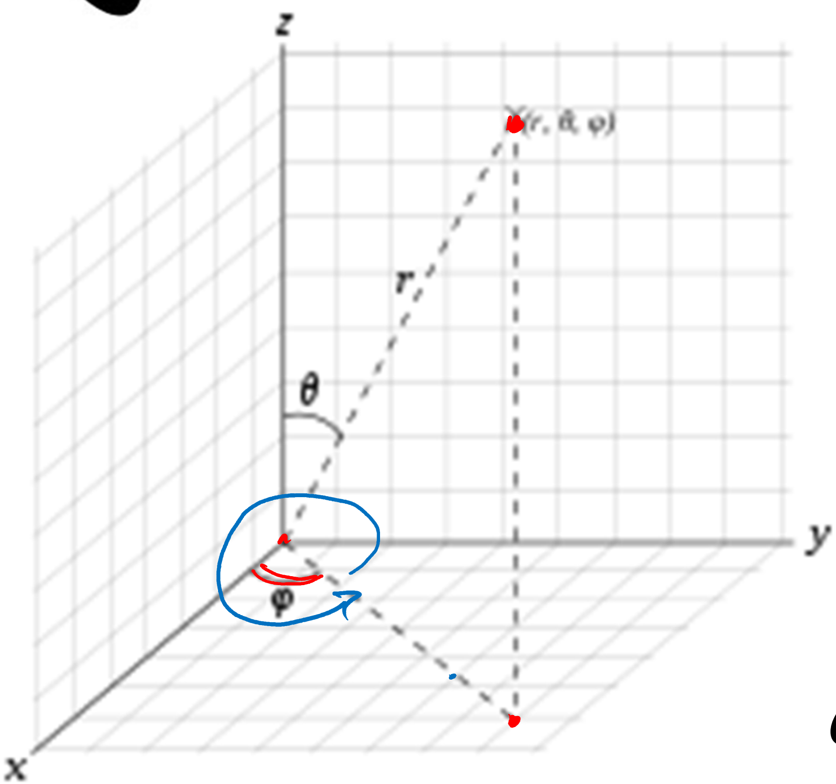
$$\hat{L} = -i\hbar \begin{vmatrix} \vec{i} & \vec{j} & \vec{k} \\ x & y & z \\ \dfrac{\partial}{\partial x} & \dfrac{\partial}{\partial y} & \dfrac{\partial}{\partial z} \end{vmatrix}$$

$$\hat{L}_x = -i\hbar\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y} \right)$$

$$\hat{L}_y = -i\hbar\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z} \right)$$

$$\hat{L}_z = -i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x} \right)$$

сферична система координат



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

$$r \in [0,\infty), \quad \varphi \in [0, 2\pi],$$
$$\theta \in [0,\pi]$$

$$d\tau = dV = r^2 dr\,\sin\theta\, d\theta\, d\varphi$$

$dV = dx \cdot dy \cdot dz$

$$\begin{cases} r = \sqrt{x^2+y^2+z^2}, \\ \theta = \arccos\dfrac{z}{\sqrt{x^2+y^2+z^2}} = \mathrm{arctg}\dfrac{\sqrt{x^2+y^2}}{z}, \\ \varphi = \mathrm{arctg}\dfrac{y}{x}. \end{cases}$$

$$\hat{L}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}$$

вл. знач.

$$-i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial\varphi} = L_z\psi \qquad \psi = C\exp\left(\frac{i}{\hbar}L_z\varphi\right)$$

однозначність хвильової функції !!!

$$\psi(\varphi+2\pi)=\psi(\varphi)$$

$$\cancel{C}\exp\left(\frac{i}{\hbar}L_z(\varphi+2\pi)\right)=\cancel{C}\exp\left(\frac{i}{\hbar}L_z\varphi\right)$$

$$\exp\left(\frac{i}{\hbar}L_z 2\pi\right)=1=\cos\left(\frac{2\pi L_z}{\hbar}\right)+i\sin\left(\frac{2\pi L_z}{\hbar}\right)$$

$$\frac{2\pi L_z}{\hbar}=2\pi m, \quad m=0,\pm 1,\pm 2\ldots$$

$$L_z = m\hbar$$

$$\hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}$$

$$\psi = C \exp(im\varphi)$$

$$\int_0^{2\pi} |\psi|^2 d\varphi = \int_0^{2\pi} |C|^2 d\varphi = |C|^2 2\pi = 1$$

$$C = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}$$

$L_z = m\hbar$

$$\underbrace{\psi_m = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(i\, m\, \varphi)}$$

m – магнітне квантове число

6) оператор квадрату моменту імпульсу

$$\hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2$$

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2 \left\{ \frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} \right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} \right\}$$

вл. знач

$$-\hbar^2 \left\{ \frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left(\sin\theta \frac{\partial\psi}{\partial\theta} \right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2\psi}{\partial\varphi^2} \right\} = L^2\psi$$

вл. ф-я $\psi = \psi(\theta, \varphi)$

$$L^2 = \hbar^2 l(l+1) \qquad L = \hbar\sqrt{l(l+1)}$$

l – орбітальне (азимутальне) квантове число,

l=0,1,2…

сферичні функції:

!

$$\psi_L(\theta,\varphi) \equiv Y_{lm}(\theta,\varphi) =$$

факторіал

$$= (-1)^{\frac{m+|m|}{2}} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \cdot \exp(im\varphi) \cdot \sqrt{\frac{(2l+1)}{2}\frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}} \cdot P_l^m(\cos\theta)$$

m=0, ±1, ±2… ±l

$$\psi_L(\theta,\varphi) \equiv \mathrm{Y}_{lm}(\theta,\varphi) =$$

$$= (-1)^{\frac{m+|m|}{2}} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \cdot \exp(im\varphi) \cdot \sqrt{\frac{(2l+1)}{2} \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}} \cdot P_l^m(\cos\theta)$$

приєднані поліноми Лежандра:

$$P_l^m(\cos\theta) = (1-\cos^2\theta)^{\frac{|m|}{2}} \frac{d^{|m|}}{d(\cos\theta)^{|m|}} \cdot P_l(\cos\theta)$$

поліноми Лежандра:

$$P_l(\cos\theta) = \frac{1}{2^l l!} \cdot \frac{d^l}{d(\cos\theta)^l} \left[(\cos^2\theta - 1)^l \right]$$

$$Y_{\underset{\ell=\;m}{00}} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}; \qquad Y_{\underset{\ell=\;m}{10}} = \underbrace{\sqrt{\frac{3}{4\pi}}}\cos\underline{\theta}; \qquad Y_{\underset{\ell=\;m}{1,\pm1}} = \mp\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\underline{\theta}\,\exp(\pm i\underline{\varphi})$$

$$Y_{20} = \sqrt{\frac{5}{16\pi}}\left(3\cos^2\theta - 1\right); \quad Y_{2,\pm1} = \mp\sqrt{\frac{15}{8\pi}}\sin\theta\cos\theta\,\exp(\pm i\varphi)$$

$$Y_{2,\pm2} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}}\sin^2\theta\,\exp(\pm 2i\varphi).$$

сферичні функції:

$$\psi_L(\theta,\varphi) \equiv Y_{lm}(\theta,\varphi) = (-1)^{\frac{m+|m|}{2}} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(im\varphi) \cdot \sqrt{\frac{(2l+1)}{2} \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}} \cdot P_l^m(\cos\theta)$$

- ортонормовані

$$\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi} Y_{lm} Y_{lm}^* \sin\theta\, d\theta\, d\varphi = 1$$

