

Сборник задач по атомной физике

учебное пособие, под редакцией
**Н.В. Кленова, С.С. Красильникова,
А.М. Попова, О.В. Тихоновой**
(издание 2-ое, исправленное и дополненное)

Допущено УМО по классическому университетскому образованию РФ в качестве учебного пособия для студентов высших учебных заведений, обучающихся по направлению подготовки ВПО 011200 – «Физика»

Москва 2014

Авторы:

Сотрудники кафедры атомной физики, физики плазмы и микроэлектроники
физического факультета МГУ имени М.В. Ломоносова
С.В. Бакурский, С.М. Зырянов, Н.В.Кленов, С.С.Красильников, Е.А.Крылова,
М.А.Олеванов, А.М.Попов, О.В.Тихонова, П.Р. Шарапова, В.В.Шорохов

Рецензенты:

Гореславский С.П., доктор физико-математических наук, профессор
(Московский инженерно-физический институт)

Крайнов В.П., доктор физико-математических наук, профессор
(Московский физико-технический институт)

Сборник задач по атомной физике: учебное пособие / под редакци-
ей Н.В. Кленова, С.С. Красильникова, А.М. Попова, О.В. Тихоновой (из-
дание 2-ое, исправленное и дополненное) – 224 с.

Настоящий сборник задач является учебным пособием по общему курсу «Атомной физики», читаемому студентам третьего курса физического факультета МГУ. Сборник включает более 600 задач, предлагавшихся на семинарских занятиях по атомной физике, а также при проведении контроля качества обучения. Задачи сборника подробно иллюстрируют современную программу лекционного курса «Атомная физика», читаемого на физическом факультете МГУ. Сборник содержит большое число задач, посвященных истории развития квантовых представлений в первой четверти XX века, обсуждению основ математического формализма квантовой теории (координатное представление Шредингера) и анализу в рамках этого формализма строения одно- и многоэлектронных атомов, простейших молекулярных систем, а также изучению проблемы взаимодействия квантовых систем с внешним электромагнитным полем. В каждом разделе содержатся задачи повышенной трудности, а также задачи, позволяющих познакомиться с современными проблемами атомной физики, квантовой теории твердого тела, квантовой химии и физики молекул.

Для студентов физических специальностей университетов.

Ключевые слова: атом, молекула, квантовая теория

Содержание

I. ИСТОРИЯ РАЗВИТИЯ КВАНТОВЫХ ПРЕДСТАВЛЕНИЙ	4
1. Равновесное электромагнитное излучение.	4
2. Корпускулярные свойства излучения.	7
3. Волны де Бройля. Соотношения неопределенностей.	13
4. Модели атомов Томсона и Резерфорда.	17
5. Модель Бора.	19
II. ОСНОВЫ ФОРМАЛИЗМА КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ	25
6. Основные понятия квантовой механики. Волновая функция. Операторы физических величин. Среднее значение и дисперсия физической величины. Собственные значения и собственные функции операторов физических величин.	25
7. Стационарное уравнение Шредингера. Одномерные задачи.	29
8. Туннельный эффект.	34
9. Движение в центрально симметричном потенциальном поле. Задача Кеплера. Атом водорода.	38
10. Основы стационарной теории возмущений. Системы из многих частиц.	43
11. Нестационарное уравнение Шредингера.	48
12. Нестационарная теория возмущений. Взаимодействие квантовой системы с электромагнитным полем.	53
III. СТРОЕНИЕ ЭЛЕКТРОННОЙ ОБОЛОЧКИ АТОМА	59
13. Многоэлектронные атомы. Атомные оболочки и подоболочки. Электронная конфигурация. Сложение угловых моментов. Терм атома. Правила Хунда.	59
14. Тонкая и сверхтонкая структура атомных спектров.	64
15. Спектры атомов с одним оптическим электроном.	70
16. Электромагнитные переходы в атомах. Правила отбора.	74
17. Рентгеновские спектры.	80
18. Эффекты Зеемана и Пашена – Бака. Опыт Штерна и Герлаха.	82
19. Основы физики молекул.	90
РЕШЕНИЯ	95
СПРАВОЧНЫЕ ДАННЫЕ	215

И. История развития квантовых представлений

1. Равновесное электромагнитное излучение.

1. Формула Планка - спектральное распределение плотности энергии равновесного излучения (абсолютно черного тела)

$$\begin{aligned} \rho_{\omega}(T) &= \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3 (\exp(\hbar\omega/kT) - 1)} = \\ &= \frac{(kT)^3}{\pi^2 c^3 \hbar^2} \frac{x^3}{(\exp(x) - 1)} \left(\frac{\text{эрг} \cdot \text{с}}{\text{см}^3} \right), \end{aligned} \quad (1.1)$$

где ω - частота излучения, T - температура, k - постоянная Больцмана, $x = \hbar\omega/kT$

Спектральное распределение плотности фотонов по частоте:

$$n_{\omega}(T) = \frac{(kT)^2}{\pi^2 c^3 \hbar^2} \frac{x^2}{(\exp(x) - 1)} \left(\frac{1}{\text{см}^3} \right) \quad (1.2)$$

2. Спектральная интенсивность равновесного теплового излучения

$$I_{\omega}(T) = \frac{c}{4} \rho_{\omega}(T) = \frac{\hbar\omega^3}{4\pi^2 c^2 (\exp(\hbar\omega/kT) - 1)} \left(\frac{\text{эрг}}{\text{см}^2} \right). \quad (1.3)$$

3. Закон смещения Вина

$$\hbar\omega_{\max} = 2.821 kT$$

или

$$\lambda_{\max} T = 0.29 \text{ см} \cdot \text{К} \quad (1.4)$$

где ω_{\max} - частота, соответствующая максимуму спектрального распределения (1.1); λ_{\max} - длина волны, соответствующая максимуму спектрального распределения в шкале длин волн.

4. Интегральная по спектру плотность энергии равновесного излучения (закон Стефана - Больцмана)

$$u(T) = \int_0^{\infty} \rho_{\omega}(T) d\omega = \alpha T^4 \left(\frac{\text{эрг}}{\text{см}^3} \right) \quad (1.5)$$

где α - объемная постоянная Стефана-Больцмана:

$$\alpha = \frac{\pi^2 k^4}{15 c^3 \hbar^3} = 7.57 \cdot 10^{-15} \left(\frac{\text{эрг}}{\text{см}^3 \text{ К}^4} \right). \quad (1.6)$$

5. Плотность потока энергии излучения с поверхности абсолютно черного тела (испускательная способность):

$$S(T) = \frac{c}{4} u(T) = \sigma T^4 \left(\frac{\partial p \mathcal{E}}{c m^2 c} \right), \quad (1.7)$$

где σ - поверхностная постоянная Стефана-Больцмана:

$$\sigma = \frac{\pi^2 k^4}{60 c^2 \hbar^3} = 5.67 \cdot 10^{-5} \left(\frac{\partial p \mathcal{E}}{c m^2 c K^4} \right). \quad (1.8)$$

6. Связь между энергией фотона E , частотой ω , и длиной волны λ :

$$E = \hbar\omega = \frac{2\pi\hbar c}{\lambda} \quad (1.9)$$

1.1. Определить число различных типов колебаний (мод) электромагнитного поля в объеме $V = L \times L \times L$, ограниченном зеркальными стенками, в интервале частот $(\omega, \omega + d\omega)$.

1.2. По теории Планка энергия осциллятора определяется соотношением $E_n = n\hbar\omega$, $n = 0, 1, 2, \dots$. Допуская, что распределение осцилляторов по энергиям подчинено закону Больцмана, определить среднюю энергию осциллятора при данной температуре T .

1.3. Исходя из формулы Планка для спектральной плотности энергии равновесного электромагнитного излучения ρ_ω получить:

а) асимптотическую зависимость спектральной плотности энергии ρ_ω при $\hbar\omega/kT \ll 1$ (закон Рэлея-Джинса).

б) асимптотическую зависимость спектральной плотности энергии ρ_ω при $\hbar\omega/kT \gg 1$ (закон Вина).

1.4. Исходя из формулы Планка для спектральной плотности энергии излучения ρ_ω , вычислить в законе Стефана-Больцмана постоянные для:

а) интегральной плотности энергии равновесного излучения $u = \alpha T^4$,

б) интегральной испускательной способности $S = \sigma T^4$.

1.5. Исходя из формулы Планка для спектральной плотности энергии равновесного электромагнитного излучения ρ_ω , получить связь между температурой излучения и интегральным по спектру числом фотонов в единице объема.

1.6. Найти зависимость средней по спектру энергии фотона от температуры.

1.7. Исходя из выражения для спектральной плотности энергии равновесного электромагнитного излучения ρ_ω в шкале частот, получить выражение для спектральной плотности излучения черного тела в шкале длин волн ρ_λ .

1.8. Исходя из формулы Планка для спектральной плотности энергии равновесного электромагнитного излучения ρ_λ , получить связь между длиной волны λ_{\max} , соответствующей максимуму ρ_λ , и температурой (закон смещения Вина).

1.9. Исходя из формулы Планка для функции ρ_λ , определить постоянную B в законе смещения Вина $\lambda_{\max} T = B$. Определить также постоянную A для формулы Вина в шкале частот $AT = \omega_{\max}$. Показать, что частота $\omega^* = 2\pi c/\lambda_{\max}$, не соответствует максимуму ω_{\max} в шкале частот $\omega^*/\omega_{\max} \cong 1.76$. Объяснить причину отличия ω_{\max} от ω^* .

1.10. Найти ω_{\max} и ω^* (см. задачу 1.9) для равновесного теплового излучения с температурой, соответствующей температуре поверхности Солнца $T = 5770$ К.

1.11. Радиус Солнца $R_S = 7.0 \cdot 10^{10}$ см, а температура его поверхности $T_\odot = 5770$ К. Оценить, используя закон Стефана-Больцмана, величину энергии, излучаемую Солнцем за 1 с.

1.12. Исходя из формулы Планка для спектральной плотности энергии равновесного электромагнитного излучения ρ_ω , получить связь между температурой и плотностью потока энергии с поверхности абсолютно черного тела (формула 1.7).

1.13. Определить солнечную постоянную β (плотность потока энергии солнечного излучения у поверхности Земли). Средний радиус земной орбиты $R_{Orb} = 1.5 \cdot 10^{13}$ см.

1.14. На рисунке изображено изменение мощности излучения двойной звезды в относительных единицах. Звезды имеют одинаковый диаметр и вращаются в плоскости, проходящей через наблюдателя. Макси-

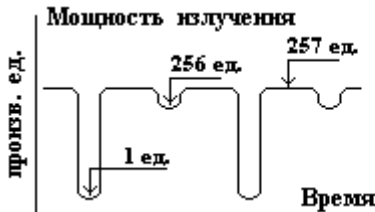
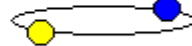


рис. 1



мум мощности излучения темной - звезды приходится на длину волны 2900 \AA в распределении ρ_λ . Определить температуры звезд.

1.15. Оценить число фотонов равновесного электромагнитного излучения в единице объема при температуре:

- а) 300 К, б) 3 К.

1.16. Оценить количество квантов равновесного электромагнитного излучения с энергией $\hbar\omega > \hbar\omega_0 = 1$ эВ в единице объема при $T = 300$ К.

1.17. Исходя из формулы Планка для спектральной плотности энергии равновесного электромагнитного излучения ρ_ω , оценить число фотонов в единице объема в фиолетовой части спектра ($\lambda < 3500$ Å). Температура излучения $T = 1000$ К.

1.18. Оценить число квантов равновесного теплового излучения в единице объема при температуре $T=1$ эВ в диапазоне частот $\hbar\omega < \hbar\omega_0 = 0.1$ эВ.

1.19. Равновесное тепловое излучение находится при температуре 2000 К. На сколько градусов изменится температура, если длина волны, соответствующая максимуму в спектре λ_{\max} увеличится на $\Delta\lambda = 260$ нм.

1.20. Как изменится средняя по спектру энергия кванта равновесного теплового излучения, если λ_{\max} уменьшится в 3 раза.

1.21. Реликтовое излучение соответствует излучению абсолютно черного тела при температуре $T = 2.7$ К. Определите:

- а) λ_{\max} реликтового излучения;
- б) число квантов n реликтового излучения в единице объема;
- в) среднюю длину волны $\langle\lambda\rangle$ реликтового излучения.

1.22. Оценить, какая доля энергии содержится в «высокочастотной» области спектра $\hbar\omega > \hbar\omega_{\max}$.

2. Корпускулярные свойства излучения.

1. Уравнение Эйнштейна для фотоэффекта:

$$E_{кин} = \hbar\omega - A \quad (2.1)$$

где $E_{кин}$ – кинетическая энергия фотоэлектрона $\hbar\omega$ – энергия фотона, A – работа выхода;

2. Эффект Комптона.

Изменение длины волны при рассеянии:

$$\Delta\lambda = \lambda - \lambda_0 = \Lambda(1 - \cos\theta), \quad (2.2)$$

где $\Lambda = 2\pi\hbar/mc = 2.43 \cdot 10^{-10}$ см – комптоновская длина волны электрона; λ_0 , λ – длины волн падающего и рассеянного фотона; θ – угол рассеяния фотона.

Энергия рассеянного фотона:

$$E = \hbar\omega = \frac{\hbar\omega_0}{1 + \frac{\hbar\omega_0}{mc^2}(1 - \cos\theta)}. \quad (2.3)$$

Кинетическая энергия электрона отдачи:

$$W = \frac{\hbar\omega_0}{1 + \frac{\hbar\omega_0}{mc^2}(1 - \cos\theta)}. \quad (2.4)$$

3. Световое давление (при зеркальном отражении и нормальном падении)

$$p = \frac{I}{c}(1 + r), \quad (2.5)$$

где I – интенсивность света, r – коэффициент зеркального отражения, c – скорость света.

2.1. Сколько солнечных фотонов попадает ежесекундно в зрачок глаза? Зрачок считать абсолютно черным, имеющим радиус $R = 1$ мм. Радиус Солнца $R_S \approx 7 \cdot 10^{10}$ см, средний радиус орбиты Земли вокруг Солнца $R_{orb} \approx 1.5 \cdot 10^{13}$ см (см. задачу (1.13)).

2.2. Какой скоростью должен обладать электрон, чтобы его энергия была равна энергии фотона с длиной волны $\lambda = 912 \text{ \AA}$?

2.3. Определить длину волны фотона, энергия которого равна энергии покоя электрона.

2.4. Какой энергией должен обладать фотон, чтобы его импульс был равен импульсу электрона с кинетической энергией $W = 100 \text{ эВ}$, 1 МэВ ?

2.5¹. В спектрах звезд наблюдается гравитационное «красное смещение». Оцените величину смещения линии H_α водорода $\lambda_0 = 6563 \text{ \AA}$ в спектре звезды сверхгиганта VV Кассиопеи, масса которой $\tilde{M} = 57M$, а радиус $\tilde{R} = 34R$, где $M = 2 \cdot 10^{33}$ г, $R = 7 \cdot 10^{10}$ см – масса и радиус Солнца.

2.6. Оцените угол отклонения фотона при пролете вблизи края Солнца; $M = 2 \cdot 10^{33}$ г, $R = 7 \cdot 10^{10}$ см – масса и радиус Солнца.

2.7. Звезда сверхгигант VV Кассиопеи А движется с лучевой скоростью $v = 5 \cdot 10^9$ см/с. Определите величину отношения доплеровского смещения $\Delta\lambda_D$ к гравитационному красному смещению – $\Delta\lambda_G$ (масса, радиус звезды – смотри задачу 2.5).

¹ В задачах 2.5, 2.6 ввести понятие «массы» фотона $m_{ph} = \hbar\omega/c^2$.

2.8. В рамках классической электродинамики оценить среднее по времени значение кинетической энергии электрона, которое он приобретает в поле электромагнитной волны $E = E_0 \cos \omega t$. Электрон считать свободным.

2.9. Показать, что при рассеянии на свободном электроне фотон не может передать ему всю свою энергию.

2.10. В классической работе А.Г.Столетова “Актино-электрические исследования” (1888г.) впервые были сформулированы основные законы фотоэффекта. Один из экспериментальных выводов звучал так: “Разряжающим действием обладают лучи самой высокой преломляемости, длина волны которых менее $295 \cdot 10^{-6}$ мм”. Определить работу выхода электрона из металла, с которым работал А.Г.Столетов.

2.11. Известно, что фотоэлектроны, вырывающиеся с поверхности некоторого металла светом с частотой $\nu_1 = 2.2 \cdot 10^{15} \text{ с}^{-1}$, полностью задерживаются обратным потенциалом $U_1 = 6.6 \text{ В}$, а вырывающиеся светом с частотой $\nu_2 = 4.6 \cdot 10^{15} \text{ с}^{-1}$ – потенциалом $U_2 = 16.5 \text{ В}$. По этим данным определить постоянную Планка h .

2.12. Красная граница фотоэффекта для цезия равна $\lambda^* = 6390 \text{ \AA}$. Чему равна максимальная энергия фотоэлектронов, если падающее на цезиевый фотокатод излучение имеет длину волны $\lambda = 912 \text{ \AA}$.