- є власними оператора L_z

$$\hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial\varphi}$$

$$Y_{lm} = f(\theta) \cdot (2\pi)^{-1/2} e^{im\varphi}$$

$$L_z = m\hbar$$

$$\hat{L}_z Y_{lm} = \hat{L}_z (f(\theta) \cdot (2\pi)^{-1/2} e^{im\varphi}) = f(\theta) \hat{L}_z ((2\pi)^{-1/2} e^{im\varphi}) =$$

$$= f(\theta) L_z (2\pi)^{-1/2} e^{im\varphi} = L_z Y_{lm}$$

$$[\hat{L}^2, \hat{L}_z] = 0$$

$m = 0, \pm 1, \pm 2 \ldots \pm l$

$L^2 = \hbar^2\, l(l+1)$

спектр L^2 – вироджений

$$L = \hbar\sqrt{l(l+1)}$$

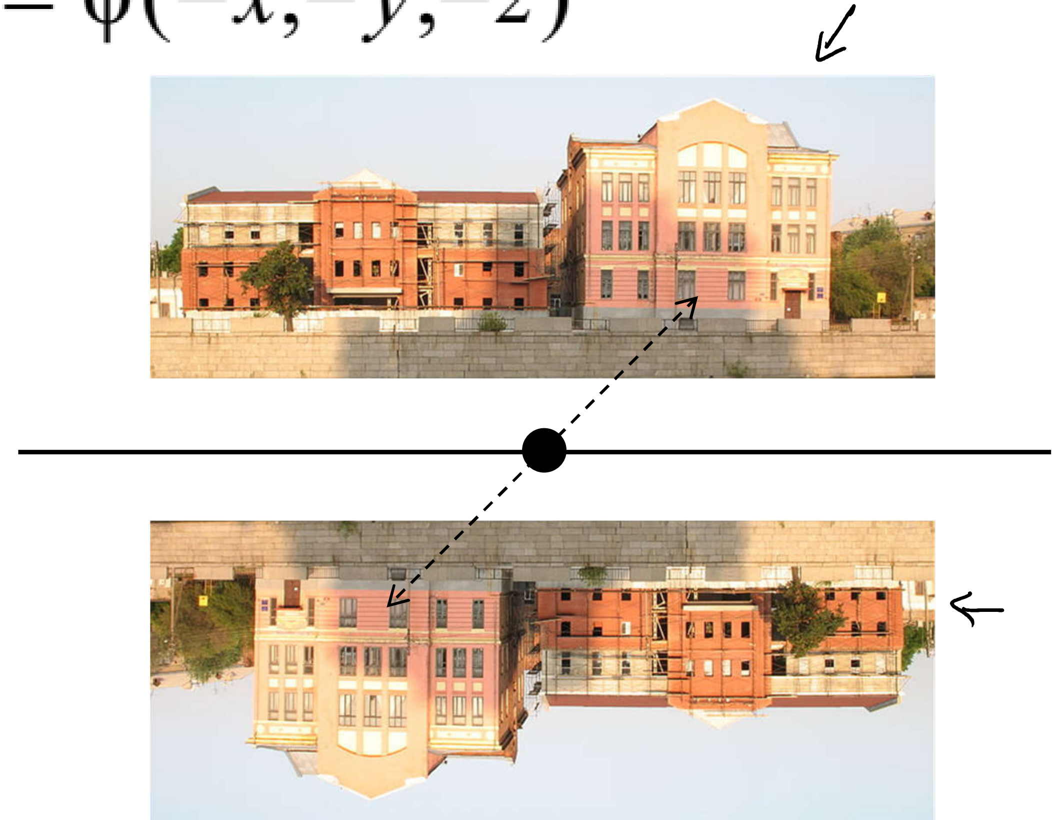
(кратність (2l+1))

Парність стану

оператор інверсії

$$\hat{P}\,\psi(\vec{r}) = \psi(-\vec{r})$$

$$\hat{P}\,\psi(x, y, z) = \psi(-x, -y, -z)$$



оператор інверсії

$$\hat{P}\psi(x,y,z)=\psi(-x,-y,-z)$$

квадрат оператора інверсії – одиничний оператор

$$\hat{P}\psi(-x,-y,-z)=\hat{P}^2\psi(x,y,z)=\psi(x,y,z)$$

$$\hat{P}^2=1$$

оператор інверсії, власні значення

?

$$\hat{P}\psi(x,y,z) = P\psi(x,y,z)$$

$$\hat{P}\hat{P}\psi(x,y,z) = \hat{P}P\psi(x,y,z),$$

$$\hat{P}^2\psi(x,y,z) = P\hat{P}\psi(x,y,z),$$

$$\hat{P}^2\underline{\psi(x,y,z) = PP}\psi(x,y,z),$$

$$\psi(x,y,\underline{z) = P^2}\psi(x,y,z).$$

$$P^2 = 1$$

$$P = \pm 1$$

$$\hat{P}\psi = \pm\psi$$

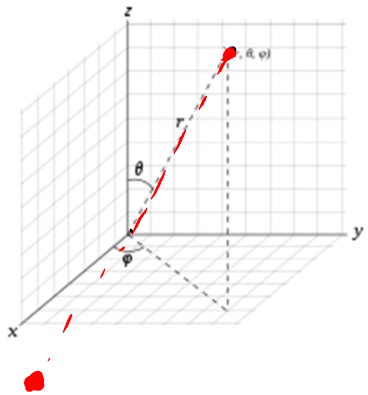
парний стан

$$\hat{P}\psi^{+}(x,y,z)=+\psi^{+}(x,y,z)=\psi^{+}(-x,-y,-z)$$

непарний стан

$$\hat{P}\psi^{-}(x,y,z)=-\psi^{-}(x,y,z)=\psi^{-}(-x,-y,-z)$$

$$[\hat{H},\hat{P}]=0 \qquad \frac{\partial \hat{P}}{\partial t}=0$$



для ССК при інверсії

$$\theta \to (\pi - \theta)$$

$$\varphi \to (\varphi + \pi)$$

$$\hat{P}\,Y_{lm}(\theta,\varphi) = (-1)^l\,Y_{lm}(\theta,\varphi)$$

$$(-1)^l = \begin{cases} 1, & l=0,2,4 \\ -1, & l=1,3,5\ldots \end{cases}$$

дипольні переходи $\qquad \Delta l = \pm 1$

Співвідношення невизначеностей Гайзенберга. Квантовий мікроансамбль. Принцип доповнювальності Бора.

Ве́рнер Карл Гайзенберґ

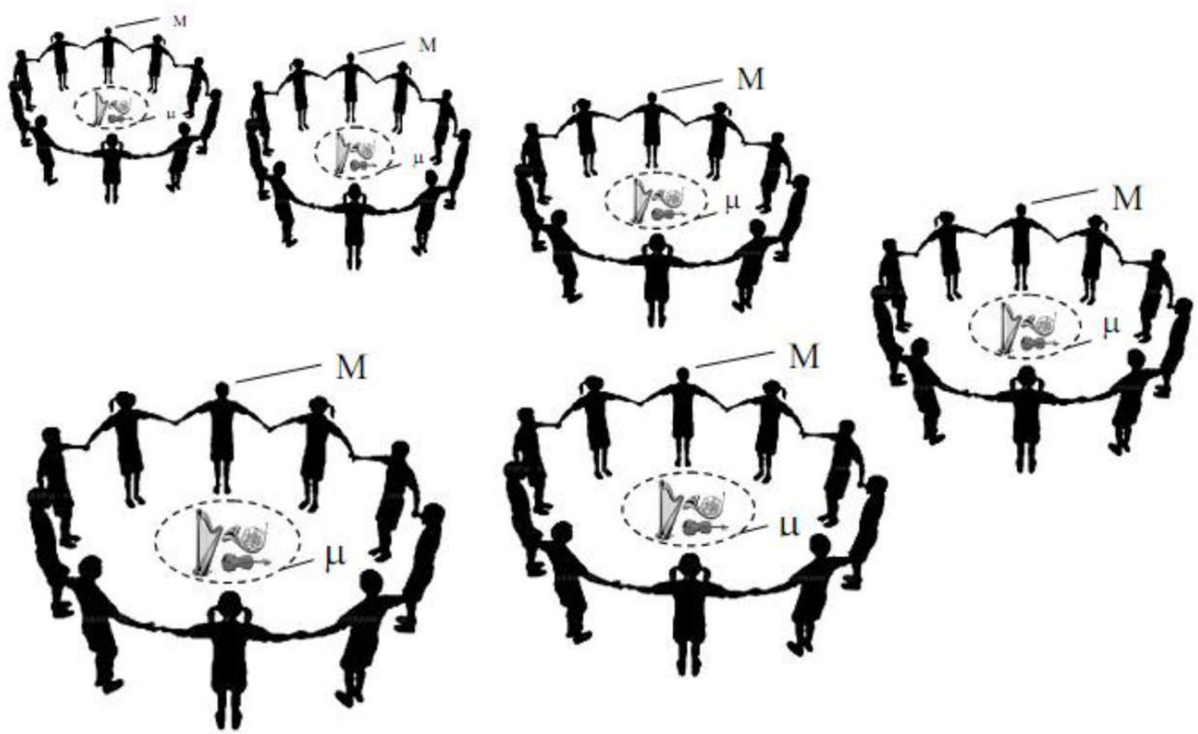
$$\psi = \sum_n c_n \psi_n$$

$$\hat{F}$$

$$\hat{F}\psi \Rightarrow f_k, \psi_k$$

редукція хвильової функції

Ансамбль мікрочастинок (мікроансамбль*)* *сукупність тотожних мікросистем (μ), які знаходяться в одному і тому ж макрооточенні (М)*



одночасне вимірювання проекції імпульсу p_x та координати *x* частинки

$$[\hat{p}_x, \hat{x}] = -i\hbar$$

ці два оператори не мають спільної системи власних функцій

$$[\hat{x}\,\hat{p}_x]\psi = x(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\psi) - (-i\hbar\frac{\partial}{\partial x})(x\psi) = -i\hbar x\frac{\partial\psi}{\partial x} + i\hbar(\frac{\partial x}{\partial x}\psi + x\frac{\partial\psi}{\partial x}) = i\hbar\psi$$

розкид вимірювань $\{x_i\}, \{p_{x_i}\}, \quad i = \overline{1, N}$

середні значення $\overline{p_x} = \dfrac{\sum\limits_{i=1}^{N} p_{x_i}}{N}$ $\qquad \overline{x} = \dfrac{\sum\limits_{i=1}^{N} x_i}{N}$

відхилення і-го результату

$$\Delta p_{x_i} = p_{x_i} - \overline{p_x} \qquad \Delta x_i = x_i - \overline{x}$$

вибіркові дисперсії

$$\overline{(\Delta p_{x_i})^2} = \frac{\sum_{i=1}^{N}\left(p_{x_i} - \overline{p_x}\right)^2}{N} \qquad \overline{(\Delta x)^2} = \frac{\sum_{i=1}^{N}\left(x_i - \overline{x}\right)^2}{N}$$

оператор відхилення

$$\hat{\Delta} p_x = \hat{p}_x - \overline{p_x} \qquad \hat{\Delta} x = \hat{x} - \overline{x}$$

$$\overline{(\Delta p_x)^2} = \overline{(\hat{\Delta} p_x \cdot \hat{\Delta} p_x)} \qquad \overline{(\Delta x)^2} = \overline{(\hat{\Delta} x \cdot \hat{\Delta} x)}$$

ψ

$$[\hat{F},\hat{G}] = i\hat{M} \quad \Leftrightarrow \quad \overline{(\Delta F)^2}\cdot\overline{(\Delta G)^2} \geq \frac{1}{4}\overline{M^2}$$

$$[\hat{p}_x, \hat{x}] = -i\hbar$$

$\hat{M} = -\hbar$

$$\overline{M} = -\hbar \qquad \overline{M^2} = \hbar^2$$

$$\overline{(\Delta x)^2}\cdot\overline{(\Delta p_x)^2} \geq \frac{\hbar^2}{4}$$

$$\overline{(\Delta x)^2} \cdot \overline{(\Delta p_x)^2} \geq \frac{\hbar^2}{4}$$

невизначеність координати мікрочастинки

$$\Delta x = \sqrt{\overline{(\Delta x)^2}}$$

невизначеність проекції імпульсу мікрочастинки

$$\Delta p_x = \sqrt{\overline{(\Delta p_x)^2}}$$

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}$$

1927

Гайзенберг.

$$\Delta p_x \cdot \Delta x \sim \hbar$$

розподіл Гауса

$$f(w) = \frac{1}{\sigma_w \sqrt{2\pi}} \cdot \exp\left(-\frac{(w - w_0)}{2\sigma_w^2} \right)$$

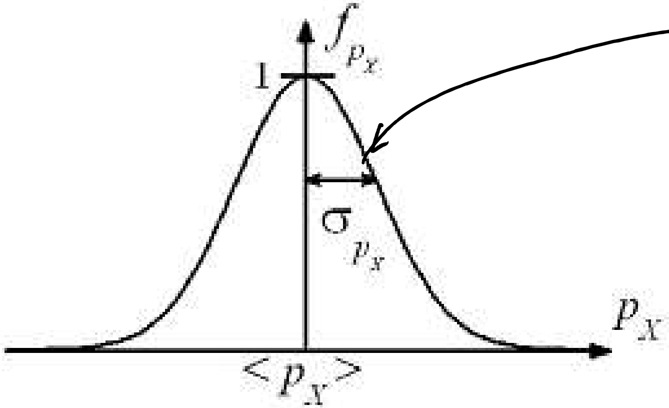
f - густина імовірності спостереження значення w

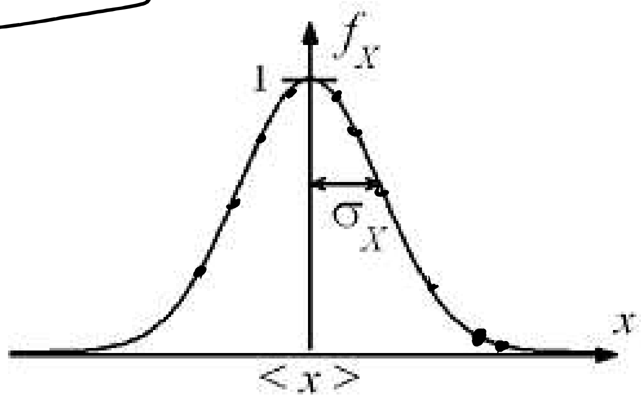
w_0 - найбільш імовірне значення

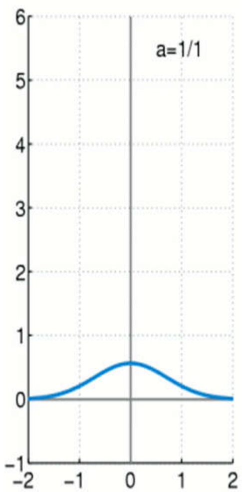
$$\sigma_w^2 = \lim_{N\to\infty} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} (w_i - w_0)^2$$ *генеральна дисперсія*

$$P_{[w_1, w_2]} = \int_{w_1}^{w_2} f(w)dw = \mathrm{erf}\left(\frac{w_2 - w_0}{\sigma_w \sqrt{2}} \right) - \mathrm{erf}\left(\frac{w_1 - w_0}{\sigma_w \sqrt{2}} \right)$$

$$\Delta x \approx \sigma_x \qquad \Delta p_x \approx \sigma_{p_x}$$







$$\delta(x) = \lim_{a \to 0} \frac{1}{a\sqrt{\pi}} e^{-x^2/a^2}$$

$$\Delta p_x \to 0 \quad \Leftrightarrow \quad \Delta x \to \infty$$

$$\Delta E \cdot \Delta t \sim \hbar$$

Невизначеність *енергії - різниця значень енергії при двох послідовних вимірюваннях*

$$\Delta E = | E_2 - E_1 |$$

$$\Delta t \leq T \qquad \Delta E \cdot T \sim \hbar$$

час життя

ширина рівня $$\Gamma = \hbar / T$$

Квантовий мікроансамбль - *ансамбль мікрочастинок, для якого виконуються співвідношення невизначеностей*

$$\Delta p_x \cdot \Delta x \sim \hbar$$

$$\Delta p_y \cdot \Delta y \sim \hbar$$

$$\Delta p_z \cdot \Delta z \sim \hbar$$

$$\Delta E \cdot \Delta t \sim \hbar$$

$$[\hat{H}, \hat{p}] = 0 \qquad [\hat{x}, \hat{t}] = 0$$

$$[\hat{H}, \hat{L}^2] = 0$$

$$[\hat{H}, \hat{L}_z] = 0$$

динамічні змінні

імпульсно-енергетичні

(p, E, L^2, L_z)

хвильові в-ті

просторово-часові

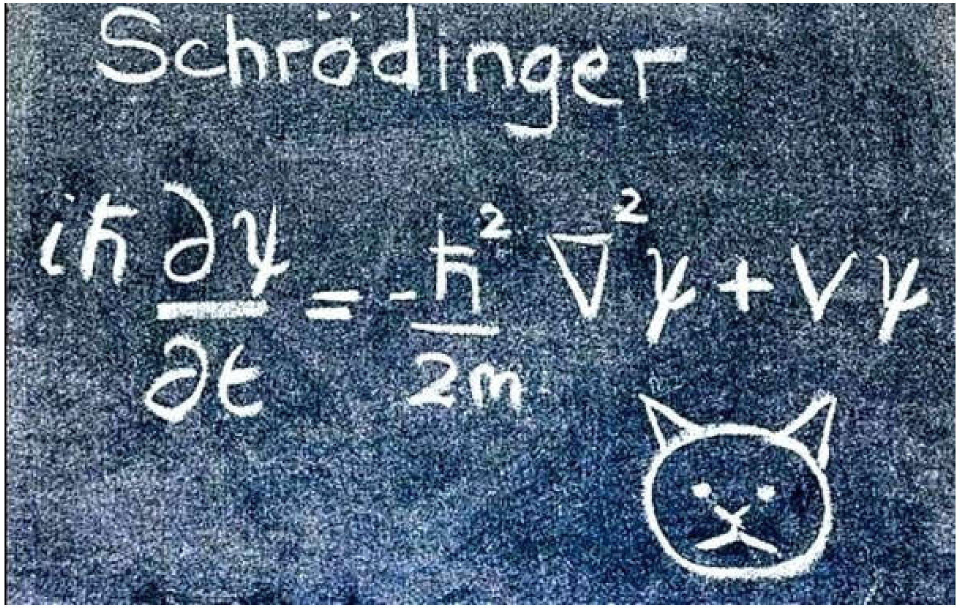
(x, t)

корпускулярні

<u>принцип доповнювальності Бора:</u>

імпульсно-енергетичні та просторо-часові фізичні величини утворюють дві групи динамічних змінних, які взаємно доповнюють одна одну. Не існує квантових ансамблів, в яких імпульсно-енергетичні та просторо-часові динамічні змінні могли одночасно вимірюватися без дисперсії.