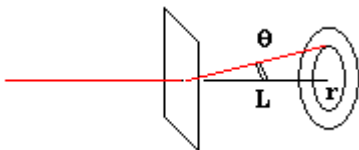
2.13. Когда длину волн света, освещающего поверхность некоторого металла, изменили с $\lambda_1 = 0.35 \text{ мкм}$ на $\lambda_2 = 0.54 \text{ мкм}$, максимальная скорость фотоэлектронов уменьшилась в два раза. Найти работу выхода с поверхности этого металла.

2.14. На металлическую поверхность с работой выхода $A = 3.6 \text{ эВ}$ воздействует электромагнитное поле $E = E_0(1 + \cos \omega t) \cos \omega_0 t$ (E - напряженность электрического поля волны). Найти энергию фотоэлектронов, если $\omega = 4.8 \cdot 10^{15} \text{ с}^{-1}$, $\omega_0 = 6.4 \cdot 10^{15} \text{ с}^{-1}$.

2.15. Оценить величину фототока с поверхности металла площадью $S = 1 \text{ см}^2$ (работа выхода $A = 4 \text{ эВ}$) под действием излучения Солнца. Спектр излучения Солнца считать близким к спектру излучения черного тела с температурой $T = 5700 \text{ К}$. Считать величину квантового выхода фотоэффекта (вероятности вырывания электрона фотоном) не зависящей от длины волны и равной $\eta = 0.01$. (см.зад. 1.16).

2.16. Производится облучение поверхности металла с работой выхода $A = 3 \text{ эВ}$. Спектральный состав излучения источника соответствует равновесному тепловому с температурой $T = 5700 \text{ К}$. Найти среднюю энергию фотоэлектронов, считая, что вероятность вырывания электрона фотоном не зависит от длины волны излучения.

2.17. В опыте Томсона по наблюдению дифракции электронов на плоской медной фольге радиус первого дифракционного кольца (рис. 1) равен $r=1$ см; расстояние до экрана $L=10$ см (см. рис.). Рассеяние сопровождается тормозным рентгеновским излучением из мишени. Найти длину волны границы сплошного спектра тормозного излучения λ^* . Период кристаллической решетки меди принять равным



$d=3.6 \text{ \AA}$.

2.18*. Определить энергию электрона отдачи при рассеянии на нем γ -кванта с энергией $\hbar\omega_0 = 1$ МэВ на угол 45° .

2.19. При облучении вещества рентгеновским излучением обнаружено, что максимальная кинетическая энергия комптоновских электронов $K_{\max} = 0,511$ МэВ. Определить длину волны излучения λ .

2.20. Определить скорость электронов отдачи, если энергия γ -квантов после рассеяния на угол 60° равна $\hbar\omega = 0.511$ МэВ.

2.21. Определить величину комптоновского смещения $\Delta\lambda$, если начальная длина волны фотона $\lambda_0 = 0.0242 \text{ \AA}$, а скорость электрона отдачи определяется соотношением $\beta = v/c = 0.6$.

2.22. Во сколько раз изменилась энергия γ -кванта, если рассеянный квант имеет наибольшую возможную длину волны? Начальная энергия кванта равна $\hbar\omega_0 = 1.533$ МэВ.

2.23. В опыте Комптона энергия падающего фотона распределяется поровну между рассеянным фотоном и электроном отдачи. Угол рассеяния равен $\pi/2$. Найти энергию и импульс рассеиваемого фотона.

2.24. Показать, что в опытах Комптона по изучению рассеяния рентгеновского излучения различными веществами интенсивность рассеянного излучения определяется электронной подсистемой твердого тела. Сравнить интенсивности света, рассеянного электронной и ядерной подсистемами твердого тела.

2.25. Каким будет спектр γ -квантов ^{60}Co ($\hbar\omega_0 = 1,25$ МэВ) после рассеяния на водороде на угол $\pi/2$.

2.26. Фотон испытал рассеяние на покоившемся свободном электроном. Найти импульс налетавшего фотона, если энергия рассеянного фотона равна кинетической энергии электрона отдачи при угле 90° между направлениями их разлета.

* В задачах 2.18 – 2.23 считать, что до рассеяния электрон покоится.

2.27. В случае рассеяния кванта на свободном покоящемся электроне на угол θ найти угол вылета электрона ϕ (см. рис.). Для случая $\theta = \pi/2$ рассмотреть варианты $\hbar\omega_0 \gg mc^2$ и $\hbar\omega_0 \ll mc^2$.

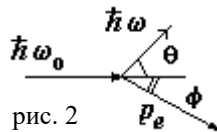


рис. 2

2.28. При рассеянии кванта на свободном покоящемся электроне угол рассеяния кванта θ и угол вылета электрона ϕ (см. рис. к задаче 2.27) оказались равны, причем $\theta = \phi = \pi/4$. Найти энергии квантов до и после рассеяния.

2.29. При рассеянии кванта с энергией 1.022 МэВ на свободном покоящемся электроне угол вылета электрона ϕ (см. рис. к задаче 2.27) оказался таким, что $\operatorname{tg}(\phi) = 1/3$. Найти угол рассеяния кванта θ .

2.30. При рассеянии кванта на свободном покоящемся электроне угол вылета электрона ϕ (см. рис. к задаче 2.27) оказался таким, что $\operatorname{tg}(\phi) = 1/2$, а угол рассеяния кванта $\theta = \pi/2$. Найти энергию кванта.

2.31. В рамках классической электродинамики определить силу давления, действующую на свободный электрон в поле плоской электромагнитной волны.

2.32. Первоначально покоившийся электрон под действием силы светового давления (см. задачу 2.31) начинает двигаться в направлении распространения световой волны. Определить доплеровское смещение при наблюдении под углом θ относительно направления распространения волны. Считать скорость электрона $v \ll c$. Сравнить полученный результат с формулой Комптона. Длина волны излучения - λ_0 .

2.33. Как изменится длина волны фотона спектральной линии L_α ($\lambda = 1216 \text{ \AA}$) атома водорода после рассеяния назад свободным покоящимся электроном?

2.34. Определить энергию фотонов, рассеянных покоящимся свободным электроном на угол 180° в двух предельных случаях:

а) при большой начальной энергии фотонов $\hbar\omega_0 \gg mc^2$;

б) при малой начальной энергии фотонов $\hbar\omega_0 \ll mc^2$.

Сделайте численные оценки для энергий фотонов 10 МэВ и 10 эВ.

2.35. Определить долю энергии, передаваемой фотоном свободному покоящемуся электрону при комптоновском рассеянии назад. Найдите предел при высоких и низких энергиях фотонов. Сделайте численные оценки при энергиях квантов 256 МэВ, 0.255 МэВ и 10 эВ.

2.36. Найти энергию фотона после рассеяния на электроне, двигавшемся навстречу фотону со скоростью v_0 . Рассмотреть предел $v_0 \rightarrow c$ при рассеянии фотона назад.

2.37. При каких начальных условиях в задаче 2.36 рассеяние назад не изменяет энергии фотона?

2.38. Определить изменение энергии электрона в условиях задачи 2.36.

2.39. Излучение CO_2 - лазера ($\lambda_0 \approx 10$ мкм) рассеивается на релятивистском электронном пучке с энергией $E = 5$ ГэВ, движущемся навстречу. Какова длина волны излучения, рассеиваемого назад?

2.40. Используя представление о световых квантах, показать, что давление света на освещенное тело определяется соотношением $p = \rho(1+R)$, совпадающим с выражением для давления света в классической электродинамике (ρ – плотность энергии излучения, R - коэффициент отражения).

2.41. Найти силу давления излучения Солнца на Землю, считая, что все излучение поглощается (см. зад. 1.13).

2.42. Какова должна быть плотность фотонов в вертикально распространяющемся световом пучке, чтобы диск массой $m = 1$ г с зеркальной поверхностью и площадью поперечного сечения $S = 10$ см² висел в воздухе в поле тяжести Земли? Длина волны излучения $\lambda = 5 \cdot 10^{-5}$ см.

2.43. В известном опыте П.Н.Лебедева по изучению светового давления, экспериментальный прибор состоял из двух кружков, диаметром $d = 0.5$ см, закрепленных на легкой горизонтальной штанге. Штанга подвешивалась на тонкой упругой нити, которая крепилась к центру штанги. Расстояние от центра кружка до оси вращения было $\ell = 0.92$ см. Постоянная k момента кручения нити ($M = k\alpha$), была равна $2.2 \cdot 10^{-4}$ дин-см/рад. Один из кружков был зачернен. В эксперименте при падении света на зачерненный кружок, угол поворота нити был 10 угловых минут. Определить величину светового давления.

2.44. При какой температуре давление излучения термодинамически равновесной водородной плазмы сравнивается с газокинетическим давлением? Плотность плазмы $\rho = 1$ г/см³.

2.45. В вакууме находятся две плоскопараллельные пластины, каждая из которых нагрета до температуры T . Пластины движутся с относительной скоростью \vec{V} (см. рис.) Найти изменение импульса одной из пластин в результате поглощения пары фотонов одной частоты, испущенных другой пласти-

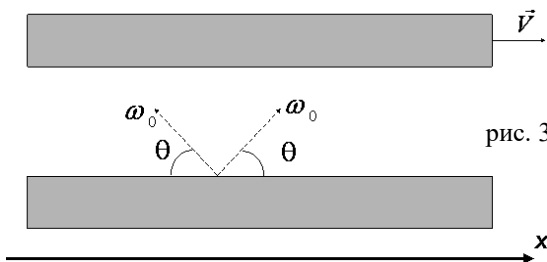


рис. 3

из которых нагрета до температуры T . Пластины движутся с относительной скоростью \vec{V} (см. рис.) Найти изменение импульса одной из пластин в результате поглощения пары фотонов одной частоты, испущенных другой пласти-

ной, под углами θ и $\pi - \theta$ к вектору скорости \vec{V} в плоскости, проходящей через нормаль к пластинам и вектор скорости \vec{V} . Указание: Учесть влияние эффекта Доплера на эффективную частоту фотона, испущенного первой пластиной и «видимого» второй пластиной. Считать $V/c \ll 1$.

2.46. Найти выражение для силы бесконтактного трения, действующей между двумя плоскопараллельными пластинами в вакууме, нагретыми до температуры T и движущимися со скоростью V относительно друг друга (см. задачу (2.45)). Указание: Провести интегрирование результата, полученного в предыдущей задаче, по спектру излучения и углу вылета фотонов θ .

2.47. При аннигиляции нерелятивистской электрон – позитронной пары образовалось два γ - кванта ($e^+ + e^- \rightarrow 2\gamma$). Определить направления их вылета и длины волн.

3. Волны де Бройля. Соотношения неопределенностей.

1. Соотношения де Бройля:

$$\vec{p} = \hbar \vec{k}, \quad E = \hbar \omega, \quad \lambda_D = \frac{h}{p} \quad (3.1)$$

где λ - длина волны, соответствующая частице, движущейся с импульсом $\vec{p} = m\vec{v} / \sqrt{1 - (v/c)^2}$, в частности, в нерелятивистском случае $\vec{p} = m\vec{v}$.

2. Формула Вульфа-Брегга

$$2d \sin(\theta) = n \lambda_D, \quad (3.2)$$

где d - расстояние между кристаллическими плоскостями; θ - угол скольжения; $n = 0, 1, 2, \dots$ - порядок интерференции.

3. Соотношения неопределенностей для импульса и координаты частицы:

$$\Delta p_x \cdot \Delta x \geq \hbar, \quad \Delta p_y \cdot \Delta y \geq \hbar, \quad \Delta p_z \cdot \Delta z \geq \hbar; \quad (3.3)$$

для энергии и времени

$$\Delta E \cdot \tau \geq \hbar \quad (3.4)$$

3.1. При каких значениях кинетической энергии электрона его де-бройлевская длина волны меньше комптоновской длины волны?

3.2. При изучении фотоэффекта, оказалось, что де-бройлевская длина волны фотоэлектрона совпадает с длиной волны воздействующего излучения λ . Определить λ , если работа выхода материала $A = 4$ эВ.

3.3. Определить длину волны де Бройля, соответствующую среднеквадратичной скорости атомов гелия He и молекул водорода H₂ при температуре $T = 5^\circ \text{K}$.

3.4. Определить де-бройлевские длины волн электронов, ускоренных до энергий $W_1 = 1$ КэВ и $W_2 = 1$ ГэВ.

3.5. Определить длины волн де Бройля для электронов и протонов с энергией 10 МэВ.

3.6. При торможении электронов на антикатоде рентгеновской трубки возникает тормозное рентгеновское излучение; коротковолновая граница его спектра $\lambda = 1$ Å. Определить де-бройлевскую длину волны электронов.

3.7. Найти разность величин длин волн де Бройля, вычисленных по релятивистским и нерелятивистским формулам для электрона и протона с кинетической энергией, равной удвоенной энергии покоя.

3.8. Выразить длину волны де Бройля λ_D релятивистской частицы через ее кинетическую энергию T . Нарисовать графики зависимости $\lambda_D(T)$ в нерелятивистском пределе.

3.9. Выразить длину волны де Бройля λ_D релятивистской частицы через ее кинетическую энергию T . Нарисовать график зависимости $\lambda_D(T)$ в ультрарелятивистском пределе.

3.10. Кинетическая энергия протона равна $E_k = (\sqrt{2} - 1)M_p c^2$. Какова его де-бройлевская длина волны?

3.11. Выразить длину волны де Бройля λ_D релятивистской частицы через ее полную энергию E . Нарисовать график зависимости $\lambda_D(E)$ в ультрарелятивистском пределе.

3.12. В электронном микроскопе энергия пучка электронов $E_e = 100$ кэВ. Определить его предельно возможную разрешающую способность.

3.13. На какую кинетическую энергию должен быть рассчитан ускоритель протонов, чтобы исследовать структуры с пространственным размером $l = 1$ фм $= 10^{-13}$ см.

3.14. Найти пространственно-временную структуру и оценить характерную пространственную ширину в некоторый момент времени t^* волнового пакета, описывающего состояние свободной нерелятивистской частицы и составленного из плоских волн де Бройля. Считать, что спектр волновых векторов является узким и лежит в малой окрестности Δk вблизи k_0 . Ограничиться первым порядком в дисперсионной зависимости $\omega(k)$.

3.15. Используя гипотезу де Бройля, найти фазовую и групповую скорости волнового пакета, характеризующего свободную частицу. Рассмотреть релятивистский и нерелятивистский случаи.

3.16. В экспериментах Мелленштедта и Иенсона наблюдалась дифракция пучка электронов на щели. Под каким углом обнаружатся первые дифракционные минимум и максимум, если энергия электронов, нормально падающих на щель шириной $b = 6 \cdot 10^{-5}$ см, равна $W = 40$ кэВ?

3.17. Пучок электронов, ускоренных разностью потенциалов $U = 128$ кэВ, дифрагирует на тонкой поликристаллической фольге. Радиус r первого кольца на экране, отстоящем от фольги на $L = 10$ см, равен $r = 0,15$ см. Определить период решетки в материале фольги.

3.18. Параллельный пучок атомов натрия из печи с температурой $T \cong 10^3$ К через коллиматорную щель попадает на экран, расположенный от щели на расстоянии $L \cong 10^2$ см. Оценить ширину щели ℓ , при которой ширина следа пучка на экране будет минимальной.

3.19. Используя соотношение неопределенности, оцените кинетическую энергию частицы, локализованной в пространственной области размером L . Оцените кинетическую энергию электрона, локализованного в области, имеющей размер атома $\sim 10^{-8}$ см. Оцените также кинетическую энергию макрочастицы ($m \sim 1$ г), локализованную в области размером $L \sim 1$ см.

3.20. Электрон находится в бесконечно глубокой прямоугольной потенциальной яме размером $a \times b$. Оценить минимально возможное значение кинетической энергии электрона в случаях:

$$\text{а) } a = b = 1 \text{ \AA}; \quad \text{б) } a = 1 \text{ \AA}, \quad b = 1 \text{ см.}$$

3.21. Используя соотношение неопределенностей, оценить кинетическую энергию нуклона в атомном ядре (размер ядра $R \sim 10^{-12}$ см).

3.22. Исходя из соотношения неопределенностей Гейзенберга, доказать невозможность существования электрона внутри атомного ядра (размер ядра $R \sim 10^{-12}$ см).

3.23. Используя соотношение неопределенностей, оценить величину минимальной энергии линейного гармонического осциллятора (энергию нулевых колебаний).

3.24. Исходя из соотношения неопределенностей, оценить минимально возможную область пространственной локализации частицы, находящейся в силовом поле $\vec{F} = -\beta\vec{r}$.

3.25. Исходя из соотношения неопределенностей, оценить минимально возможную энергию частицы массы m , находящейся в потенциале $V(x) = k(x - x_0)^2/2$.

3.26. Исходя из соотношения неопределенностей, оценить энергию основного состояния атома водорода.

3.27. Исходя из соотношения неопределенностей, оценить характерный размер водородоподобного иона с зарядом Z .

3.28. Исходя из соотношения неопределенностей, оценить энергию связи основного состояния водородоподобного иона с зарядом ядра Z .

3.29. Исходя из соотношения неопределенностей, получить условие, при выполнении которого частица массы m может удерживаться в прямоугольной сферически симметричной потенциальной яме радиуса R и глубины V_0 .

3.30. Используя соотношение неопределенностей $\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \hbar$, оценить время, за которое ширина волнового пакета, описывающего состояние свободной частицы (электрона), увеличится вдвое. Начальная ширина пакета $\Delta x_0 = 2 \text{ \AA}$.