Частинка у центральному полі сил.
Радіальна і кутова частини рівняння Шрьодинґера



центрально-симетричне поле (ЦСП) - *потенціальне поле, яке має силовий центр і потенціал якого визначається тільки відстанню вибраної точки від силового центру*

$U(r) = -e\varphi(r)$

$$U(\vec{r}) = U(|\vec{r}|) = U(r)$$

стаціонарне поле

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_0}\Delta + U(r)\right]\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r})$$

ССК

$$\Delta(r,\theta,\varphi)=\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}(r^2\frac{\partial}{\partial r})+\frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta})+\frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}$$

$$\hat{L}^2=-\hbar^2\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]$$

$$\Delta(r,\theta,\varphi)=\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}(r^2\frac{\partial}{\partial r})-\frac{\hat{L}^2}{\hbar^2 r^2}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0}\left[\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}(r^2\frac{\partial\psi}{\partial r})-\frac{\hat{L}^2\psi}{\hbar^2 r^2}\right]+U(r)\psi=E\psi$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_0}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}(r^2\frac{\partial}{\partial r})+U(r)+\frac{\hat{L}^2(\theta,\varphi)}{2m_0r^2}\right]\psi=E\psi$$

$$\hat{Q}(r)=-\frac{\hbar^2}{2m_0}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}(r^2\frac{\partial}{\partial r})+U(r)$$

$$[\hat{H},\hat{L}^2]\psi = \left[\left\{\hat{Q}(r) + \frac{\hat{L}^2(\theta,\varphi)}{2m_0r^2}\right\},\hat{L}^2\right]\psi =$$

$$= (\hat{Q} + \frac{\hat{L}^2}{2m_0r^2})\hat{L}^2\psi - \hat{L}^2(\hat{Q} + \frac{\hat{L}^2}{2m_0r^2})\psi = \hat{Q}\hat{L}^2\psi + \cancel{\frac{\hat{L}^4\psi}{2m_0r^2}} - \hat{L}^2\hat{Q}\psi - \cancel{\frac{\hat{L}^4\psi}{2m_0r^2}}$$

$$[\hat{H},\hat{L}^2]\psi = \hat{Q}\hat{L}^2\psi - \hat{L}^2\hat{Q}\psi$$

$$[\hat{H},\hat{L}^2]\psi = 0$$

$$\hat{L}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi} \qquad [\hat{H},\hat{L}_z]\psi = 0$$

1) у ЦСП L^2 та L_z зберігаються

2) $\hat{H}\, Y_{lm_l}(\theta,\varphi) = E\, Y_{lm_l}(\theta,\varphi)$

$[\hat{H}, \hat{L}^2] = 0$

$$\psi(r,\theta,\varphi) = R(r)\cdot Y_{lm_l}(\theta,\varphi)$$

радіальна ***кутова***

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}(r^2\frac{\partial(R(r)\Upsilon(\theta,\varphi))}{\partial r})+\frac{\hat{L}^2 R(r)\Upsilon(\theta,\varphi)}{2m_0 r^2}+$$

$$+U(r)R(r)\Upsilon(\theta,\varphi)=ER(r)\Upsilon(\theta,\varphi)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0}\Upsilon(\theta,\varphi)\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}(r^2\frac{\partial R(r)}{\partial r})+R(r)\frac{\hat{L}^2\Upsilon(\theta,\varphi)}{2m_0 r^2}+$$

$$+U(r)R(r)\Upsilon(\theta,\varphi)=ER(r)\Upsilon(\theta,\varphi)$$

$$-\frac{r^2}{R(r)\Upsilon(\theta,\varphi)}$$

$$-\frac{\cancel{r}^2}{R(r)\mathrm{Y}(\theta,\varphi)} \times \quad -\frac{\hbar^2}{2m_0}\mathrm{Y}(\theta,\varphi)\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial R(r)}{\partial r}\right)+R(r)\frac{\hat{L}^2\mathrm{Y}(\theta,\varphi)}{2m_0\cancel{r}^2}+$$

$$+U(r)R(r)\mathrm{Y}(\theta,\varphi)=ER(r)\mathrm{Y}(\theta,\varphi)$$

$$\frac{\hbar^2}{2m_0}\frac{1}{R(r)}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial R(r)}{\partial r}\right)-\frac{\hat{L}^2\mathrm{Y}(\theta,\varphi)}{2m_0\mathrm{Y}(\theta,\varphi)}-U(r)r^2=-Er^2$$

$$\frac{\hbar^2}{2m_0}\frac{1}{R(r)}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial R(r)}{\partial r}\right)+\left[E-U(r)\right]r^2=\frac{\hat{L}^2\mathrm{Y}(\theta,\varphi)}{2m_0\mathrm{Y}(\theta,\varphi)}$$

"$f(r)$ "$f(\theta,\varphi)$

$$\begin{cases} \dfrac{\hbar^2}{2m_0}\dfrac{1}{R(r)}\dfrac{\partial}{\partial r}\left(r^2\dfrac{\partial R(r)}{\partial r}\right)+[E-U(r)]r^2 = C \\ \dfrac{\hat{L}^2 Y(\theta,\varphi)}{2m_0 Y(\theta,\varphi)} = C \end{cases}$$

$$\hat{L}^2 Y(\theta,\varphi) = 2m_0 C\, Y(\theta,\varphi)$$

$$2m_0 C = L^2$$

$$L^2 = \hbar^2 l(l+1) = 2m_0 C$$

$$C = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m_0}$$

$$\frac{\hbar^2}{2m_0}\cdot\frac{1}{R(r)}\cdot\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial R(r)}{\partial r}\right)+\left[E-U(r)\right]r^2-\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m_0}=0$$

$$\frac{\hbar^2}{2m_0}\cdot\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial R(r)}{\partial r}\right)+\left[E-U\right]r^2R(r)-\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m_0}R(r)=0$$

рівняння для радіальної частини хвильової функції

$l = 0, 1, 2, \ldots$ $\qquad$ $E \equiv E(l)$ $\qquad$ $R(r) \equiv R_l(r)$

R(r), Eₗ

2l+1

m = 0, ±1, ±..., ±l

l	$=$	0	1	2	3	4	5...
		s	p	d	f	g	h...

$m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots, \pm l$ $\qquad$ $\psi(r,\theta,\varphi) = R(r)Y_{lm_l}(\theta,\varphi)$

$$\frac{\hbar^2}{2m_0}\cdot\frac{\partial}{\partial r}(r^2\frac{\partial R(r)}{\partial r})+[E-U]r^2R(r)-\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m_0}R(r)=0$$

$$\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR(r)}{dr}\right)=2r\frac{dR}{dr}+r^2\frac{d^2R}{dr^2}$$

$$\frac{2m_0}{\hbar^2 r^2}\times$$

$$\frac{d^2R(r)}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{dR(r)}{dr}+\frac{2m_0}{\hbar^2}[E-U(r)]R(r)-\frac{l(l+1)}{r^2}R(r)=0$$

$$\frac{d^2R(r)}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{dR(r)}{dr}+\frac{2m_0}{\hbar^2}\left[E-U(r)\right]R(r)-\frac{l(l+1)}{r^2}R(r)=0$$

$$R(r)=\frac{\xi(r)}{r}=\xi(r)r^{-1}$$

$$R'(r)=\xi'(r)r^{-1}-\xi(r)r^{-2}$$

$$R''(r)=\xi(r)''r^{-1}-\xi'(r)r^{-2}-\xi'(r)r^{-2}+2\xi(r)r^{-3}$$

$$R''(r)=\xi''(r)r^{-1}-2\xi'(r)r^{-2}+2\xi(r)r^{-3}$$

$$\xi''(r)r^{-1}-2\xi'(r)r^{-2}+2\xi(r)r^{-3}+2r^{-1}\left[\xi'(r)r^{-1}-\xi(r)r^{-2}\right]+$$

$$+\frac{2m_0}{\hbar^2}\left[E-U(r)\right]\xi(r)r^{-1}-l(l+1)\xi(r)r^{-3}=0$$

$$\xi''(r)r^{-1} - 2\xi'(r)r^{-2} + 2\xi(r)r^{-3} + 2r^{-1}[\xi'(r)r^{-1} - \xi(r)r^{-2}] +$$
$$+\frac{2m_0}{\hbar^2}[E - U(r)]\xi(r)r^{-1} - l(l+1)\xi(r)r^{-3} = 0$$

$$\frac{d^2\xi}{dr^2} + \frac{2m_0}{\hbar^2}\left[E - \left\{U(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m_0 r^2}\right\}\right]\xi(r) = 0$$

$$U_{eff}(r) = U(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m_0 r^2}$$

ефективна енергія частинки у ЦСП

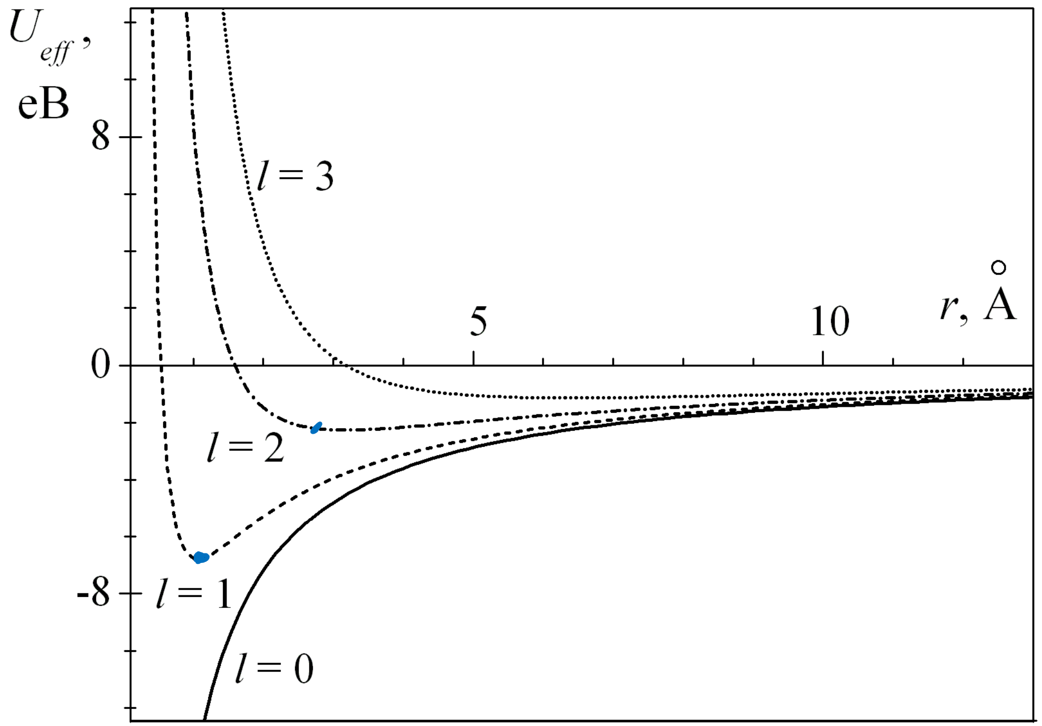
відцентрова енергія

$$U_{eff}(r) = U(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m_0 r^2}$$

$$U(r) = -\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r}$$

$l = 0$

$$r_{\min} = \frac{4\pi\varepsilon_0 \hbar^2 l(l+1)}{Ze^2 m_0}$$



малі відстані від силового центру

$r \to 0$

$$\frac{d^2\xi}{dr^2} + \frac{2m_0}{\hbar^2}\left[E - \left\{U(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m_0 r^2}\right\}\right]\xi(r) = 0$$

$$\lim_{r\to 0}\left(r^2 U(r)\right) = 0 \qquad U(r) = -\frac{\alpha}{r^n} \qquad n < 2$$

$$r \to 0 \qquad \frac{d^2\xi}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{r^2}\xi(r) = 0$$

малі відстані від силового центру

$$\frac{d^2\xi}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{r^2}\xi(r) = 0$$

$$\xi(r) = ar^y$$?

$$\xi''(r) = y(y-1)a\,r^{y-2}$$

$$ay(y-1)r^{y-2} - l(l+1)ar^y r^{-2} = 0$$

$$y(y-1) - l(l+1) = 0$$

$l \geq 0$

$r \to 0$

$$y_1 = -l \qquad y_2 = l+1$$

малі відстані від силового центру

$$\xi(r) = ar^{y} \qquad y_2 = l + 1$$

$\xi(r) = a r^{l+1}$

$$R(r) = \frac{\xi(r)}{r} = \frac{ar^{l+1}}{r} = ar^{l}$$

$$r \to 0 \qquad R(r) \to 0$$

$$R(r) = ar^{l}$$

умови нормування хвильової функції

$$\int_{\tau} |\psi(r,\theta,\varphi)|^2 d\tau = 1$$

$$\psi(r,\theta,\varphi) = R(r)Y_{lm_l}(\theta,\varphi) \qquad d\tau = r^2 dr \sin\theta d\theta d\varphi$$

$$dP(r,\theta,\varphi) = |\psi|^2 dV = |R(r)|^2 |Y_{lm_l}(\theta,\varphi)|^2 r^2 dr \sin\theta\, d\theta\, d\varphi$$

умови нормування хвильової функції

$$\int_{\tau} |\psi(r,\theta,\varphi)|^2 \, d\tau = 1$$

$$\int_0^{\infty}\int_0^{\pi}\int_0^{2\pi} |R(r)|^2 |Y_{lm_l}(\theta,\varphi)|^2 r^2 dr \sin\theta \, d\theta \, d\varphi = 1$$

$$\int_0^{\infty} |R(r)|^2 \, r^2 dr \int_0^{\pi}\int_0^{2\pi} |Y_{lm_l}(\theta,\varphi)|^2 \sin\theta \, d\theta \, d\varphi = 1$$

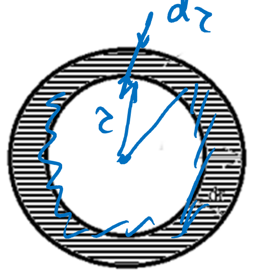
умови нормування хвильової функції

$$\int_0^\infty |R(r)|^2 r^2 dr \cdot \int_0^\pi \int_0^{2\pi} |Y_{lm_l}(\theta,\varphi)|^2 \sin\theta d\theta d\varphi = 1$$

$$\int_0^\infty |R(r)|^2 r^2 dr = 1$$

імовірність перебування електрона у будь-якій точці сферичного прошарку в межах від r до (r+dr)

$$dP_r = \underbrace{|R(r)|^2 r^2 dr}\int_0^\pi \int_0^{2\pi} |Y_{lm_l}(\theta,\varphi)|^2 \sin\theta d\theta d\varphi = \underline{|R(r)|^2 r^2 dr}$$



в одиниці об'єму сферичного прошарку

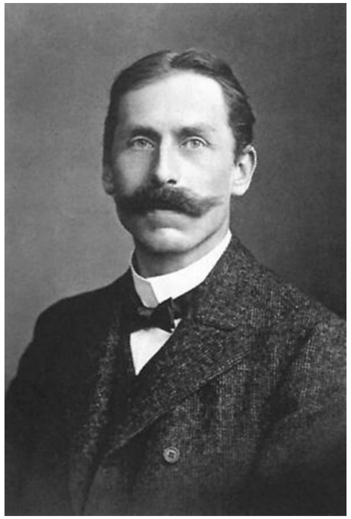
$$\omega_\tau = \frac{dP_r}{4\pi r^2 dr} = \frac{|R(r)|^2 r^2 dr}{4\pi r^2 dr} = \frac{|R(r)|^2}{4\pi}$$

S – ел-ни.