3.31. Ширина волнового пакета, описывающего состояние свободной частицы (электрона), за время $\tau = 10^{-15}$ с увеличилась в 10 раз по сравнению с начальной. Используя соотношение неопределенностей $\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \hbar$, определить начальную ширину волнового пакета Δx_0 .

3.32. Характерная область локализации волнового пакета, описывающего состояние свободного электрона, в начальный момент времени порядка a_0 (боровский радиус). Исходя из соотношения неопределенностей $\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \hbar$, определить зависимость ширины волнового пакета от времени на временах $t \gg 10^{-12}$ с.

3.33. Ширина волнового пакета, описывающего состояние свободной частицы (протона), за время $\tau = 10^{-15}$ с увеличилась в 2 раза по сравнению с начальной. Используя соотношение неопределенностей $\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \hbar$, определить начальную ширину волнового пакета Δx_0 .

3.34. Оценить размеры волнового пакета по истечении большого времени, если начальные параметры пакета заданы соотношением $\Delta x_0 \cdot \Delta p_{x0} \sim \hbar$. Каково время расплывания пакета до размеров порядка атомных, если начальный размер пакета порядка классического радиуса электрона $r_e = e^2/mc^2$.

3.35. Типичное время жизни атома в обычном возбужденном состоянии порядка 10^{-8} с, а время жизни атома в метастабильном состоянии может достигать величины порядка 10^{-3} с. Оцените естественные ширины спектральных линий в ангстремах в области видимого спектра ($\lambda \sim 6000 \text{ \AA}$) для этих случаев.

3.36. Ширина линии усиления кристалла титаната сапфира ($Ti : \text{Sapphire}$) составляет $\Delta \nu = 2 \cdot 10^{14} \text{ с}^{-1}$. Оценить предельную длительность импульса генерации в лазере на кристалле $Ti : \text{Sapphire}$.

3.37. Длительность импульса излучения титан-сапфирового лазера (длина волны излучения $\lambda = 800$ нм) составляет $\tau \sim 10^{-14}$ с. Оценить степень монохроматичности излучения $\Delta\lambda/\lambda$.

3.38. Ширина спектра генерации Nd - лазера (длина волны излучения ($\lambda \approx 1$ мкм) на стекле составляет $\Delta\lambda = 30$ нм, а Nd - лазера на кристалле иттрий-алюминиевого граната (YAG) - $\Delta\lambda = 0.7$ нм. Оценить предельно короткие длительности импульсов, которые можно получить в таких системах.

3.39. В мезонной теории ядерных сил предполагается, что взаимодействии между нуклонами осуществляется посредством испускания одним из нуклонов и последующим поглощением вторым нуклоном частицы, переносчика взаимодействия, нейтрального или заряженного пиона (π^0, π^\pm). Исходя из соотношения неопределенностей, оцените массу пиона. Радиус действия ядерных сил порядка $R \approx 1.4 \cdot 10^{-13}$ см.

3.40. Используя соотношение неопределенностей, оцените минимальную высоту подпрыгивания упругого шарика массы M на твердой поверхности в поле тяготения Земли. Численную оценку сделайте для нейтрона. Сравните с задачей 5.45.

4. Модели атомов Томсона и Резерфорда.

1. Формула Резерфорда.

Угол рассеяния при кулоновском взаимодействии

$$\operatorname{tg}(\theta/2) = \rho_{\perp}/\rho \quad (4.1)$$

где $\rho = \rho(\theta)$ – прицельный параметр рассеяния на угол θ ;

$$\rho_{\perp}(\pi/2) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{\mu v^2} \quad (4.2)$$

здесь Z_1, Z_2 - заряды взаимодействующих частиц, μ - приведенная масса, v - относительная скорость.

Дифференциальное сечение рассеяния (в единицу телесного угла Ω):

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{4} \rho_{\perp}^2 \frac{1}{\sin^4(\theta/2)} \quad (4.3)$$

4.1. Найти потенциал взаимодействия (потенциальную энергию) точечного заряда с однородно заряженным шаром радиуса R .

4.2. По Томсону атом водорода представляет собой однородно заряженный шар радиусом $R \sim 10^{-8}$ см с общим зарядом $e = +4.8 \cdot 10^{-10}$ ед. за-

ряда СГСЭ, внутри которого находится один электрон (в центре шара, если атом не возбужден). Найти частоту излучения такого атома.

4.3. Влияние классического излучения на траекторию ускоренно движущегося электрона может быть описано действием силы радиационного трения - $\vec{f} = \frac{2e^2}{3c^3} \ddot{\vec{r}}$. Оцените время излучения атома в рамках модели Томсона.

4.4. Найти закон изменения энергии электрона во времени в рамках модели Томсона с учетом радиационного затухания.

4.5. Считая атом гармоническим осциллятором с частотой ω_0 (модель Томсона), определить частоты его излучения во внешнем однородном магнитном поле с напряженностью H (эффект Зеемана). Сделать численную оценку для $H = 10^5$ Э.

4.6. Оценить максимальный угол рассеяния α частиц с энергией E_α на положительно заряженном шаре (заряд Ze) радиуса R . $E_\alpha = 5$ МэВ, $Z=79$, $R = 10^{-8}$ см.

4.7. При лобовом столкновении α -частицы с энергией $E = 4.32$ МэВ с однородно заряженным положительным шаром ($Z=100$) угол рассеяния θ оказался равным:

а) $\theta=0$; б) $\theta=\pi$.

В обоих случаях найти радиус шара R .

4.8. В рамках классической электродинамики определить спектральную интенсивность тормозного рентгеновского излучения возникающего при рассеянии быстрой заряженной частицы с энергией E в поле ядра с зарядом Z . Считать, что $E \gg Ze^2/b$, b - прицельный параметр.

Указание: Траекторию движения частицы можно приближенно считать прямолинейной.

4.9. Оценить энергию, передаваемую при столкновении быстрой альфа-частицей покоящемуся электрону в атоме Томсона. Траекторию альфа-частицы считать прямолинейной; смещением электрона за время пролета альфа-частицы пренебречь. Прицельный параметр $\rho \sim 10^{-8}$ см.

4.10. В опыте Резерфорда производилось облучение тонкой золотой ($Z = 79$) фольги пучком α частиц с энергией 4.5 МэВ. Экспериментально было установлено, что небольшое число частиц отклоняется на углы $\geq \pi/2$. Пользуясь результатом опыта Резерфорда, оцените размер ядра атома.

4.11. Протоны, α - частицы и ядра лития, ускоренные одной и той же разностью потенциалов, проходят через тонкую платиновую фольгу. Какие из этих частиц будут сильнее всего рассеиваться?

4.12. При соударении с ядром атома плутония ($Z = 94$) α - частица с энергией $W = 1$ МэВ отклоняется на угол $\theta = \pi/2$. Определите минимальное расстояние, на которое сблизилась частицы.

4.13. Найти вероятность рассеяния “назад” (на углы $\theta > \pi/2$) α - частиц с энергией 4.5 МэВ на золотой фольге толщиной 1 мк.

4.14. С каким прицельным параметром ρ должна лететь α - частица с энергией $W = 2.87$ МэВ, чтобы рассеяться на угол $\theta = \pi/2$:

а) на бесконечно тяжелом ядре с зарядом $Z = 20$;

б) на ядре ${}_{20}^{40}\text{Ca}$?

4.15. Согласно представлениям классической физики, электрон, движущийся вокруг ядра с ускорением, излучает, теряя энергию. Покажите, что энергия, излучаемая электроном за один оборот мала по сравнению с его энергией. Для атома водорода найдите зависимость радиуса орбиты и энергии от времени, а также время падения электрона на ядро. Начальный радиус орбиты считайте заданным и равным $r(0) \sim 10^{-8}$ см.

5. Модель Бора.

1. Постулаты Бора.

Условие частот Бора

$$\hbar\omega_{mn} = E_m - E_n, \quad (5.1)$$

где ω_{mn} - частота перехода $m \rightarrow n$; E_m , E_n - энергии уровней с квантовыми числами m и n .

Условие квантования Бора-Зоммерфельда

$$L = \oint p_i dq_i = 2\pi n_i \hbar, \quad (5.2)$$

где p_i , q_i - обобщенные импульс и координата, интегрирование проводится по периоду движения относительно обобщенной координаты q_i .

В случае круговых орбит ($q_i = \varphi$, $p_i = mvr$ формула (5.2) дает

$$L = mvr = n\hbar \quad (5.3)$$

2. Формула Бальмера. Спектральные серии водородоподобного иона:

$$\frac{1}{\lambda_{nn'}} = Z^2 \frac{R_\infty}{1 + \frac{m}{M}} \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{n'^2} \right). \quad (5.4)$$

Здесь $\lambda_{n n'}$ - длина волны для перехода $n \rightarrow n'$, Z - заряд ядра;

m , M – массы электрона и ядра, $R_\infty = 109737.31568549 \text{ см}^{-1}$ - постоянная Ридберга для бесконечной массы ядра.

Спектральные серии:

- $n = 1$ - серия Лаймана,
- $n = 2$ - серия Бальмера,
- $n = 3$ - серия Пашена,
- $n = 4$ - серия Брэкета,
- $n = 5$ - серия Пфунда,
- $n = 6$ - серия Хэмфри,
- $n = 7$ - серия Хансена-Стронга.

5.1. Опираясь на планетарную модель атома и принцип соответствия Бора покажите что для водородоподобного иона с зарядом ядра Z момент импульса на круговой орбите кратен постоянной Планка: $L = mvr = n\hbar$, а энергии уровней равны $E_n = -Z^2 Ry/n^2$.

5.2. Найти динамические параметры всех круговых орбит электрона в атоме водорода: радиусы, скорости, энергии, частоты и периоды обращения, релятивистский параметр v/c . При численных оценках массу ядра считать бесконечно большой.

5.3. Вычислить напряженность E электрического поля на первой боровской орбите в атоме водорода.

5.4. Вычислить напряженность H магнитного поля в месте расположения ядра в атоме водорода.

5.5. Сравнить ω_n - частоту обращения электрона на боровской орбите в атоме водорода с частотой $\omega_{n+1,n}$ кванта, излучаемого при переходе из состояния $n+1$ в состояние n . Рассмотреть случаи:

- а) $n \gg 1$;
- б) $n \sim 1$.

5.6. Считая электрон релятивистским, вычислить (по Бору) его скорости, радиусы орбит и уровни энергии для водородоподобного иона. Массу ядра считать бесконечно большой.

5.7. Определить релятивистскую поправку к положению энергетических уровней водородоподобного иона с зарядом ядра Z . Считать $\alpha Z \ll 1$. α - постоянная тонкой структуры.

5.8. Считая массу ядра бесконечной, показать что в спектрах атома H и иона He^+ есть множество линий равных длин волн.

5.9. Последовательность длин волн линий в спектральной серии некоторого элемента определяется соотношением (серия Пикеринга)

$$\frac{1}{\lambda_n} = R \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad n = 2.5, 3, 3.5, 4, \dots$$

Определить, что это за элемент, и переходам между какими уровнями соответствует данная серия.

5.10. В излучении газоразрядной трубки с неизвестным газом наблюдается серия спектральных линий с длинами волн, определяемыми соотношением: $1/\lambda_n = R(1 - 1/n^2)$ где R – постоянная Ридберга, $n = 4/3, 5/3, 6/3, 7/3, 8/3, 9/3$ и т. д. Определите, каким газом наполнена трубка.

5.11. Найти для ионов He^+ и Li^{++} радиусы первых орбит r_1 , уровни энергии E_1 и длины волн резонансных линий λ : $n = 2 \rightarrow n - 1$. Массу ядра считать бесконечно большой.

5.12. Изобразите на шкале длин волн положение серий Лаймана, Бальмера, Пашена и Брэкета атома водорода. Для этого определите длины волн λ_α головных линий и пределы этих серий λ_∞ .

5.13. Какую скорость приобретает покоящийся атом водорода, испустив квант L_α ? Определить энергию испущенного фотона с учетом отдачи атома.

5.14. Найти длины волн квантов, способных фотоионизовать водородоподобный ион He^+ ; (фотоэффект $He^+ + \hbar\omega \rightarrow He^{++} + e$)?

5.15. Фотон с длиной волны а) $\lambda = 456 \text{ \AA}$, б) $\lambda = 0.024 \text{ \AA}$ вырывает электрон из атома водорода. Чему равна скорость вырванного электрона?

5.16. При совместном наблюдении спектров атомов водорода и дейтерия любой переход $m \rightarrow n$ выглядит как изотопический дублет (изотопический сдвиг). **Любой** изотопический дублет водорода и дейтерия имеет следующее свойство $\lambda_{mn}^{(H)} / \Delta\lambda_{mn} = 3674$; здесь $\Delta\lambda_{mn} = \lambda_{mn}^{(H)} - \lambda_{mn}^{(D)}$, $\lambda_{mn}^{(H)}, \lambda_{mn}^{(D)}$ длины волн спектральных линий $m \rightarrow n$ атомов водорода и дейтерия. Найдите отношение массы протона к массе электрона M_p / m_e . Считайте, что ядро дейтерия вдвое тяжелее протона $M_D = 2M_p$.

5.17. Найти изотопический сдвиг (в \AA) для α -линий серии Лаймана (L_α) двух изотопов водорода H и D, ионов $^3He^+$ и $^4He^+$, $^{19}Ne^{9+}$ и $^{20}Ne^{9+}$.

5.18. Найдите предельное значение изотопического расщепления $\Delta\lambda_n$ спектральных линий серий Бальмера $n \rightarrow 2$ атомов водорода и дейтерия при $n \rightarrow \infty$.

5.19. Найти динамические параметры всех круговых орбит в атоме позитрония: радиусы, скорости, энергии, частоты и периоды обращения, релятивистский параметр v/c .

5.20. Найти динамические параметры всех круговых орбит в системе протон-антипротон $p\bar{p}$: радиусы, скорости, энергии, частоты и периоды обращения, релятивистский параметр v/c .

5.21. В полупроводнике электрон и дырка могут объединяться в экситон – электрически нейтральное образование, аналогичное атому водорода (экситон Ванье-Мотта). Определить радиус и энергию первой боровской орбиты и энергию связи экситона в кремнии (диэлектрическая проницаемость $\epsilon = 12$). Эффективные массы электрона и дырки в кремнии одинаковы $m^* = 0.25m_e$.

5.22. Пригоден ли спектрограф с оптическими элементами, изготовленными из MgF_2 , для наблюдения **полных спектров** атома водорода и атома позитрония e^+e^- ? Материал MgF_2 прозрачен для излучения с длинами волн $\lambda > 1300 \text{ \AA}$.

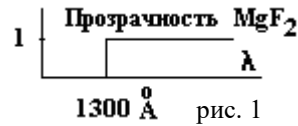


рис. 1

5.23. Протон и мюон могут образовывать водородоподобную систему называемую мезоатомом. Масса мюона равна 207 электронным массам, а его заряд равен заряду электрона. Найти (в рамках модели круговых орбит) радиусы, скорости и уровни энергии этой системы.

5.24. Мезоатом $\mu - p$ (масса мюона $\mu = 207m_e$) образуется при торможении μ - мезона в жидком водороде. Мезон «садится» на орбиту, радиус r_n которой равен радиусу орбиты электрона в основном состоянии (см. рис.). Затем происходит каскад переходов мезона $n \rightarrow n - 1 \rightarrow n - 2 \rightarrow \dots \rightarrow 3 \rightarrow 2 \rightarrow 1$.

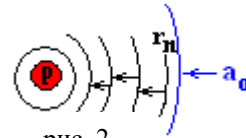


рис. 2

Найдутся ли среди испущенных при переходах квантов кванты видимого диапазона с длиной волны $\lambda \sim 4000 \text{ \AA} - 7000 \text{ \AA}$?

5.25. Какой радиус должно иметь ядро атома водорода, чтобы уровень $n=1$ имел энергию, отличную от уровня энергии $n=1$ боровского атома?

5.26. Сколько уровней энергии может иметь электрон, находясь **внутри** однородно заряженного положительного массивного шара с радиусом $R = 2a_0$ (a_0 – боровский радиус)?

5.27. Найти уровни энергии электрона в поле однородно заряженного положительного массивного шара с радиусом $2a_0$ (a_0 – боровский радиус).

5.28. Какой заряд Z^* должно иметь ядро атома, чтобы орбита мюона погрузилась в ядро? Радиус ядра $R \approx R_0 \cdot A^{1/3}$, $R_0 = 1.2 \cdot 10^{-13}$ см, A - массовое число, считать $A \sim 2.5 \cdot Z$.

5.29. Найти уровни энергии мюона внутри ядра с зарядом $Z > Z^*$ (см. задачу 5.28).

5.30. Сколько уровней энергии может иметь пара частиц с массами m_1 и m_2 , связанных потенциалом $U(r) = -U_0 \exp(-r^2/a^2)$? Сделайте оценку для дейтрона, считая орбиту круговой и полагая $U_0 \sim 35$ МэВ, $a \sim 2 \cdot 10^{-13}$ см.

5.31. Найти (приближенно) низший уровень энергии частицы (масса - m) на круговой орбите в глубокой потенциальной яме вида $U(r) = -U_0 \exp(-r^2/a^2)$, считая $U_0 \gg \hbar^2/2ma^2$.