$$r \to 0 \qquad \omega_\tau = \frac{|R(r)|^2}{4\pi} = \frac{a^2}{4\pi} r^{2l}$$

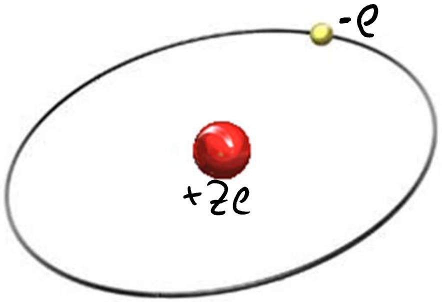
Електрон у кулонівському полі. Радіальна частина хвильової функції. Головне квантове число. Енергія електрона у воднеподібному іоні

Теодор Лайман



Луї́с Карл Ге́нріх Фрі́дріх Паше́н

Фредерік Самнер Брекетт



$U = U(r) \neq U(\vec{r})$

$\psi(r, \varphi, \theta) =$

$= R(r)\, Y_{lm}(\theta, \varphi)$

$$U(r) = -\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r}$$

$$\frac{d^2R(r)}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{dR(r)}{dr} + \frac{2m_0}{\hbar^2}\left[E - U(r)\right]R(r) - \frac{l(l+1)}{r^2}R(r) = 0$$

$$\frac{d^2R(r)}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{dR(r)}{dr} + \frac{2m_0}{\hbar^2}\left[E + \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\right]R(r) - \frac{l(l+1)}{r^2}R(r) = 0$$

$$\frac{d^2R(r)}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{dR(r)}{dr}+\frac{2m_0}{\hbar^2}\left[E+\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\right]R(r)-\frac{l(l+1)}{r^2}R(r)=0$$

$$A=\frac{2m_0}{\hbar^2}E$$

$$B=\frac{m_0}{\hbar^2}\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0}$$

$$\frac{d^2R(r)}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{dR(r)}{dr}+\left[A+\frac{2B}{r}\right]R(r)-\frac{l(l+1)}{r^2}R(r)=0$$

$$\frac{d^2R(r)}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{dR(r)}{dr} + \left[A + \frac{2B}{r}\right]R(r) - \frac{l(l+1)}{r^2}R(r) = 0$$

$$A = \frac{2m_0}{\hbar^2}E$$

$$B = \frac{m_0}{\hbar^2}\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0}$$

$$E < 0, \qquad A < 0 \qquad r_0 = \frac{1}{\sqrt{-A}}$$

$$\rho = \frac{2r}{r_0} \qquad r = \frac{\rho r_0}{2} \qquad \frac{d}{dr} = \frac{d\rho}{dr}\frac{d}{d\rho} = \frac{2}{r_0}\frac{d}{d\rho} \qquad \frac{d^2}{dr^2} = \frac{4}{r_0^2}\frac{d^2}{d\rho^2}$$

$$\frac{4}{r_0^2}\frac{d^2R}{d\rho^2} + 2\frac{2}{r_0\rho}\frac{2}{r_0}\frac{dR}{d\rho} + \left[-\frac{1}{r_0^2} + 2B\frac{2}{r_0\rho}\right]R - \frac{l(l+1)}{r_0^2\rho^2}4R = 0$$

$$\frac{r_0^2}{4} \times$$

$$\frac{d^2R}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho}\frac{dR}{d\rho} + \left[-\frac{1}{4} + \frac{Br_0}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2}\right]R = 0$$

$$\frac{d^2R}{d\rho^2}+\frac{2}{\rho}\frac{dR}{d\rho}+\left[-\frac{1}{4}+\frac{Br_0}{\rho}-\frac{l(l+1)}{\rho^2}\right]R=0$$

$$A=\frac{2m_0}{\hbar^2}E$$

$$B=\frac{m_0}{\hbar^2}\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0}$$

$$n=Br_0=\frac{B}{\sqrt{-A}}$$

$$r_0=\frac{1}{\sqrt{-A}}$$

$$\rho=\frac{2r}{r_0}$$

$$\frac{d^2R}{d\rho^2}+\frac{2}{\rho}\frac{dR}{d\rho}+\left[-\frac{1}{4}+\frac{n}{\rho}-\frac{l(l+1)}{\rho^2}\right]R=0$$

$$\frac{d^2R}{d\rho^2}+\frac{2}{\rho}\frac{dR}{d\rho}+\left[-\frac{1}{4}+\frac{n}{\rho}-\frac{l(l+1)}{\rho^2}\right]R=0$$

$$A=\frac{2m_0}{\hbar^2}E$$

$$B=\frac{m_0}{\hbar^2}\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0}$$

$$r_0=\frac{1}{\sqrt{-A}}$$

$$\rho=\frac{2r}{r_0}$$

$$n=Br_0=\frac{B}{\sqrt{-A}}$$

R(ρ) має бути скінченною

$r\to 0$ $\qquad R(r)\sim r^l$ $\qquad R(\rho)\sim\rho^l$

$r\to\infty$ $\qquad \frac{d^2R}{d\rho^2}-\frac{R}{4}=0$ $\qquad R(\rho)=\exp(\pm\rho/2)$

$\rho\to\infty$

$$R(\rho)=\exp(-\rho/2)$$

$$\frac{d^2R}{d\rho^2}+\frac{2}{\rho}\frac{dR}{d\rho}+\left[-\frac{1}{4}+\frac{n}{\rho}-\frac{l(l+1)}{\rho^2}\right]R=0$$

$$A=\frac{2m_0}{\hbar^2}E$$

$$B=\frac{m_0}{\hbar^2}\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0}$$

$$r_0=\frac{1}{\sqrt{-A}}$$

$$\rho=\frac{2r}{r_0}$$

$$n=Br_0=\frac{B}{\sqrt{-A}}$$

$$R(\rho)=\rho^l\cdot\exp(-\rho/2)\cdot W(\rho)$$

$$R'(\rho)=\rho^l\exp(-\rho/2)\cdot\left(\frac{l\,W}{\rho}-\frac{W}{2}+W'\right)$$

$$R''(\rho)=\rho^l\exp(-\rho/2)\cdot\left(-\frac{l\,W}{\rho^2}+\frac{2l\,W'}{\rho}-W'-\frac{l\,W}{\rho}+\frac{l^2}{\rho^2}+\frac{W}{4}+W''\right)$$

$$\rho^l\exp(-\rho/2)\cdot\left(-\frac{l\,W}{\rho}+2lW'-\rho W'-lW+\frac{l^2\,W}{\rho}+\frac{\rho W}{4}+\rho W''+\right.$$
$$\left.+\frac{2l\,W}{\rho}-W+2W'-\frac{\rho W}{4}+nW-\frac{l(l+1)\,W}{\rho}\right)=0\,.$$

$$\frac{d^2R}{d\rho^2}+\frac{2}{\rho}\frac{dR}{d\rho}+\left[-\frac{1}{4}+\frac{n}{\rho}-\frac{l(l+1)}{\rho^2}\right]R=0$$

$$A=\frac{2m_0}{\hbar^2}E$$

$$B=\frac{m_0}{\hbar^2}\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0}$$

$$r_0=\frac{1}{\sqrt{-A}}$$

$$\rho=\frac{2r}{r_0}$$

$$n=Br_0=\frac{B}{\sqrt{-A}}$$

$$R(\rho)=\rho^l\exp(-\rho/2)W(\rho)$$

$$\rho W''(\rho)+(2l+2-\rho)W'(\rho)+(n-l-1)W(\rho)=0$$

$$W(\rho)=\sum_{k=0}a_k\rho^k=\rho^0 a_0+a_1\rho^1+a_2\rho^2+\ldots$$

$$\rho^0 = 1$$

$$W'=\sum_k a_k k\rho^{k-1}\qquad W''=\sum_k a_k k(k-1)\rho^{k-2}$$

$$\sum_k a_k k(k-1)\rho^{k-1}+\sum_k a_k k(2l+2)\rho^{k-1}-\sum_k a_k k\rho^k+\sum_k a_k(n-l-1)\rho^k=0$$

$$\sum_k a_k k(k-1+2l+2)\rho^{k-1}+\sum_k a_k(n-l-1-k)\rho^k=0$$

$$\frac{d^2R}{d\rho^2}+\frac{2}{\rho}\frac{dR}{d\rho}+\left[-\frac{1}{4}+\frac{n}{\rho}-\frac{l(l+1)}{\rho^2}\right]R=0$$

$$A=\frac{2m_0}{\hbar^2}E$$

$$B=\frac{m_0}{\hbar^2}\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0}$$

$$R(\rho)=\rho^l\exp\left(-\rho/2\right)W(\rho)$$

$$W(\rho)=\sum_{k=0}a_k\rho^k$$

$$r_0=\frac{1}{\sqrt{-A}}$$

$$\sum_k a_k k(k-1+2l+2)\rho^{k-1}+\sum_k a_k(n-l-1-k)\rho^k=0$$

$$\rho=\frac{2r}{r_0}$$

$$\sum_k a_k k(k-1+2l+2)\rho^{k-1}=-\sum_k a_k(n-l-1-k)\rho^k$$

$$n=Br_0=\frac{B}{\sqrt{-A}}$$

$$a_{k+1}(k+1)(k+2l+2)=-a_k(n-l-1-k)$$

$$a_{k+1}=-a_k\frac{n-l-1-k}{(k+1)(k+2l+2)}$$

узагальнений поліном Лагерра

$$\frac{d^2R}{d\rho^2}+\frac{2}{\rho}\frac{dR}{d\rho}+\left[-\frac{1}{4}+\frac{n}{\rho}-\frac{l(l+1)}{\rho^2}\right]R=0$$

$$A=\frac{2m_0}{\hbar^2}E$$

$$B=\frac{m_0}{\hbar^2}\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0}$$

$$R(\rho)=\rho^l\underbrace{\exp(-\rho/2)}\,W(\rho)$$

$$W(\rho)=\underbrace{\sum_{k=0}a_k\rho^k}$$

$$r_0=\frac{1}{\sqrt{-A}}$$

$$a_{k+1}=-a_k\frac{n-l-1-k}{(k+1)(k+2l+2)}$$

$$\rho=\frac{2r}{r_0}$$

***R*(ρ) має бути скінченною**

$$n=Br_0=\frac{B}{\sqrt{-A}}$$

$$\rho\to\infty$$

$$a_{k_m}\neq 0$$

$$a_{k_m+1}=0$$

$$\underbrace{n-l-1-k_m}=0$$

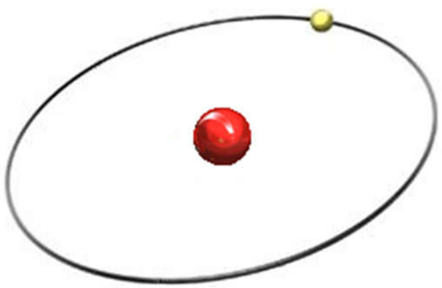
центрально-симетричне поле (ЦСП)

$$U(\vec{r}) = U(|\vec{r}|) = U(r)$$

$$\psi(r,\theta,\varphi) = R(r) \cdot Y_{lm_l}(\theta,\varphi)$$

$$\frac{d^2R(r)}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{dR(r)}{dr} + \frac{2m_0}{\hbar^2}\left[E - U(r)\right]R(r) - \frac{l(l+1)}{r^2}R(r) = 0$$

$R(r) \equiv R_l(r)$ $\qquad$ $E \equiv E(l)$



$$U(r) = -\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r}$$

$$\frac{d^2R}{d\rho^2}+\frac{2}{\rho}\frac{dR}{d\rho}+\left[-\frac{1}{4}+\frac{n}{\rho}-\frac{l(l+1)}{\rho^2}\right]R=0$$

$$A=\frac{2m_0}{\hbar^2}E$$

$$B=\frac{m_0}{\hbar^2}\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0}$$

$$R(\rho)=\rho^l\exp\left(-\rho/2\right)W(\rho)$$

$$W(\rho)=\sum_{k=0}^{k_m}a_k\rho^k$$

$$r_0=\frac{1}{\sqrt{-A}}$$

$$\rho=\frac{2r}{r_0}$$

$$n=Br_0=\frac{B}{\sqrt{-A}}$$

$$n-l-1-k_m=0$$

- n має бути цілим додатним числом **(головне квантове число)**

- *k_m – індекс підсумовування*

$$n\geq l+1$$

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

$$l\leq n-1$$

$$l=0,1,2,\ldots n-1$$

$$\frac{d^2R}{d\rho^2}+\frac{2}{\rho}\frac{dR}{d\rho}+\left[-\frac{1}{4}+\frac{n}{\rho}-\frac{l(l+1)}{\rho^2}\right]R=0$$

$$A=\frac{2m_0}{\hbar^2}E$$

$$B=\frac{m_0}{\hbar^2}\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0}$$

$$-A=\frac{B^2}{n^2}$$

$$r_0=\frac{1}{\sqrt{-A}}$$

$$-\frac{2m_0}{\hbar^2}E=\left(\frac{m_0}{\hbar^2}\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0}\right)^2\frac{1}{n^2}$$

$$\rho=\frac{2r}{r_0}$$

$E_n \neq E_n(l, m)$

Чем

$$n=Br_0=\frac{B}{\sqrt{-A}}$$

$$E_n=-\frac{m_0Z^2e^4}{32\pi^2\varepsilon_0{}^2\hbar^2}\cdot\frac{1}{n^2}$$

$$N_s=\sum_{l=0}^{n-1}(2l+1)=\frac{1+2(n-1)+1}{2}n=n^2$$

$n = 1, 2, 3 \ldots$

виродження

$$N_S=2n^2$$

спін

$E = E(n, l)$

$$E=K+U>0$$

спектр неперервний, нескінченно вироджений

$$A = \frac{2m_0}{\hbar^2}E$$

$$B = \frac{m_0}{\hbar^2}\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0}$$

$$r_0 = \frac{1}{\sqrt{-A}}$$

$$\rho = \frac{2r}{r_0}$$

$$n = Br_0 = \frac{B}{\sqrt{-A}}$$

$$r_0 = \frac{1}{\sqrt{-A}} = \sqrt{-\frac{\hbar^2}{2m_0E}} = \sqrt{\frac{\hbar^2}{2m_0}\frac{32\pi^2\varepsilon_0{}^2\hbar^2}{m_0Z^2e^4}\cdot n^2}$$

$$\underbrace{r_0 = \frac{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}{m_0Ze^2}\cdot n}$$

$$Z = 1; \quad n = 1 \qquad r_0 = r_B = \frac{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}{m_0e^2} \approx 0{,}53\cdot 10^{-10}\,м$$

$$R_{nl}(\rho) = \rho^{l} \cdot \exp(-\rho/2) \cdot \sum_{k=0}^{n-l-1} a_k \rho^k$$

$$\rho = \frac{2r}{r_0}$$

$$r_0 = \frac{r_B}{Z} \cdot n$$

$$R_{nl}(r) = \left(\frac{2r}{r_{0,n}}\right)^{l} \cdot \exp\left(-\frac{r}{r_{0,n}}\right) \sum_{k=0}^{n-l-1} a_k \left(\frac{2r}{r_{0,n}}\right)^{k}$$

$n - l - 1 = 1 - 0 - 1 = 0$

$n = 1$
$l = 0$

$n = 2$
$l = 0$

$n = 2$
$l = 1$

$$R_{10}(r) = a_0 \exp\left(-\frac{r}{r_B}\right)$$

$$a_0 = \frac{1}{\sqrt{\pi r_B^{\,3}}}$$

$$\psi_{n\,l\,m_l}(r,\theta,\varphi) = \underbrace{R_{n\,l}(r)}\overbrace{Y_{l\,m_l}(\theta,\varphi)}$$

атомна орбіталь – *це хвильова функція одноелектронного стану у центрально-симетричному полі, яка визначається трійкою одноелектронних квантових чисел* n, l, m_l.