5.32. Найти уровни энергии частицы (масса - m) в потенциале $U(r) = U_0 \cdot r/a$. Орбиту считать круговой.

5.33. Найти уровни энергии сферически симметричного гармонического осциллятора, $U(r) = kr^2/2$.

5.34. Найти наибольшее возможное значение радиуса круговых орбит частицы (приведенная масса - m) в потенциалах:

$$\text{а) } U(r) = -U_0 \exp\left(-\frac{r^2}{a^2}\right);$$

$$\text{б) } U(r) = -U_0 \cos^2\left(\frac{\pi r}{2a}\right), \quad |r| \leq a.$$

5.35. Правила квантования Бора-Зоммерфельда вводят в задачу Кеплера квантовое число ℓ углового момента $L = \ell \hbar$ и радиальное квантовое число n_r . Радиальный интеграл после приведения к виду

$$n_r h = \oint p_r(r) dr = 2L \int_0^\pi \left(\frac{1}{r(\varphi)} \frac{dr(\varphi)}{d\varphi} \right)^2 d\varphi \quad \text{и интегрирования по траектории}$$

$$r(\varphi) \text{ оказывается равным } n_r h = 2\pi L \left(\frac{1}{\sqrt{1-\varepsilon^2}} - 1 \right); \quad \varepsilon - \text{ эксцентриситет ор-}$$

биты. Выразите энергию допустимых состояний электрона в атоме водорода через квантовые числа ℓ и n_r .

5.36. Найти наименьшее r_{min} и наибольшее r_{max} удаление электрона от ядра в атоме водорода для эллиптической орбиты $n \gg 1$ и моментом импульса, равным $\ell \hbar$.

5.37. Найти наименьшее r_{min} и наибольшее r_{max} удаление электрона от ядра в атоме водорода для эллиптической орбиты $n \gg 1$ и наименьшим моментом импульса, равным \hbar .

5.38. Найти наименьшее r_{min} и наибольшее _____ удаление электрона от ядра в атоме водорода для эллиптической орбиты $n \gg 1$ и моментом им-

пульса, равным $(n-1)\hbar$. Определите величину изменения радиуса $\Delta r = r_{\max} - r_{\min}$.

5.39. Найти наибольшую и наименьшую скорости электрона на орбите с квантовыми числами n и ℓ . Найти также наибольшее возможное значение скорости электрона в атоме водорода (см. 5.7).

5.40. Считая что электрон в атоме излучает классически, найдите время «падения» электрона на ядро. Сравните полученное время с периодом обращения электрона по орбите. Заряд ядра – Z , начальный радиус – $a_0 n^2 / Z$. (сравните с 4.15 и 12.15)

5.41. Используя решение задачи 5.40, найдите время «падения» электрона из состояния с главным квантовым числом n_1 в состояние n_2 . Считайте, что $n_1 \gg n_2 \gg 1$. Заряд ядра – Z . Это время может служить оценкой вероятности перехода в единицу времени.

5.42. Оценить время «падения» мюона на ядро в мюонном атоме водорода, считая, что мюон находится на орбите с номером n . Сравнить полученное время с периодом обращения электрона по орбите и временем жизни мюона $\tau_\mu \cong 2.2 \text{ мкс}$.

5.43. Воспользовавшись условием квантования Бора – Зоммерфельда, определить уровни энергии частицы в одномерной бесконечно глубокой прямоугольной потенциальной яме шириной a .

5.44. Воспользовавшись условием квантования Бора – Зоммерфельда, определить уровни энергии частицы в одномерном гармоническом потенциале $V = m\omega^2 x^2 / 2$.

5.45. Воспользовавшись условием квантования Бора – Зоммерфельда, найти уровни энергии упруго подпрыгивающего шарика с массой m в поле тяготения Земли. Сделайте численную оценку для нейтрона.

II. Основы формализма квантовой механики

6. Основные понятия квантовой механики. Волновая функция. Операторы физических величин. Среднее значение и дисперсия физической величины. Собственные значения и собственные функции операторов физических величин.

1. Состояние микросистемы характеризуется комплексной волновой функцией $\psi(\vec{r}, t)$. Величина $\rho(\vec{r}, t)d^3r = |\psi(\vec{r}, t)|^2 d^3r$ есть вероятность обнаружить частицу в объеме d^3r вблизи точки с координатой \vec{r} в момент времени t .

2. Волновая функция, описывающая какое-либо состояние частицы, нормирована согласно условию:

$$\int |\psi(\vec{r}, t)|^2 d^3r = 1. \quad (6.1)$$

3. Эволюция состояния во времени определяется нестационарным уравнением Шредингера

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\vec{r}, t) + V(\vec{r}, t)\psi(\vec{r}, t). \quad (6.2)$$

4. В квантовой механике каждой физической величине A по некоторому закону ставится в соответствие оператор \hat{A} . Измеряемые в эксперименте значения величины A принадлежат спектру собственных значений оператора \hat{A} .

5. Среднее значение и дисперсия величины A в состоянии $\psi(\vec{r}, t)$:

$$\langle A \rangle = \int \psi^*(\vec{r}, t) \cdot \hat{A}\psi(\vec{r}, t) d^3r, \quad (6.3)$$

$$D_A = \langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle = \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2. \quad (6.4)$$

6. Операторы некоторых физических величин:

координаты $\hat{r} = \vec{r}$, т.е. $\hat{r}\psi(\vec{r}, t) = \vec{r}\psi(\vec{r}, t)$;

импульса $\hat{p} = -i\hbar\nabla$, т.е. $\hat{p}\psi(\vec{r}, t) = -i\hbar\nabla\psi(\vec{r}, t)$;

момента импульса $\hat{L} = [\hat{r} \times \hat{p}] = -i\hbar[\vec{r} \times \nabla]$;

оператор квадрата момента импульса $\hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2 = -\hbar^2 \Delta_{\text{оп}}$, где

$\Delta_{\text{оп}}$ – угловая часть оператора Лапласа;

оператор z - проекции момента импульса (в сферической системе координат) $\hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}$;

$$\text{кинетической энергии } \hat{T} = \hat{p}^2/2m = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 ;$$

$$\text{потенциальной энергии } \hat{V}(\vec{r}, t) = V(\vec{r}, t);$$

$$\text{полной энергии (гамильтониан) } \hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}, t).$$

7. Коммутатором $[\hat{A}, \hat{B}]$ двух операторов \hat{A} и \hat{B} называется оператор $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$. (6.5)

6.1. В некоторый момент времени состояние электрона характеризуется волновой функцией

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{a\sqrt{\pi}}} \exp\left(-\frac{1}{2}(x/a)^2\right).$$

Определить средние значения и дисперсии координаты и импульса электрона.

6.2. Решить предыдущую задачу для состояния частицы, описываемого волновой функцией

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{a\sqrt{\pi}}} \cdot \exp(ik_0x) \cdot \exp\left(-\frac{1}{2} \frac{(x-x_0)^2}{a^2}\right).$$

6.3. Волновая функция основного состояния атома водорода имеет вид $\psi(r) = A \exp(-r/a_0)$, A - нормировочная константа, a_0 - боровский радиус. Определить средние значения потенциальной и кинетической энергии электрона этом состоянии.

6.4. Основное состояние частицы в потенциале одномерного гармонического осциллятора $V(x) = m\omega^2 x^2/2$ описывается волновой функцией $\psi(x) = A \exp\left(-\frac{1}{2}(x/a)^2\right)$, где A - нормировочная константа, $a = \sqrt{\hbar/m\omega}$. Определить средние значения кинетической и потенциальной энергии частицы.

6.5. Определить собственные значения и собственные функции операторов импульса $\hat{p}_x = -i\hbar \frac{d}{dx}$ и z - проекции момента количества движения $\hat{L}_z = -i\hbar \frac{d}{d\varphi}$.

6.6. Определить собственные значения и собственные функции оператора кинетической энергии $\hat{T}_x = \hat{p}_x^2/2m$.

6.7. Записать волновую функцию, описывающую состояние свободной частицы с точно определенными значениями энергии и импульса. Рассмотреть одномерный случай.

6.8. Записать волновую функцию, описывающую состояние свободной частицы с точно определенным значением энергии, но не являющуюся собственной функцией для оператора \hat{p}_x . Чему равно среднее значение p_x в этом случае? Рассмотреть одномерный случай.

6.9. Вычислить значения следующих коммутаторов: $[\hat{x}, \hat{p}_x]$, $[\hat{x}, \hat{p}_y]$.

6.10. Доказать справедливость следующих коммутационных соотношений для оператора момента количества движения

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar\hat{L}_z, \quad [\hat{L}_y, \hat{L}_z] = i\hbar\hat{L}_x, \quad [\hat{L}_z, \hat{L}_x] = i\hbar\hat{L}_y, \quad [\hat{L}^2, \hat{L}_z] = 0.$$

6.11. Доказать, что в центрально симметричном потенциале можно найти стационарные состояния, которые характеризуются точно определенными значениями квадрата L^2 и z - проекции L_z момента количества движения.

6.12. Может ли так быть, что в одном и том же состоянии импульс и полная энергия имеют точно определенные значения?

6.13. Показать, что в системе с аксиальной симметрией (например, электронная подсистема двухатомной молекулы) стационарные состояния можно характеризовать определенным значением проекции орбитального момента на ось системы.

6.14. Показать, что для гауссового волнового пакета произведение дисперсий импульса и координаты минимально.

6.15. Состояние частицы определяется волновой функцией

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{a\sqrt{\pi}}} \cdot \exp(ik_0x) \cdot \exp\left(-\frac{1}{2} \frac{(x-x_0)^2}{a^2}\right).$$

Определить плотность вероятности распределения по импульсу $W(p)$.

6.16. Волновая функция состояния некоторой квантовой системы, как функция полярного угла, имеет вид (B - нормировочная константа):

- а) $\psi(\varphi) = B \cos \varphi$,
- б) $\psi(\varphi) = B \sin^2 3\varphi$,
- в) $\psi(\varphi) = B \cos^4 \varphi$.

Какие значения z -проекции момента количества движения L_z могут быть измерены в этом состоянии? Каковы вероятности их измерения и среднее значение L_z ?

6.17. Волновая функция некоторой системы в сферических координатах определяется выражением (A – нормировочная константа):

- а) $\psi(r, \theta, \varphi) = AR(r) \sin \theta \cos \varphi$,
- б) $\psi(r, \theta, \varphi) = AR(r) \sin(2\theta) \cos(\varphi)$,
- в) $\psi(r, \theta, \varphi) = AR(r) \cos(\theta)(1 + \sin(\theta) \sin(\varphi))$,
- г) $\psi(r, \theta, \varphi) = AR(r)(1 + \cos(\theta))$,
- д) $\psi(r, \theta, \varphi) = AR(r) \sin^2 \theta \sin 2\varphi$,
- е) $\psi(r, \theta, \varphi) = AR(r) (\sin^2 \theta \cos^2 \varphi - \cos 2\theta)$,

причем $\int_0^{\infty} R^2(r) r^2 dr = 1$. Какие значения квадрата и z -проекции момента импульса L^2 и L_z могут быть измерены в этом состоянии? Каковы вероятности их измерения и средние значения?

6.18. Волновая функция некоторой системы в сферических координатах определяется выражением

$$\psi(r, \theta, \varphi) = R(r, \theta) \cdot \frac{\sin \varphi}{\sqrt{\pi}}.$$

Какие значения z - проекции момента количества движения и с какой вероятностью могут быть измерены в этом состоянии? Каковы среднее значение и дисперсия величины L_z ?

6.19. В сферической системе координат (r, θ, φ) волновая функция электрона имеет вид

$$\psi(r, \theta, \varphi) = R(r) \cdot \sqrt{3/4\pi} \cdot \sin \theta \cdot \cos \varphi.$$

Какие и с какой вероятностью значения z -проекции момента количества движения и квадрата момента количества движения могут быть измерены в этом состоянии? Определить среднее значение и дисперсию величин L_z и L^2 .

6.20. При измерении L_z в некотором состоянии получили средние значения а) $\langle L_z \rangle = \hbar/2$; б) $\langle L_z \rangle = 3\hbar/7$; в) $\langle L_z \rangle = -\hbar/2$; г) $\langle L_z \rangle = -4\hbar/5$. Напишите хотя бы одну волновую функцию, которая описывала бы такое состояние системы.

7. Стационарное уравнение Шредингера. Одномерные задачи.

1. Стационарное уравнение Шредингера (дискретный энергетический спектр):

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\varphi_n(\vec{r})+V(\vec{r})\varphi_n(\vec{r})=E_n\varphi_n(\vec{r}), \quad (7.1)$$

где E_n - энергия стационарного состояния, а потенциал $V(\vec{r})$ полагается независимым от времени.

Общий вид волновой функции, описывающей эволюцию стационарного состояния во времени:

$$\psi(\vec{r},t)=\varphi_n(\vec{r})\exp\left(-\frac{i}{\hbar}E_nt\right), \quad (7.2)$$

где $\varphi_n(\vec{r})$ - координатная часть волновой функции.

2. Волновая функция произвольного состояния системы $\Psi(\vec{r})$ может быть представлена в виде линейной комбинации стационарных состояний системы

$$\Psi(\vec{r})=\sum_n C_n\varphi_n(\vec{r}). \quad (7.3)$$

3. Энергетические уровни и волновые функции стационарных состояний одномерного гармонического осциллятора:

$$E_n=\hbar\omega(n+1/2), \quad n=0, 1, 2, \dots$$

$$\varphi_n(x)=N_n H_n(x/a)\exp\left(-\frac{1}{2}(x/a)^2\right), \quad (7.4)$$

где $a=\sqrt{\hbar/m\omega}$, $H_n(\zeta)$ - полином Эрмита, $N_n=(2^n n! a\sqrt{\pi})^{-1/2}$ - нормировочная константа.

7.1. Определить уровни энергии и волновые функции стационарных состояний частицы в одномерной бесконечно глубокой прямоугольной потенциальной яме шириной a . Определить среднее значение координаты частицы в n -м стационарном состоянии.

7.2. Определить координаты наиболее вероятного и наименее вероятного местонахождения частицы внутри бесконечно глубокой одномерной прямоугольной потенциальной ямы (см. задачу 7.1) в состояниях с $n=1, 2$ и 3.

7.3. Частица находится в основном состоянии в одномерной бесконечно глубокой потенциальной яме. Определить значения дисперсий координаты D_x и импульса D_p . Найти произведение дисперсий. Результат сравнить с (6.12).

7.4. Определить уровни энергии и волновые функции стационарных состояний в одномерной прямоугольной потенциальной яме конечной глубины V_0 шириной a . Рассмотреть случай $E < V_0$.

7.5. Частица находится в одномерной прямоугольной потенциальной яме ширины a глубины V_0 . Найти энергию основного состояния в случаях а) $2mV_0a^2/\hbar^2 \ll 1$ и б) $2mV_0a^2/\hbar^2 \gg 1$.

7.6. Определить число уровней в одномерной прямоугольной потенциальной яме глубиной V_0 и шириной a при условии $V_0a^2 = \hbar^2/m$.

7.7. Частица находится в одномерной симметричной потенциальной яме глубиной V_0 и шириной a . Определить условие возникновения n -го стационарного состояния в таком потенциале. Нарисовать распределение $|\psi(x)|^2$ для этого состояния.

7.8. Частица находится в одномерной симметричной потенциальной яме глубиной V_0 шириной a . Определить условия существования n стационарных состояний с отрицательной четностью в таком потенциале. Нарисовать распределение $|\psi(x)|^2$ для любого из них.

7.9. Частица находится в одномерной симметричной потенциальной яме глубиной V_0 шириной a . Определить условия существования n стационарных состояний с положительной четностью в таком потенциале. Нарисовать распределения $|\psi(x)|^2$ для любого из них.

7.10. Электрон находится в одномерной прямоугольной бесконечно глубокой прямоугольной потенциальной яме $V(x) = \begin{cases} \infty, & |x| \geq a/2, \\ 0, & |x| < a/2. \end{cases}$ Написать выражение и найти значение вероятности обнаружить частицу в интервале $(-a/2, a/4)$ в случае, если частица находится на уровне $n = 2$.

7.11. Частица находится в одномерной симметричной глубокой прямоугольной потенциальной яме, содержащей более $N=100$ уровней:

$V(x) = \begin{cases} V_0, & 0 < x, x > a, \\ 0, & 0 < x < a. \end{cases}$ Написать выражение и оценить значение вероятности обнаружить частицу в интервале $(a/8, a/4)$ в случае, если частица находится на уровне $n = 4$.

7.12. Найти предельное значение дисперсии координаты частицы в бесконечно глубокой одномерной потенциальной яме при $n \rightarrow \infty$.

7.13. Частица находится в одномерном потенциале с параметрами V_0 и a (см. рис.1). Найти условие возникновения n -го стационарного состояния в таком потенциале. Нарисовать распределения $|\psi(x)|^2$ для этого состояния.