ймовірність виявлення електрона в dV

$$dP_{r,\theta,\varphi} = \left|\psi\right|^2 dV = |R_{n\,l}(r)|^2 |Y_{l\,m_l}(\theta,\varphi)|^2 \underbrace{r^2 dr \sin\theta\, d\theta\, d\varphi}_{dV}$$

ймовірність виявлення електрона в кульовому шарі товщиною dr

$$dP_r = \underbrace{|R_{n,l}(r)|^2 r^2}\, dr$$

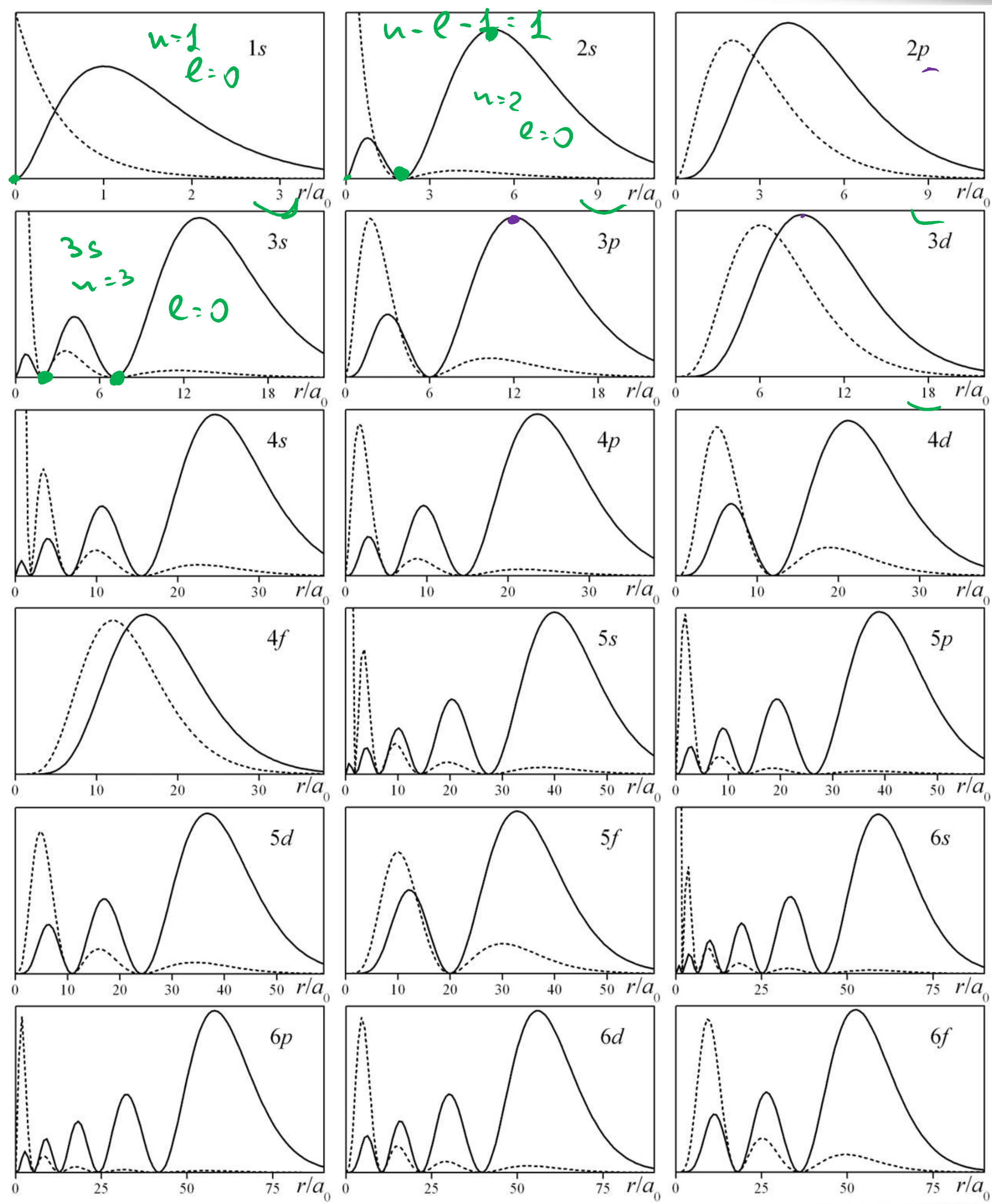
$\underbrace{(n - l - 1)}$ *кількість вузлів*

$$dP_r = |R_{n,l}(r)|^2 \, r^2 dr$$

$$|R_{n,l}(r)|^2 \, r^2$$

$$|R_{n,l}(r)|^2$$

$\langle r \rangle = \int \psi^* \hat{r} \, \psi \, dV$



ймовірність виявлення електрона в dV

$$dP_{r,\theta,\varphi} = \left|\psi\right|^2 dV = | R_{n\,l}(r) |^2 | Y_{l\,m_l}(\theta,\varphi) |^2 r^2 dr \sin\theta\, d\theta\, d\varphi$$

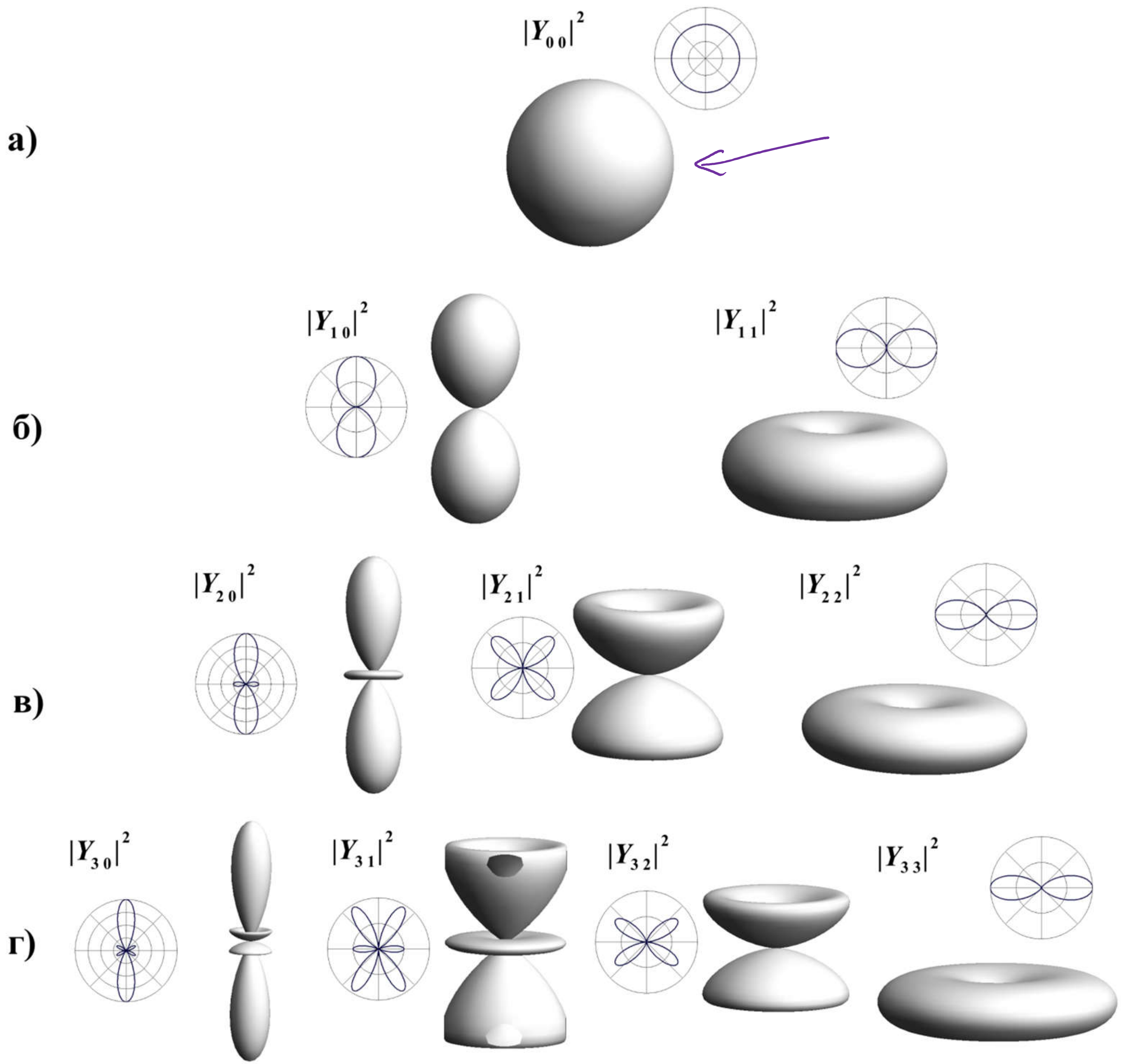
$d\Omega$

ймовірність виявлення електрона в напрямку (θ,φ)

$$dP_{\theta,\varphi} = | Y_{l\,m_l}(\theta,\varphi) |^2 \sin\theta\, d\theta\, d\varphi$$

$$Y_{l\,m_l} \sim \exp(im\varphi)$$

$$\left|Y_{l\,m_l}\right|^2 \neq f(\varphi)$$


а)
$|Y_{00}|^2$
б)
$|Y_{10}|^2$
$|Y_{11}|^2$
в)
$|Y_{20}|^2$
$|Y_{21}|^2$
$|Y_{22}|^2$
г)
$|Y_{30}|^2$
$|Y_{31}|^2$
$|Y_{32}|^2$
$|Y_{33}|^2$