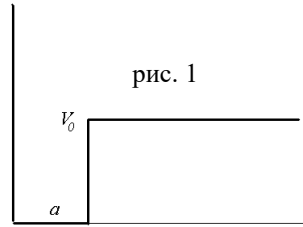


рис. 1

7.14. Частица в одномерной яме конеч-

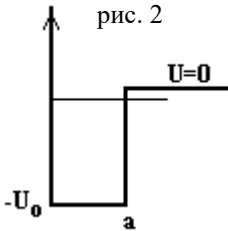


рис. 2

ной глубины с бесконечно высокой стенкой занимает единственный слабосвязанный уровень (см. рис.2) с известной энергией связи $E_b \ll U_0$. Сравните (приблизленно) наиболее вероятное значение координаты x^* и среднее значение координаты $\langle x \rangle$ в этом состоянии. Нарисуйте волновую функцию.

7.15. Частица в одномерной яме конечной глубины с бесконечно высокой стенкой занимает единственный слабосвязанный уровень (см. рис.2). Среднее значение координаты $\langle x \rangle = \alpha a$, $\alpha \gg 1$. Оцените энергию связи. Нарисуйте волновую функцию.

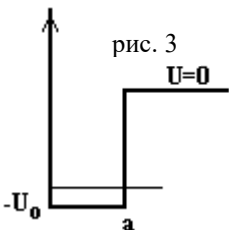


рис. 3

7.16. Частица в «глубокой» одномерной яме (конечной глубины) с бесконечно высокой стенкой занимает низший уровень энергии (рис.3). Оцените, насколько отличается энергия связи от глубины ямы. Нарисуйте волновую функцию.

7.17. Простейшая модель электронной подсистемы молекулы: электрон находится в двуймном потенциале, представленном на рис. 4. Считая, что $2mV_0a^2/\hbar^2 \gg 1$ и $2mV_0b^2/\hbar^2 \gg 1$, определить

уровни энергии и волновые функции двух нижних стационарных состояний.

7.18. Найти волновую функцию электрона, находящегося в произвольном периодическом одномерном потенциале $V(x)$, если известен период этого потенциала a (Теорема Блоха).

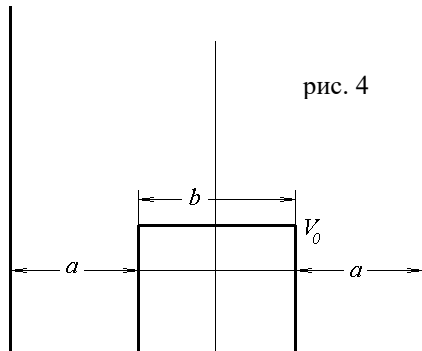
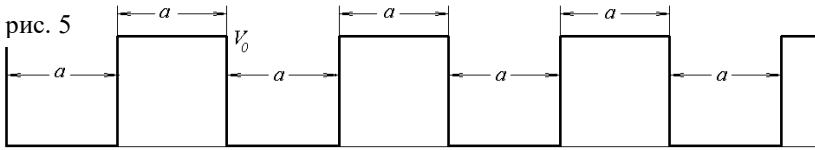


рис. 4

7.19. Рассмотреть движение электрона в одномерной бесконечной



кристаллической решетке, считая потенциальную энергию $V(x)$ равной нулю при $2na < x < (2n+1)a$ и V_0 при $(2n+1)a < x < (2n+2)a$ (n - целое). Пусть $a = 10^{-8}$ см, $V_0 = 5$ эВ. Найти границы разрешенных и запрещенных энергетических зон.

7.20. Найти уровни энергии и волновые функции стационарных состояний в δ -потенциале $V(x) = \frac{\hbar^2}{m} k_0 \delta(x)$. Считать, что $k_0 < 0$.

7.21. Найти границы разрешенных и запрещенных энергетических зон для электрона в потенциале, образованном периодической последовательностью дираковских дельта-функций $V(x) = \frac{\hbar^2}{m} k_0 \delta(x)$, расстояния между которыми равны периоду решетки a (дираковская гребенка). Считать, что $k_0 < 0$.

7.22. Электрон находится в одномерной прямоугольной бесконечно глубокой потенциальной яме шириной a . Найти число энергетических уровней dN , приходящееся на малый энергетический интервал $(E, E+dE)$. Найти плотность состояний (dN/dE) . Сделать численную оценку для $a = 1$ см.

7.23. Найти волновые функции и энергии стационарных состояний частицы в двумерной прямоугольной бесконечно глубокой потенциальной яме размером $a \times b$.

7.24. Найти волновые функции и энергии стационарных состояний частицы в трехмерной прямоугольной бесконечно глубокой потенциальной яме размером $a \times b \times c$.

7.25. Электрон находится в двумерной прямоугольной бесконечно глубокой потенциальной яме, ширина и длина которой равны a . Найти число состояний dN , приходящееся на малый энергетический интервал $(E, E+dE)$, полагая, что уровни расположены густо $((dN/dE) \cdot dE \gg 1)$.

7.26. Электрон находится в трехмерной прямоугольной бесконечно глубокой потенциальной яме, ширина, длина и высота которой равны a . Найти число состояний dN , приходящееся на малый энергетический интервал $(E, E+dE)$, полагая, что уровни расположены густо $((dN/dE) \cdot dE \gg 1)$.

7.27. Частица массы m находится в одномерной прямоугольной яме конечной глубины шириной a . Волновая функция основного состояния в середине ямы в два раза больше, чем на краях ямы. Найти энергию этого состояния.

7.28. Показать, что в произвольном стационарном состоянии одномерного гармонического осциллятора средние значения потенциальной и кинетической энергии равны.

7.29. Для одномерного гармонического осциллятора найти среднее значение кинетической и потенциальной энергии в нижнем стационарном состоянии с нечетной волновой функцией.

7.30. Частица находится в основном состоянии в одномерном гармоническом осцилляторном потенциале. Определить плотность вероятности измерить значение импульса p .

7.31. Волновая функция частицы, находящейся в одномерном осцилляторном потенциале $V = m\omega^2 x^2 / 2$ имеет вид

а) $\psi(x) = Ax^2 \exp(-\frac{1}{2}(x/a)^2)$; б) $\psi(x) = Ax^3 \exp(-\frac{1}{2}(x/a)^2)$; $a = \sqrt{\hbar/m\omega}$.

Определить, какие значения энергии в этих состояниях могут быть измерены.

7.32. Определить среднее значение координаты $\langle x \rangle$ и дисперсию координаты D_x в n -ном стационарном состоянии гармонического осциллятора.

7.33. Измерения энергии в некотором состоянии гармонического осциллятора привели к следующим средним значениям: а) $\langle E \rangle = \frac{2}{3} \hbar\omega$;

б) $\langle E \rangle = \frac{3}{4} \hbar\omega$; в) $\langle E \rangle = \frac{4}{3} \hbar\omega$; г) $\langle E \rangle = \frac{4}{5} \hbar\omega$. Напишите хотя бы одну волновую функцию, которая описывала бы такое состояние системы.

7.34. Частица находится в одномерной прямоугольной бесконечно глубокой потенциальной яме и в некоторый момент времени характеризуется волновой функцией $\psi(x) = \alpha\psi_n(x) + \beta\psi_k(x)$, где ψ_k, ψ_n - волновые функции стационарных состояний с энергиями E_k и E_n , а α и β - некоторые комплексные числа, причем $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$. Определить средние значения $\langle E \rangle$, координаты $\langle x \rangle$ и квадрата координаты $\langle x^2 \rangle$ в этот момент времени.

8. Туннельный эффект.

1. Волновая функция удовлетворяет уравнению непрерывности:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div}(\vec{j}) = 0 \quad (8.1)$$

где $\rho(\vec{r}, t) = |\psi(\vec{r}, t)|^2$ – плотность вероятности,

$$\vec{j} = \frac{\hbar}{2mi} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) = \operatorname{Re} \left(\psi^* \frac{\hat{\mathbf{p}}}{m} \psi \right) \text{ – плотность потока вероятности.}$$

2. Прозрачность потенциального барьера с профилем $V(x)$ в квазиклассическом приближении ($D \ll 1$):

$$D \approx \exp\left(-\frac{2}{\hbar} \int \sqrt{2m(V(x) - E)} dx\right), \quad (8.2)$$

где E – полная энергия частицы, а интеграл берется по области классически запрещенного движения.

8.1. Определить плотность потока вероятности для частицы, характеризуемой волновой функцией $\psi(x) = A \exp(ikx)$. В чем физический смысл такой волновой функции?

8.2. Определить величину плотности тока вероятности для состояния $\psi(x) = A \exp(ikx) + B \exp(-ikx)$.

8.3. Найти величину плотности тока вероятности для следующих волновых функций:

а) $\psi(x) = A(\exp(ikx) + \exp(-ikx))$

б) $\psi(x) = A(\exp(ikx) - \exp(-ikx))$

в) $\psi(x) = A(\exp(ikx) + i \exp(-ikx))$,

г) $\psi(x) = A(\exp(ikx) + 0.5 \cdot \exp(-ikx))$

д) $\psi(x) = A(\exp(ikx) - 0.5 \cdot \exp(-ikx))$.

Нарисовать пространственные распределения плотности вероятности и плотности тока вероятности.

8.4. Поток частиц с энергией E рассеивается на прямоугольной потенциальной ступеньке $V(x) = \begin{cases} 0, & x < 0, \\ V_0, & x \geq 0. \end{cases}$ Определить вероятности про-

хождения и отражения при различных соотношениях E и V_0 . Нарисовать графики зависимости $|\psi(x)|^2$ для случаев «подбарьерного» $E < V_0$ и «надбарьерного» $E > V_0$ движения.

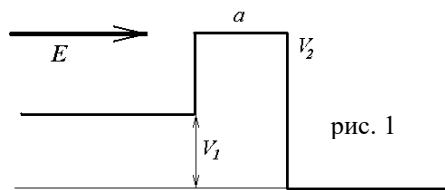
8.5. Поток частиц с энергией E рассеивается на прямоугольной потенциальной ступеньке высоты V_0 : $V(x) = \begin{cases} 0, & x < 0, \\ V_0, & x \geq 0. \end{cases}$ Определить зависимость коэффициентов прохождения и отражения от энергии частиц. Рассмотреть случаи $V_0 > 0$ и $V_0 < 0$.

8.6. Поток частиц с энергией E движется через прямоугольный потенциальный барьер ширины a и высоты V_0 . Определить коэффициенты прохождения T и отражения R в случае $E = V_0$. Нарисовать графики функций $T(a)$ и пространственного распределения плотности вероятности $|\psi(x)|^2$.

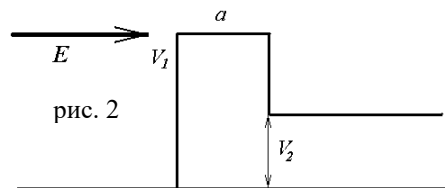
8.7. Поток частиц с энергией E рассеивается на прямоугольном потенциальном барьере шириной a и высотой V_0 ($E = V_0$). Определить разность фаз волновой функции (плоской волны), набираемую при прохождении волной потенциального барьера. Объяснить физический смысл этой разности фаз.

8.8. Поток частиц с энергией E рассеивается на прямоугольном потенциальном барьере шириной a и высотой V_0 ($E < V_0$). Общее решение для волновой функции внутри прямоугольного потенциального барьера имеет вид $\psi(x) = A \exp(-\kappa x) + B \exp(\kappa x)$, где $\kappa = \sqrt{2m(V_0 - E)/\hbar^2}$, а A и B - некоторые комплексные числа. Записать выражение для плотности потока вероятности в области подбарьерного движения.

8.9. Поток частиц налетает слева на потенциальный барьер, причем энергия частиц равна высоте барьера $E = V_2$ (см. рис. 6). Определить коэффициент прохождения и нарисовать распределение плотности вероятности $|\psi(x)|^2$ во всем пространстве.



8.10. Поток частиц налетает слева на потенциальный барьер, причем энергия частиц равна высоте барьера $E = V_1$ (см. рис. 7). Определить коэффициент прохождения и нарисовать распределение плотности вероятности $|\psi(x)|^2$ во всем пространстве.





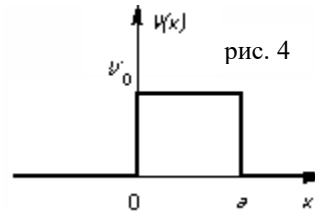
8.12. Поток частиц с энергией E налетает на потенциальный барьер треугольной формы, имеющий высоту V_0 и ширину у основания a . Оценить коэффициент прохождения D в случае $E < V_0$. Как зависит величина D от положения вершины барьера.

8.13. Поток частиц с энергией E налетает на потенциальный барьер треугольной формы, имеющий высоту V_0 и ширину у основания a , $E < V_0$. При каком положении вершины барьера коэффициент прохождения D окажется а) минимальным; б) максимальным.

8.14. Для частицы массы m и энергии E рассчитать вероятность туннелирования через потенциальный барьер в виде дельта-функции Дирака

$$V(x) = \frac{\hbar^2}{m} V_0 \delta(x), \quad V_0 > 0.$$

8.15. Поток частиц с энергией E пролетает через потенциальный барьер высотой V_0 и шириной a , причем $E > V_0$. (см. рис.4) Определить энергии, при которых коэффициент прохождения D равен единице (резонанс прозрачности). Построить график $D(E/V_0) = 1 - R$.

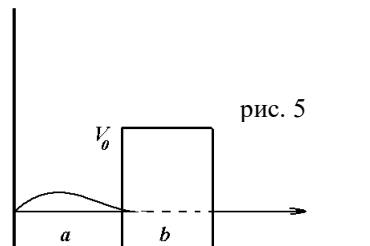


8.16. Предполагая, что α – распад атомного ядра с зарядом Z есть результат туннелирования α – частицы через кулоновский барьер, созданный ядром-остатком ($Z_1 = Z - 2$), определить зависимость вероятности α – распада от энергии образующейся α – частицы.

8.17. Оценить период полураспада для α – радиоактивных ядер перечисленных элементов. Энергии E_α вылетающих α – частиц соответственно равны: а) ${}_{92}^{238}\text{U}$ ($E_\alpha=4.2$ МэВ); б) ${}_{94}^{242}\text{Pu}$ ($E_\alpha=4.8$ МэВ); в) ${}_{83}^{212}\text{Bi}$ ($E_\alpha=6.2$ МэВ); г) ${}_{86}^{222}\text{Rn}$ ($E_\alpha=6.6$ МэВ);

8.18. Определить зависимость тока холодной эмиссии с поверхности металла от величины электрического поля E .

8.19. Частица массы m находится в потенциальной яме, отделенной прямоугольным потенци-



альным барьером от области инфинитного движения (см. рис.5), причем выполнены условия $2mV_0a^2/\hbar^2 \gg 1$, $2mV_0b^2/\hbar^2 \gg 1$. Показать, что вероятность обнаружить частицу внутри ямы будет убывать по экспоненциальному закону $W \sim \exp(-\gamma t)$ и найти величину γ – вероятность туннелирования в единицу времени.

8.20. Электрон находится в основном стационарном состоянии в прямоугольной потенциальной яме конечной глубины (глубина ямы – V_0 , ширина – a), причем $2mV_0a^2/\hbar^2 \gg 1$. Оценить скорость (вероятность в единицу времени) туннелирования электрона из ямы при помещении системы в слабое однородное постоянное электрическое поле с напряженностью E .

8.21. Оценить скорость ионизации атома в низкочастотном электромагнитном поле. Указание: Решить задачу (8.20) в предположении, что электрическое поле зависит от времени по закону $E = E_0 \sin \omega t$, и провести усреднение по периоду колебаний.

9. Движение в центрально симметричном потенциальном поле.

Задача Кеплера. Атом водорода.

1. Волновые функции стационарных состояний в произвольном центрально-симметричном поле

$$\Psi_{n,\ell,m}(\vec{r}) = R_{n\ell}(r)Y_{\ell m}(\theta, \varphi), \quad (9.1)$$

где $R_{n\ell}(r)$ - радиальная волновая функция, $Y_{\ell m}(\theta, \varphi)$ - сферическая функция, причем

$$\ell = 0, 1, 2, \dots, n-1;$$

$$m = -\ell, -(\ell-1), \dots, 0, \dots, \ell-1, \ell.$$

Приняты следующие обозначения

$$\ell = 0, 1, 2, 3, 4, 5, 6, \dots$$

$$s, p, d, f, g, h, i, \dots$$

2. Кеплерова задача: $V(r) = -Ze^2/r$.

Дискретные уровни энергии:

$$E_n = -Z^2 \frac{m e^4}{2 \hbar^2} \frac{1}{n^2} = -Z^2 \frac{Ry}{(n_r + \ell + 1)^2}, \quad (9.2)$$

$n = n_r + \ell + 1$ - главное квантовое число.

Общее представление для радиальной волновой функции:

$$R_{n\ell}(r) = r^\ell \exp\left(-\frac{Zr}{na_0}\right) (b_0 + b_1 r + b_2 r^2 + \dots + b_{n_r} r^{n_r}), \quad (9.3)$$

$n_r = n - (\ell + 1)$ - число узлов радиальной волновой функции. В частности,

$$R_{10}(\xi) = 2 \exp(-\xi),$$

$$R_{20}(\xi) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(1 - \frac{1}{2} \xi\right) \exp(-\xi/2), \quad R_{21}(\xi) = \frac{1}{2\sqrt{6}} \xi \exp(-\xi/2),$$

$$R_{30}(\xi) = \frac{2}{3\sqrt{3}} \left(1 - \frac{2}{3} \xi + \frac{2}{27} \xi^2\right) \exp(-\xi/3),$$

$$R_{31}(\xi) = \frac{8}{27\sqrt{6}} \xi \left(1 - \frac{1}{6} \xi\right) \exp(-\xi/3), \quad R_{32}(\xi) = \frac{4}{81\sqrt{30}} \xi^2 \exp(-\xi/3).$$

Здесь $\xi = Zr/a_0$

9.1. Показать, что в центрально-симметричном потенциале $V(r)$ положение энергетических уровней определяется одномерным уравнением Шредингера для радиальной волновой функции с потенциалом

$V_{\text{eff}}(r) = V(r) + \hbar^2 \ell(\ell + 1)/2mr^2$, где ℓ - орбитальное квантовое число, m - масса частицы. Определить кратность вырождения уровня с заданным значением орбитального момента ℓ .

9.2. Для частицы, находящейся в произвольном центрально-симметричном поле, записать общий вид волновых функций с орбитальным квантовым числом ℓ и z - проекцией орбитального момента $L_z = \hbar m$.

9.3. Частица массы m находится в центрально-симметричном потенциале $V(\vec{r}) = V(|\vec{r}|)$. Написать общее выражение для волновой функции состояния с точно определенным значением z - проекции момента количества движения. Может ли такое состояние быть стационарным (нестационарным)?

9.4. Частица массы m находится в центрально-симметричном потенциале $V(\vec{r}) = V(|\vec{r}|)$. Написать общее выражение для волновой функции состояния с точно определенным значением квадрата момента количества движения. Может ли такое состояние быть стационарным (нестационарным)?

9.5. Определить энергии s -состояний в трехмерной сферически симметричной прямоугольной яме бесконечной глубины.

9.6. Определить энергии s -состояний в трехмерной сферически симметричной прямоугольной яме конечной глубины.

9.7. Определить условие существования хотя бы одного связанного s - состояния частицы в сферически симметричной прямоугольной потенциальной яме радиусом R и глубиной V_0 . Полученный результат сравнить с оценкой по соотношению неопределенностей (см. задачу (3.29)).

9.8. Показать, что волновая функция системы из двух взаимодействующих частиц может быть представлена в виде произведения волновых функций, описывающих их относительное движение и движение центра масс. Считать, что взаимодействие частиц является центральным.

9.9. Аппроксимируя взаимодействие протона и нейтрона в дейтроне сферически-симметричной прямоугольной потенциальной ямой с радиусом $R = 2 \cdot 10^{-13}$ см, найти глубину этой ямы, если известно, что в ней существует единственное связанное состояние с энергией связи $E_b \approx 2.2$ МэВ. Оценить среднее значение расстояния между протоном и нейтроном.

9.10. Определить энергии и волновые функции стационарных s - состояний частицы в потенциале $V = m\omega^2 r^2/2$ (трехмерный изотропный гармонический осциллятор).

9.11. Определить энергетический спектр и волновые функции стационарных состояний трехмерного изотропного гармонического осциллято-

ра $V = m\omega^2 r^2/2$. Указание: Задачу удобнее решать в декартовой системе координат.

9.12. Состояние частицы в сферически симметричном (трехмерном) гармоническом осциллятором потенциале $V = m\omega^2 r^2/2$ задается функциями

$$\text{а) } \psi(x, y, z) = Axy \exp(-r^2/2a^2),$$

$$\text{б) } \psi(x, y, z) = Ayz \exp(-r^2/2a^2),$$

$$\text{в) } \psi(x, y, z) = Ax^2 \exp(-r^2/2a^2),$$

где $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$, $a = \sqrt{\hbar/m\omega}$. Определить какие значения энергии, квадрата момента и величины z - проекции момента могут быть измерены в этом состоянии.

9.13. Стационарные состояния пространственного гармонического осциллятора в декартовой системе координат характеризуются тремя квантовыми числами: n_x , n_y , n_z . Для состояния $\psi(n_x = 0, n_y = 1, n_z = 0)$ найти, какие значения квадрата момента импульса L^2 и z -проекции момента L_z могут быть измерены и с какой вероятностью.

9.14. Стационарное состояние электрона в атоме водорода характеризуется волновой функцией $\psi_{n\ell m}$ с квантовыми числами $n = 3, \ell = 2, m = -2$. Какие физические величины принимают в этом состоянии точное значение и чему они равны?

9.15. Написать волновую функцию для электрона атома водорода, находящегося в состоянии с $n = 2$, орбитальным моментом $|L| = \hbar\sqrt{2}$ и z -проекцией орбитального момента не равной нулю. Найти во сколько раз среднее значение потенциальной энергии электрона в этом состоянии отличается от среднего значения потенциальной энергии в основном состоянии.

9.16. Найти среднее значение кинетической энергии для электрона в атоме водорода в состоянии с $n = 3$, $|L| = \hbar\sqrt{6}$ и максимально возможным значением L_z .

9.17. Какую минимальную энергию может иметь электрон в ионе He^+ , имеющий орбитальное квантовое число $\ell = 3$?

9.18. Каким может быть наибольшее значение орбитального квантового числа ℓ электрона в атоме водорода, имеющего энергию связи $-Ry/16$?

9.19. Энергия электрона в ионе He^+ равна $E = -Ry$. Какими могут быть значения орбитального квантового числа ℓ ?

9.20. Какую минимальную энергию может иметь в атоме водорода d – электрон?

9.21. Сравнить вероятности захвата электронов с K – и L - оболочек тяжелым ядром с зарядом Z .

9.22. Определить среднее и наиболее вероятное удаление электрона от ядра в основном состоянии атома водорода.

9.23. Определить среднее и наиболее вероятное удаление электрона от ядра в основном состоянии водородоподобного иона с зарядом Z .

9.24. Определить среднее и наиболее вероятное удаление электрона от ядра в атоме водорода в состоянии $2s$ и $2p$.

9.25. Найти дисперсию удаления электрона от ядра в атоме водорода в состояниях $2s$ и $2p$.

9.26. Вычислить среднее значение кинетической и потенциальной энергии для электрона в атоме водорода в состоянии $3p$, $m = 0$.

9.27. Найти средние значения величин $\langle r \rangle$, $\langle 1/r \rangle$, $\langle r^2 \rangle$ в состоянии $3d$ атома водорода.

9.28. Изобразить радиальную часть волновой функции $R_{nl}(r)$ и плотность вероятности найти электрон на заданном удалении от ядра $\rho_{n\ell}$ в атоме водорода в состояниях: а) $5s \dots 5g$; б) $4s \dots 4f$; в) $3s \dots 3d$.

9.29. Найти среднее $\langle r \rangle$ и наиболее вероятное r^* удаление электрона от ядра в состояниях в состояниях $n, \ell = n - 1$.

9.30. В сферической системе координат электрон в атоме водорода характеризуется волновой функцией

$$\text{а) } \psi(r, \theta, \varphi) = 1/\sqrt{2} (\psi_{2,1,1} + \psi_{2,1,-1}), \quad \text{б) } \psi(r, \theta, \varphi) = \left(\frac{1}{\sqrt{3}} \psi_{1,0,0} + \sqrt{\frac{2}{3}} \psi_{3,1,0} \right),$$

$$\text{в) } \psi(r, \theta, \varphi) = 1/\sqrt{3} (\psi_{2,1,0} + \psi_{2,1,1} + \psi_{2,1,-1}),$$

$$\text{г) } \psi(r, \theta, \varphi) = \left(\frac{1}{\sqrt{6}} \psi_{2,1,1} + \frac{1}{\sqrt{6}} \psi_{2,1,-1} + \sqrt{\frac{2}{3}} \psi_{2,0,0} \right).$$

где $\psi_{n,\ell,m}$ - волновая функция стационарного состояния с квантовыми числами n, ℓ, m . Какие, и с какой вероятностью значения энергии и z – проекции момента количества движения могут быть измерены в этом состоянии?

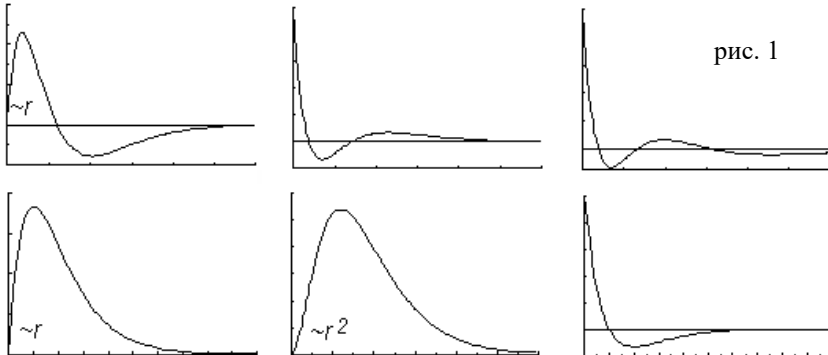
9.31. Определить средние значения x и z – проекций координаты, импульса и момента импульса электрона в состояниях $1s$, $2p, m = 1$, $3d, m = 2$ водородоподобного иона с зарядом Z .

9.32. Водородоподобный ион с зарядом Z находится в основном состоянии. Определить вероятность обнаружить электрон на расстоянии $r > a_0/Z$ от ядра (a_0 – боровский радиус).

9.33. Водородоподобный ион с зарядом Z находится в основном состоянии. Определить вероятность обнаружить электрон на расстоянии $r < a_0/Z$ от ядра (a_0 – боровский радиус).

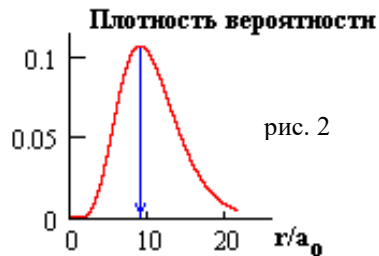
9.34. Частица находится в центрально-симметричном потенциале $V(r) = kr^2/2$, $k > 0$ в состоянии с точно определенным значением z -проекции орбитального момента $\ell_z = 4\hbar$. Определите минимально возможное значение квадрата момента импульса частицы в этом состоянии и зависимость волновой функции от азимутального угла φ .

9.35. На рис.1 представлены радиальные волновые функции некоторых стационарных состояний электрона в атоме водорода. Определить



квантовые числа n и ℓ .

9.36. На рис.2 изображено распределение плотности вероятности по радиусу для электрона в атоме водорода; максимум распределения расположен на радиусе $r_{\text{max}} = 9a_0$, a_0 – радиус первой боровской орбиты. Определите состояние – квантовые числа n и ℓ .



9.37. Определить электростатический потенциал, создаваемый в пространстве атомом водорода в состоянии $1s$.

9.38. Определить энергии стационарных состояний заряженной бесспиновой частицы в кулоновском потенциале $V(r) = -e^2/r$ при наложении внешнего однородного магнитного поля.

10. Основы стационарной теории возмущений. Системы из многих частиц.

1. Теория возмущений.

Пусть ε_n, φ_n - собственные значения и ортонормированные собственные функции гамильтониана \hat{H}_0 , т.е.

$$\hat{H}_0 \varphi_n = \varepsilon_n \varphi_n, \tag{10.1}$$

причем

$$\int \varphi_m^* \varphi_n d\tau = \delta_{mn}. \tag{10.2}$$

Тогда собственные значения и собственные функции гамильтониана $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$ (\hat{V} - «малое» возмущение) в первом порядке теории возмущений записываются в виде

$$E_n \cong \varepsilon_n + \langle \varphi_n | \hat{V} | \varphi_n \rangle, \tag{10.3}$$

$$\Phi_n \cong \varphi_n + \sum_{m \neq n} \frac{\langle \varphi_m | \hat{V} | \varphi_n \rangle}{\varepsilon_n - \varepsilon_m} \varphi_m. \tag{10.4}$$

Здесь $\langle \varphi_m | \hat{V} | \varphi_n \rangle = V_{mn} = \int \varphi_m^* \hat{V} \varphi_n d\tau$ - матричный элемент оператора \hat{V} .

2. Формула тонкой структуры (Дирака) характеризует смещение уровня энергии в водородоподобном ионе с зарядом Z , обусловленное релятивистскими эффектами, относительно положения предсказываемого нерелятивистской теорией $E_n = -Z^2 Ry/n^2$:

$$\Delta E_{nj} = \frac{\alpha^2 Z^2}{n} \cdot E_n \cdot \left(\frac{1}{j+1/2} - \frac{3}{4n} \right), \tag{10.5}$$

где $\alpha = e^2/\hbar c$ - постоянная тонкой структуры, j - квантовое число полного момента количества движения, $\alpha Z \ll 1$.

3. Волновая функция системы из двух электронов должна быть антисимметрична относительно их перестановки местами (принцип Паули):

$$\psi(\tau_1, \tau_2) = -\psi(\tau_2, \tau_1) \tag{10.6}$$

где τ_1, τ_2 - совокупности координат, пространственных и спиновых, определяющих состояние электрона.

В случае если гамильтониан системы не содержит слагаемых, зависящих одновременно от пространственных и спиновых переменных, волновая функция электрона представима в виде произведения координатной и спиновой частей:

$$\psi(\tau) = \varphi(\bar{r})\chi(\sigma).$$

Поэтому в случае двухэлектронной волновой функции принципу Паули удовлетворяют следующие комбинации:

а) пространственная волновая функция симметрична:

$$\varphi(\bar{r}_1, \bar{r}_2) = \varphi(\bar{r}_2, \bar{r}_1),$$

спиновая - антисимметрична (полный спин $S = 0$):

$$\chi(\sigma_1, \sigma_2) = -\chi(\sigma_2, \sigma_1),$$

б) пространственная волновая функция антисимметрична:

$$\varphi(\bar{r}_1, \bar{r}_2) = -\varphi(\bar{r}_2, \bar{r}_1),$$

спиновая - симметрична (полный спин $S = 1$):

$$\chi(\sigma_1, \sigma_2) = \chi(\sigma_2, \sigma_1).$$

Для системы из двух **невзаимодействующих** электронов координатная часть волновой функции (симметричная (+) и антисимметричная (-) функции) имеет вид:

$$\begin{aligned} \varphi_{\pm}(\bar{r}_1, \bar{r}_2) &= \frac{1}{\sqrt{2}}[\varphi_1(\bar{r}_1)\varphi_2(\bar{r}_2) \pm \varphi_1(\bar{r}_2)\varphi_2(\bar{r}_1)] = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}[\varphi_1(\bar{r}_1)\varphi_2(\bar{r}_2) + (-1)^S \varphi_1(\bar{r}_2)\varphi_2(\bar{r}_1)], \quad (10.7) \end{aligned}$$

φ_1 , φ_2 - одноэлектронные волновые функции.

10.1. Заряженная частица находится в гармоническом потенциале $\hat{H}_0 = \hat{T} + m\omega^2 x^2/2$. Как изменятся энергии стационарных состояний при включении слабого однородного электрического поля?

10.2. Воспользовавшись теорией возмущений, определить поправку к энергиям стационарных состояний одномерного гармонического осциллятора $V(x) = kx^2/2$, обусловленную малым изменением постоянной упругой связи k ($|\delta k| \ll k$). Полученный результат сравнить с точным решением задачи.

10.3. Частица находится в ангармоническом потенциале $V(x) = m\omega^2 x^2/2 + \alpha x^4$. Найти поправку к уровню энергии а) $n=0$ б) $n=1$ в первом порядке теории возмущений.

10.4. Оценить изменение энергии уровней и среднего значения координаты заряженной частицы, находящейся в основном состоянии в одномерной бесконечно глубокой прямоугольной потенциальной яме, при медленном включении слабого однородного электрического поля. Начало отсчета координаты - в середине ямы. Определить дипольный электрический момент и поляризуемость системы.

10.5. Найти поправку к энергии основного состояния водородоподобного иона, обусловленную конечным размером ядра, заряд которого Ze считать равномерно распределенным внутри сферы с радиусом $R \ll a_0/Z$.

10.6. Оценить поправки к энергиям $2s$ и $2p$ состояний водородоподобного иона с зарядом Z , связанную с конечным размером атомного ядра. Считать, что заряд по ядру распределен равномерно.

10.7. Оценить величину энергетического сдвига основного состояния атома водорода при его помещении в постоянное однородное электрическое поле (эффект Штарка).

10.8. В рамках первого порядка теории возмущений по межэлектронному взаимодействию, определить энергию основного состояния и потенциал ионизации атома гелия и однократно заряженного иона лития. Показать, что в этом приближении существование отрицательного иона водорода H^- невозможно.

10.9. В приближении самосогласованного поля Хартри каждый из электронов в атоме движется в электростатическом поле, создаваемом ядром с зарядом Z и совокупностью $Z-1$ электронов. Считая, что плотность заряда, создаваемая в пространстве электроном есть $e|\psi(r,t)|^2$, получить уравнение для волновой функции электронов в основном состоянии атома гелия.

10.10. В рамках приближения Хартри получить систему уравнений для волновой функции, описывающей $1s2p$ конфигурацию атома гелия.

10.11. Используя формулу тонкой структуры найти отношение энергий тонкого расщепления $4p$ и $4f$ уровней атома водорода.

10.12. Используя формулу тонкой структуры найти отношение энергий тонкого расщепления $2p$ и $3p$ уровней атома водорода.

10.13. Найти тонкое расщепление $\Delta\lambda$ головной линии серии Лаймана в шкале длин волн в ряду водородоподобных ионов $H, He^+, Li^{++} \dots$. Ядра считать бесконечно тяжелыми.

10.14. Мюон ($m_\mu \cong 207m_e$) находится в поле тяжелого атомного ядра ($Z = 92, A = 238$). Определить приближенный вид волновой функции основного состояния и оценить потенциал ионизации такой системы. Считать распределение заряда в пределах ядра равномерным. Радиус ядра связан с его массовым числом соотношением $R \cong 1.2 \cdot 10^{-13} \cdot A^{1/3}$ см.

10.15. Оценить потенциал ионизации водородоподобного иона с зарядом $Z \gg 1$, взяв за основу модель атома Томсона. Размер области положительного заряда $R_0 = 1 \text{ \AA}$.

10.16. Определить энергетический спектр и волновые функции стационарных состояний системы связанных линейных гармонических осцилляторов с гамильтонианом $\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2 + \alpha(x_1 - x_2)^2$, где $\hat{H}_i = \hat{T}_i + m\omega_0^2 x_i^2 / 2$ - гамильтониан гармонического осциллятора с частотой ω_0 , α - константа связи.

10.17. Используя теорию возмущений, найти энергию и волновую функцию основного состояния системы из двух связанных линейных осцилляторов, описываемую гамильтонианом $\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2 + \alpha(x_1 - x_2)^2$. Результат сравнить с точным решением (см. задачу 10.16).

10.18. Найти энергию и волновую функцию основного состояния системы из двух связанных линейных осцилляторов, описываемую гамильтонианом $\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2 + \alpha(x_1 - x_2)^2$, в приближении самосогласованного поля Хартри. Результат сравнить с точным решением (см. задачу 10.17).

10.19. В атоме трития ядро ${}^3_1\text{H}$ испытывает β - распад с образованием ядра ${}^3_2\text{He}$. Определить вероятность того, что образующийся водородоподобный ион гелия будет находиться в основном состоянии. Какова будет вероятность его возбуждения в $2s$ и $2p$ состояния? Указание: Поскольку образующийся при β - распаде электрон является быстрым, изменение заряда ядра можно считать мгновенным.

10.20. Частица массы m находится в основном состоянии в одномерном гармоническом потенциале с частотой ω . В результате некоторого внешнего мгновенного воздействия частица приобретает среднее значения импульса p_0 . Определить вероятность обнаружить частицу в n -ном стационарном состоянии и полную вероятность возбуждения.

10.21. В одномерной бесконечно глубокой прямоугольной потенциальной яме основной уровень занят одним электроном. На какие уровни можно поместить второй электрон с той же проекцией спина?

10.22. В одномерной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками на уровнях с квантовыми числами $n=1$ и $n=2$ находятся два электрона. Для случаев полного спина $S = 0$ и $S = 1$ постройте пространственную двухэлектронную волновую функцию, соответственно, антисимметричную и симметричную относительно перестановки электронов. Укажите (приблизительно) координаты наиболее вероятного расположения электронов. Взаимодействием электронов пренебречь. Найдите для этих случаев пространственное распределение плотности электрического заряда.

10.23. В условиях предыдущей задачи найдите средний квадрат расстояния между электронами в состояниях с полным спином $S = 0$ и 1 .

10.24. Пренебрегая межэлектронным взаимодействием, построить волновые функции двухэлектронной конфигурации $1s2p$. Найти средние значения величины $\langle 1/|\vec{r}_1 - \vec{r}_2| \rangle$ (обратного расстояния) между электронами в синглетном и триплетном состояниях.

10.25. В потенциальной яме трехмерного изотропного гармонического осциллятора $V = m\omega^2 r^2/2$ находятся восемь одинаковых ферми-частиц (спин $- 1/2$). Пренебрегая их взаимодействием между собой, определить энергию основного состояния такой системы. Как изменится эта энергия при добавлении еще одной такой же частицы?

10.26. Оцените среднюю энергию электронов в вырожденном электронном газе с плотностью $N_e \sim 10^{23} \text{ см}^{-3}$. Взаимодействием электронов пренебречь.

10.27. Оцените величину давления идеального вырожденного электронного газа с плотностью $N_e \sim 10^{23} \text{ см}^{-3}$.

10.28. Показать, что для вырожденного электронного газа степень его идеальности возрастает с увеличением плотности.

10.29. В модели Томаса-Ферми многоэлектронный атом представляет собой систему, в которой давление вырожденного электронного ферми-газа уравнивается силами кулоновского притяжения к ядру. Определить зависимость размера атома от заряда Z .

10.30. Белый карлик – звезда, в которой давление вырожденного электронного газа уравнивает гравитационные силы. Полагая распределение плотности по радиусу звезды однородным, оценить равновесный размер такой системы. Массу звезды считать равной массе Солнца $M = 2 \cdot 10^{33} \text{ г}$.

10.31. В нейтронной звезде давление вырожденного нейтронного газа уравнивает гравитационные силы. Полагая распределение плотности по радиусу звезды однородным, оценить равновесный размер такой системы. Массу звезды считать равной массе Солнца $M = 2 \cdot 10^{33} \text{ г}$.

10.32. Соотношение неопределенностей и предельный размер звезды: Исходя из соотношения неопределенностей, оценить предельную массу звезды, удерживаемую давлением вырожденного ферми-газа нуклонов от гравитационного коллапса («предел Chandrasekara»).

11. Нестационарное уравнение Шредингера.

1. Волновая функция системы $\psi(\vec{r}, t)$ удовлетворяет нестационарному уравнению Шредингера:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + V(\vec{r}, t) \psi(\vec{r}, t). \quad (11.1)$$

2. В случае если потенциал $V(\vec{r})$ не зависит от времени, общее решение уравнения (1) может быть записано в виде

$$\psi(\vec{r}, t) = \sum_n C_n \varphi_n(\vec{r}) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_n t\right), \quad (11.2)$$

где φ_n и E_n - собственные функции и собственные значения гамильтониана $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r})$. Коэффициенты разложения C_n определяются как

$$C_n = \int \psi_0(\vec{r}) \varphi_n^*(\vec{r}) d^3 r, \quad (11.3)$$

где $\psi_0(\vec{r}) = \psi(\vec{r}, t = 0)$ - волновая функция в начальный (нулевой) момент времени.

3. Среднее значение и дисперсия физической величины A в состоянии $\psi(\vec{r}, t)$:

$$\langle A(t) \rangle = \int \psi^*(\vec{r}, t) \hat{A} \psi(\vec{r}, t) d^3 r, \quad (11.4)$$

$$D_A(t) = \langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle = \langle A^2(t) \rangle - \langle A(t) \rangle^2. \quad (11.5)$$

11.1. Частица массы m находится в одномерной бесконечно глубокой прямоугольной потенциальной яме, шириной a в основном состоянии. Записать выражение для волновой функции частицы $\psi(x, t)$ в произвольный момент времени.

11.2. Частица массы m находится в одномерной прямоугольной потенциальной яме конечной глубины V_0 и шириной a в основном состоянии. Записать выражение для волновой функции частицы $\psi(x, t)$ в произвольный момент времени. Собственные функции оператора Гамильтона считать известными.

11.3. Линейный гармонический осциллятор находится в основном состоянии. Записать выражение для волновой функции частицы $\psi(x, t)$ в произвольный момент времени.

11.4. Показать, что для частицы, движущейся в потенциальном поле $V(x, t)$, справедливо утверждение (теорема Эренфеста)

$$\frac{d\langle p_x \rangle}{dt} = -\left\langle \frac{\partial V(x, t)}{\partial x} \right\rangle.$$

Здесь p_x - x -проекция импульса частицы, а скобки означают усреднение по квантовому состоянию.

11.5. Показать, что для частицы, движущейся в потенциальном поле $V(x)$, среднее по квантовому состоянию значение импульса удовлетворяет соотношению $\langle p_x \rangle = m \frac{d\langle x \rangle}{dt}$. Здесь $\langle x \rangle$ - среднее значение координаты, m - масса частицы.

11.6. Частица массы m находится в поле постоянной силы F_0 и в начальный момент времени имеет средние значения координаты и импульса, равные x_0 и p_0 соответственно. Определить средние значения импульса и координаты в последующие моменты времени.

11.7. Показать, что для частицы, движущейся в гармоническом потенциале $V = m\omega^2 x^2/2$, изменение во времени среднего значения координаты $\langle x(t) \rangle$ определяется классическим законом движения.

11.8. Заряженная частица массы m находится в основном состоянии в осцилляторном потенциале $V = m\omega^2 x^2/2$. В некоторый момент времени «включается» однородное постоянное электрическое поле с напряженностью E_0 . Определить среднее по квантовому состоянию значение координаты частицы в зависимости от времени.

11.9. Состояние свободной частицы (электрона) в начальный момент времени $t = 0$ характеризуется волновой функцией

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{a\sqrt{\pi}}} \cdot \exp(ik_0 x) \cdot \exp\left(-\frac{1}{2} \frac{(x-x_0)^2}{a^2}\right).$$

В этот момент времени «включается» однородное постоянное электрическое поле с напряженностью E_0 . Найти среднее значение координаты частицы, как функцию времени $\langle x(t) \rangle$. Результат сравнить со случаем свободного движения частицы.

11.10. В начальный момент времени состояние частицы в одномерном гармоническом потенциале с частотой ω задается волновой функцией $\psi(x, t = 0) = (\varphi_0(x) + \varphi_1(x))/\sqrt{2}$. Здесь $\varphi_0(x)$ и $\varphi_1(x)$ - волновые функции двух нижних стационарных состояний. Определить временные зави-

симости пространственного распределения плотности вероятности, а также среднего значения координаты и дисперсии координаты частицы.

11.11. В начальный момент времени состояние частицы в одномерном гармоническом потенциале задается волновой функцией $\psi(x, t = 0) = (\varphi_0(x) + \varphi_2(x)) / \sqrt{2}$. Здесь $\varphi_0(x)$ и $\varphi_2(x)$ - волновые функции двух нулевого и второго возбужденного стационарных состояний. Определить временные зависимости пространственного распределения плотности вероятности, а также среднего значения координаты и дисперсии координаты частицы.

11.12. Волновая функция частицы, находящейся в осцилляторном потенциале, в момент времени $t = 0$ определяется выражением

$$\phi(x) = \sqrt{2/3} \cdot \frac{1}{\sqrt{a\sqrt{\pi}}} \cdot (1 + x/a) \cdot \exp\left(-\frac{1}{2}(x/a)^2\right),$$

где $a^2 = \hbar / m\omega$. Определить среднее значение координаты и дисперсии координаты частицы, как функцию времени.

11.13. Волновая функция частицы, находящейся в одномерной прямоугольной бесконечно глубокой потенциальной яме шириной a (точка $x = 0$ находится в центре ямы) в момент времени $t = 0$ определяется выражением

$$\phi(x) = A \cdot \cos(\pi x/a) (1 + \sin(\pi x/a)),$$

A - нормировочная константа. Определить среднее значение координаты частицы, как функцию времени.

11.14. В начальный момент времени ($t = 0$) волновая функция частицы, находящейся в осцилляторном потенциале с частотой ω , имеет вид $\psi(x) = (\psi_0 - 2\sqrt{2}\psi_2) / 3$. Найти распределение плотности вероятности $\rho = |\psi(x, t)|^2$, а также средние значения координаты $\langle x \rangle$ и энергии состояния $\langle E \rangle$ в произвольный момент времени. Здесь $\psi_n(x), n = 0, 1, 2, \dots$ - собственные функции оператора Гамильтона в осцилляторном потенциале.

11.15. В бесконечно глубокой прямоугольной одномерной потенциальной яме волновая функция в начальный момент времени имеет вид $\psi(x, t = 0) = (\phi_1(x) + \phi_3(x)) / \sqrt{2}$. Как изменяются во времени среднее значение координаты частицы $\langle x(t) \rangle$ и дисперсия координаты; каково среднее значение энергии $\langle E(t) \rangle$? $\phi_n(x)$ - собственные функции, E_n - соответствующие собственные значения оператора Гамильтона, $n = 1, 2, 3, \dots$.

11.16. В бесконечно глубокой прямоугольной одномерной потенциальной яме среднее значение координаты частицы $\langle x(t) \rangle$ осциллирует с частотой $\omega = 3E_1 / \hbar$. Напишите выражение для волновой функции и плот-

ности вероятности в произвольный момент времени. E_I – энергия низшего уровня. Как изменяется во времени дисперсия координаты $D_x(t) = \langle x^2(t) \rangle - \langle x(t) \rangle^2$?

11.17. В начальный (нулевой) момент времени волновая функция линейного гармонического осциллятора имеет вид $\psi(x) = (\alpha\psi_0(x) + \beta\psi_1(x))$, здесь $\psi_n(x)$ – волновая функция стационарного состояния осциллятора, α, β – действительные числа, причем $\alpha^2 + \beta^2 = 1$. Какие, и с какой вероятностью значения энергии могут быть измерены в этом состоянии? Как зависит от времени распределение плотности вероятности обнаружить частицу в различных точках пространства?

11.18. Одномерная симметричная ($U(-x) = U(x)$) потенциальная яма содержит всего три уровня. Среднее значение координаты частицы осциллирует с некоторой частотой ω : $\langle x \rangle = A \cos \omega t$; $A = \text{const}$. Уровни энергии $E_{1,2,3}$ и собственные функции $\phi_{1,2,3}(x)$ оператора Гамильтона считать известными. Определить возможные значения частоты; написать возможные выражения волновых функций в произвольный момент времени.

11.19. Одномерная симметричная ($U(-x) = U(x)$) потенциальная яма содержит всего три уровня. С какой частотой (частотами) может осциллировать среднее значение координаты частицы $\langle x(t) \rangle$? Уровни энергии $E_{1,2,3}$ и собственные функции $\phi_{1,2,3}(x)$ оператора Гамильтона считать известными.

11.20. Одномерная симметричная ($U(-x) = U(x)$) потенциальная яма содержит всего три уровня. Среднее значение координаты частицы: $\langle x(t) \rangle = 0$. Дисперсия координаты осциллирует $D_x = c_1 + c_2 \cos \omega t$; c_1, c_2 – постоянные. Уровни энергии $E_{1,2,3}$ и собственные функции $\phi_{1,2,3}(x)$ оператора Гамильтона считать известными. Найти частоту и написать возможное выражение волновой функции в произвольный момент времени.

11.21. Пусть в одномерной потенциальной яме $U(x) = -U_0 \exp(-x^2/a^2)$ содержится всего 3 уровня (см. рис). Энергии уровней $E_{1,2,3}$ и волновые функции $\phi_{1,2,3}(x)$ – известны. Какие значения

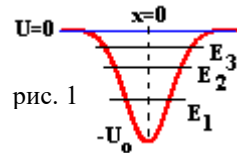


рис. 1

частоты (частот) осцилляций среднего значения координаты $\langle x(t) \rangle$ можно наблюдать в такой системе? Нарисуйте качественный вид волновых функций $\phi_{1,2,3}(x)$.

11.22. Состояние частицы в одномерном гармоническом потенциале в начальный момент времени характеризуется некоторой функцией $\phi(x)$. Найти временной закон изменения квантовых средних $\langle x(t) \rangle$ и $\langle x^2(t) \rangle$, вычисляемых по нестационарной волновой функции $\psi(x,t)$, полученной из решения нестационарного уравнения Шредингера.

11.23. Написать волновую функцию состояния атома водорода, в котором среднее значение энергии равно $-Ry/2$. Как в этом состоянии плотность вероятности $|\psi|^2$ зависит от времени?

11.24. Написать волновые функции хотя бы двух различных состояний атома водорода, в которых среднее значение энергии равно $-Ry/4$. Как в этих состояниях плотность вероятности $|\psi|^2$ зависит от времени? Может ли состояние с такой средней энергией быть нестационарным?

11.25. В начальный (нулевой) момент времени состояние электрона в атоме водорода задано волновой функцией $\psi(\vec{r}) = (\psi_{2s} + \psi_{2p,m=0})/\sqrt{2}$, здесь ψ_{2s} и $\psi_{2p,m=0}$ - волновые функции стационарных состояний. Какие, и с какой вероятностью значения энергии могут быть измерены в этом состоянии? Как зависит от времени радиальное распределение плотности вероятности обнаружить частицу в различных точках пространства и среднее значение z - проекции координаты $\langle z(t) \rangle$ (дипольный электрический момент)?

11.26. В начальный (нулевой) момент времени состояние электрона в атоме водорода задано волновой функцией $\psi(\vec{r}) = (\psi_{1s} + \sqrt{2}\psi_{2s})/\sqrt{3}$, здесь ψ_{1s} и ψ_{2s} - волновые функции стационарных состояний. Какие, и с какой вероятностью значения энергии могут быть измерены в этом состоянии? Как зависит от времени распределение плотности вероятности обнаружить частицу в различных точках пространства, а также средние значения энергии $\langle E \rangle$ и z - проекции координаты $\langle z(t) \rangle$ (дипольный электрический момент)?

11.27. Волновая функция электрона в кулоновском потенциале имеет вид: $\psi(\vec{r}, t) = C \exp\left(-\frac{r}{r_1} - \frac{iE_1 t}{\hbar}\right)$. Найти константы C , r_1 , E_1 , если известно, что потенциал создан точечным неподвижным зарядом Ze .

12. Нестационарная теория возмущений. Взаимодействие квантовой системы с электромагнитным полем.

1. В электрическом дипольном приближении оператор взаимодействия атомной системы с полем электромагнитной волны записывается как

$$\hat{W}(\vec{r}, t) = -(\vec{d}\vec{\epsilon}(t)), \quad (12.1)$$

где \vec{d} - электрический дипольный момент системы, $\vec{\epsilon}$ - электрическое поле волны, полагаемое пространственно однородным.

2. Амплитуда вероятности перехода за время t из некоторого начального стационарного состояния φ_i атомного гамильтониана \hat{H}_0 в конечное состояние φ_f , обусловленного внешним воздействием на систему $\hat{W}(\vec{r}, t)$, в первом порядке теории возмущений есть

$$C_{fi}(t) = -\frac{i}{\hbar} \int_{t^*}^t \langle \varphi_f | \hat{W}(\vec{r}, t) | \varphi_i \rangle \exp(i\omega_{fi}t) dt = i \frac{\vec{d}_{fi}}{\hbar} \int_{t^*}^t \vec{\epsilon}(t) \exp(i\omega_{fi}t) dt, \quad (12.2)$$

где $\omega_{fi} = (E_f - E_i)/\hbar$ - частота перехода, \vec{d}_{fi} - матричный элемент оператора дипольного момента, t^* - некоторый начальный момент времени.

Во втором порядке:

$$C_{fi}^{(2)}(t) = \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \sum_n \int_{t^*}^t dt' \langle \varphi_f | \hat{W}(\vec{r}, t') | \varphi_n \rangle \exp(i\omega_{fn}t') \int_{t^*}^{t'} dt'' \langle \varphi_n | \hat{W}(\vec{r}, t'') | \varphi_i \rangle \exp(i\omega_{ni}t''), \quad (12.3)$$

где суммирование проводится по всем промежуточным состояниям системы.

3. Коэффициент Эйнштейна вынужденного перехода определяется таким образом, что $B_{fi}I_\omega$ - вероятность вынужденного (индуцированного) перехода $i \rightarrow f$ в единицу времени; I_ω - спектральная интенсивность излучения на частоте перехода .

4. Спонтанные переходы. Коэффициент Эйнштейна спонтанного перехода из начального состояния φ_i в состояние φ_f :

$$A_{fi} = \frac{4\omega^3}{3\hbar c^3} |d_{fi}|^2. \quad (12.4)$$

Здесь $\omega = (E_i - E_f)/\hbar$ - частота перехода.

5. Связь между коэффициентами Эйнштейна

$$A_{fi} = \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^2} B_{fi}. \quad (12.5)$$

6. Естественная ширина линии перехода $2 \rightarrow 1$

$$\Delta\nu \cong 1/\tau_1 + 1/\tau_2, \quad (12.6)$$

τ_1, τ_2 - среднее время жизни атома на уровнях 1 и 2; если уровень 1 - основной $\tau_1 = \infty$.

7. Сечение фотопоглощения монохроматического излучения с частотой ω в центре линии перехода $1 \rightarrow 2$, характеризующейся лоренцевым контуром с шириной γ :

$$g(\omega) = \frac{\gamma/2\pi}{(\omega - \omega_0)^2 + \gamma^2/4} :$$

$$\sigma_{21} = \frac{\lambda^2}{2\pi} \frac{A_{12}}{\delta\nu} \quad (12.7)$$

здесь $\delta\nu = \gamma$ - ширина спектральной линии, $\lambda = 2\pi c/\omega$. В случае, если

ширина является естественной $\delta\nu = A_{12}$, и $\sigma_{21} = \frac{\lambda^2}{2\pi}$. При этом

$$\int g(\omega)d\omega = 1.$$

8. Столкновительное уширение приводит к лоренцевой форме линии с шириной $\gamma \approx \nu$, ν - частота столкновений.

12.1. Электрон находится в бесконечно глубокой прямоугольной потенциальной яме в основном состоянии. В первом порядке теории возмущений определить вероятность возбуждения лазерным импульсом прямоугольной формы с интенсивностью I и длительностью τ . Считать, что частота излучения удовлетворяет условиям $\omega_0\tau \gg 1$, $|\omega_{21} - \omega_0|/\omega_0 \ll 1$. Здесь $\omega_{21} = (E_2 - E_1)/\hbar$ - частота перехода между основным и нижним возбужденным состояниями.

12.2. Решить задачу 12.1 в предположении гауссовой формы лазерного импульса $E = E_0 \exp\left(-\frac{t^2}{2\tau^2}\right) \cos(\omega_0 t)$. Считать, что $\omega_0\tau \gg 1$,

$|\omega_{21} - \omega_0|/\omega_0 \ll 1$. Как и почему вероятность возбуждения зависит от длительности лазерного импульса?

12.3. Электрон находится в бесконечно глубокой прямоугольной потенциальной яме в основном состоянии. Во втором порядке теории возмущений оценить вероятность возбуждения лазерным импульсом прямоугольной формы с интенсивностью I и длительностью τ . Считать, что частота излучения удовлетворяет условиям $\omega_0\tau \gg 1$, $|\omega_{31} - 2\omega_0|/\omega_0 \ll 1$. Здесь $\omega_{31} = (E_3 - E_1)/\hbar$ - частота перехода между состояниями $|1\rangle$ и $|3\rangle$.

12.4. Определить вероятность фотоионизации атома водорода в состоянии $1s$ линейно поляризованным импульсом излучения гауссовой формы $E = E_0 \exp\left(-\frac{t^2}{2\tau^2}\right) \cos(\omega_0 t)$. Считать, что $\omega_0\tau \gg 1$ и $\hbar\omega_0 \gg |E_{1s}|$.

Указание: Состояния электрона в континууме аппроксимировать плоской волной де Бройля.

12.5. Для двухуровневого атома найти зависимость от времени волновой функции и среднего дипольного момента $\langle d \rangle = e\langle z \rangle$ при воздействии на него линейно поляризованного поля с частотой ω_0 . В начальный момент времени система невозбуждена. Рассмотреть случаи мгновенного и адиабатически плавного включения поля. При адиабатически плавном включении поля считать, что напряженность электрического поля изменяется по закону

$$\varepsilon(t) = \begin{cases} \varepsilon_0 e^{\lambda t} \cos\omega_0 t, & t < 0, \quad \lambda \rightarrow 0 \\ \varepsilon_0 \cos\omega_0 t, & t > 0. \end{cases}$$

12.6. Электрон находится в гармоническом потенциале с частотой ω_0 в состоянии с минимальной энергией. Определить средний по квантовому состоянию дипольный момент системы в электромагнитном поле с частотой $\omega \neq \omega_0$. Сравнить результаты квантового и классического решения задачи в случае мгновенного и адиабатически медленного включения поля.

12.7. Определить поляризуемость среды, разреженного газа с концентрацией атомов N , в электромагнитном поле с частотой ω близкой к частоте атомного перехода $\omega \approx \omega_0$. Считать атомы среды гармоническими осцилляторами с частотой ω_0 . Полученный результат сравнить с классическим решением задачи. Считать, что поле включается адиабатически медленно. В отсутствие поля атомы находятся в основном состоянии.

12.8. В первом порядке теории возмущений определить поляризуемость среды, разреженного газа, состоящего из невозбужденных атомов водорода, в низкочастотном электромагнитном поле $\hbar\omega \ll I_i$ (I_i - потен-

циал ионизации), концентрация атомов - N . Считать, что поле включается адиабатически медленно.

12.9. Показать, что для произвольной квантовой системы с центрально-симметричным потенциалом квадратичная восприимчивость, определяющая отклик системы на удвоенной частоте воздействующего поля, равна нулю.

12.10. Атом водорода находится в основном состоянии $1s$. В какие возбужденные состояния $|n\ell m\rangle$ в дипольном приближении разрешены переходы в линейно поляризованном электромагнитном поле? Тонкую структуру спектра не учитывать. Указание: Ось квантования орбитального момента направить вдоль вектора электрического поля волны.

12.11. Атом водорода находится в основном состоянии $1s$. В какие возбужденные состояния $|n\ell m\rangle$ в дипольном приближении разрешены переходы в циркулярно поляризованном электромагнитном поле? Тонкую структуру спектра не учитывать. Указание: Ось квантования орбитального момента направить вдоль волнового вектора поля волны.

12.12. Квантовая система с центрально-симметричным потенциалом подвергается воздействию поля электромагнитной волны с линейной поляризацией. Сформулировать правила отбора для переходов, разрешенных во втором порядке теории возмущений.

12.13. В дипольном приближении определить вероятности спонтанных переходов между стационарными состояниями частицы с зарядом e в гармоническом потенциале.

12.14. В дипольном приближении определить вероятности спонтанных переходов между нижним возбужденным и основным стационарными состояниями электрона в трехмерной бесконечно глубокой прямоугольной потенциальной яме размером $a \times a \times a$.

12.15. Определить время спонтанного перехода $2p \rightarrow 1s$ в водородоподобном ионе с зарядом ядра Z . Как время жизни зависит от заряда ядра? (Сравните с 5.40).

12.16. Оценить естественную ширину головной линии серии Лаймана в спектре атома водорода.

12.17. Оценить время спонтанного перехода между компонентами сверхтонкой структуры основного состояния атома водорода. (Длина волны перехода $\lambda = 21$ см). Указание: Данный переход является магнитно-дипольным, поэтому в выражении для вероятности перехода вместо матричного элемента электрического дипольного момента стоит матричный элемент магнитного дипольного момента системы.

12.18. Оценить время жизни $2p$ состояния атома лития относительно спонтанного распада. Длина волны перехода $2p \rightarrow 2s$ составляет $\lambda = 6707$ Å.

12.19. Оценить характерное время жизни возбужденного атомного ядра относительно излучения γ -кванта. Считать, что $E_\gamma \approx 1$ МэВ, и γ -переход разрешен в электрическом дипольном приближении.

12.20. Показать, что в атоме гелия в электрическом дипольном приближении переходы между синглетными и триплетными состояниями запрещены (запрет интеркомбинаций).

12.21. Сравните газокинетическое сечение атома натрия $\sigma \approx 6 \cdot 10^{-16}$ см² с сечением фотопоглощения его резонансной линии $\lambda = 5890$ Å. Атом считать изолированным и неподвижным.

12.22. Оптический резонатор состоит из двух параллельных плоских зеркал (коэффициенты отражения – $r_1 = 0.95$, $r_2 = 0.98$), между которыми находится оптически активное вещество. Каким должен быть его коэффициент усиления k , чтобы излучение после одного обхода резонатора

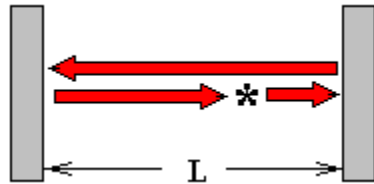


рис.1

(см. рис.1) вернулось бы в исходную точку (*) с интенсивностью, не меньшей, нежели была при старте. Длина резонатора $L = 100$ см.

12.23. Чему равна пороговая инверсная населенность ΔN в рубиновом лазере с длиной волны излучения $\lambda = 6943$ Å, если его резонатор длиной $L = 10$ см имеет зеркала с коэффициентами отражения $r_1 = 1$, $r_2 = 0.98$? Ширина спектральной линии $\Delta k = 11.2$ см⁻¹, время жизни верхнего уровня $\tau \approx 10^{-3}$ с.

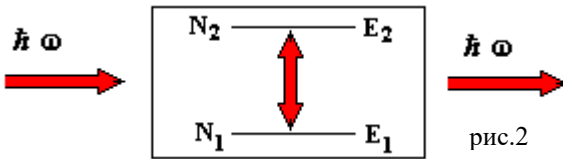


рис.2

Определяется только в двух энергетических состояниях: E_1 - основном и E_2 - возбужденном; $E_2 - E_1 = \hbar\omega$ (см. рис.2); б) уровни невырождены; в) распределение их по уровням – бoльцмановское; г) при прохождении излучения через вещество имеет место лишь поглощение фотонов и индуцированное излучение.

12.25. Можно ли, возбуждая излучением двухуровневые атомы (см. задачу 12.21), создать инверсную населенность?

12.26. Полагая, что расходимость лазерного пучка в основном обусловлена дифракционными эффектами, оцените плотность мощности W

12.24. Определить коэффициент поглощения излучения k на частоте ω , полагая, что: а) атомы газа могут находиться

лазерного излучения вблизи фокуса идеальной собирающей линзы (фокусное расстояние $f = 10$ см). Мощность лазера $P = 1$ МВт, диаметр его пучка $d = 1$ см, длина волны излучения $\lambda = 1$ мкм.

12.27. Для создания стандартов частоты (длины) необходимо иметь излучение неподвижных и невзаимодействующих атомов. Одним из способов создания такого “вещества” является остановка пучка атомов встречным излучением лазера, настроенного на частоту резонансного перехода в атоме (эффект Доплера компенсируется перестройкой частоты излучения лазера). Поглощая встречные кванты излучения лазера и спонтанно испуская их в произвольном направлении при обратном переходе, атомы замедляются до весьма малых скоростей. Сколько квантов должен поглотить атом массой M и начальной скоростью v до полной остановки? Какой должна быть интенсивность излучения лазера ($\text{Вт}/\text{см}^2$), чтобы остановить атомы за минимальное время и на минимальной длине? Какова величина ускорения атома? Оценки произведите для атомов натрия с начальной скоростью 10^5 см/с. Эффективное сечение индуцированного излучения примите равным $\sigma = (\lambda/2\pi)^2$; $\lambda = 5890$ Å. Время жизни возбужденного состояния $\tau = 2 \cdot 10^{-8}$ с.

III. Строение электронной оболочки атома

13. Многоэлектронные атомы. Атомные оболочки и подоболочки.

Электронная конфигурация. Сложение угловых моментов. Терм атома. Правила Хунда.

1. Состояние электрона в центрально-симметричном потенциале в многоэлектронном атоме определяется четырьмя квантовыми числами эти числа суть:

n - главное квантовое число;

ℓ - квантовое число орбитального момента импульса;

m_ℓ - проекция орбитального момента на выделенное направление;

m_s - проекция спина электрона на выделенное направление;

Вместо последней пары чисел могут быть введены:

j - квантовое число полного момента импульса электрона;

m_j - проекция полного момента импульса электрона на выделенное направление.

2. **Принцип Паули:** В физической системе, состоящей из многих ферми-частиц, в одном состоянии не может находиться более одного фермиона. Его альтернативная формулировка: Волновая функция системы фермионов должна изменять знак (быть антисимметричной) при перестановке двух фермионов.

3. **Оболочка** - совокупность электронов с одинаковым значением главного квантового числа n .

4. **Подоболочка** - совокупность электронов с одинаковыми значениями главного и орбитального квантовых чисел n и ℓ . Электроны одной подоболочки называются **эквивалентными**.

Орбитальный момент электрона обозначается буквой в соответствии со схемой:

Момент $\ell = 0 \ 1 \ 2 \ 3 \ 4 \ 5 \ 6 \ \dots$

Обозначение состояния $s \ p \ d \ f \ g \ h \ i \ \dots$

5. **Электронная конфигурация** - распределение электронов по оболочкам и подоболочкам - квантовым числам n и ℓ .

Обозначение группы из k электронов с квантовым числом орбитального момента ℓ и главным квантовым числом:

$$n\ell^k,$$

число ℓ обозначается буквой в соответствии с приведенной выше схемой.

6. Число электронов в заполненной подоболочке (число состояний в подоболочке) равно $2(2\ell+1)$.

7. Число электронов в заполненной оболочке (число состояний в оболочке) равно:

$$\sum_{\ell=0}^{n-1} 2(2\ell+1) = 2n^2 \quad (13.1)$$

8. Общее правило сложения моментов импульса. Квантовое число суммарного момента импульса $\vec{J} = \vec{j}_1 + \vec{j}_2$ принимает следующие значения:

$$J = |j_1 - j_2|, |j_1 - j_2| + 1, \dots, j_1 + j_2 - 1, j_1 + j_2. \quad (13.2)$$

9. Типы связей моментов в атоме.

Нормальная LS –связь: $\vec{L} = \sum \vec{\ell}_i$; $\vec{S} = \sum \vec{s}_i$; $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$;

$$jj\text{-связь: } \vec{j}_i = \vec{\ell}_i + \vec{s}_i; \quad \vec{J} = \sum \vec{j}_i; \quad (13.3)$$

суммирование проводится по всем электронам конфигурации, квантовые числа суммарных моментов находятся по общему правилу. Ниже везде, за исключением специально оговоренных случаев, будем иметь в виду LS –связь.

10. Заполнение одноэлектронных состояний регламентируется следующим правилом:

а) энергия одноэлектронных состояний $n\ell$ возрастает вместе с ростом $(n+\ell)$;

б) в группе состояний с одинаковым значением суммы $n+\ell$ энергия одноэлектронных состояний $n\ell$ возрастает вместе с ростом n .

11. В заданной электронной конфигурации квантовые числа L и S определяют ее **терм**.

Обозначение термина: заглавной буквой обозначается квантовое число L в соответствии со схемой (сравни с обозначением одноэлектронных состояний):

Момент	L= 0 1 2 3 4 5 6 ...
Обозначение термина	S P D F G H I ...

Слева вверху указывается мультиплетность термина, равная, **по определению**, $2S+1$. Таким образом, **обозначение термина** есть:

$${}_{2S+1}L$$

Терм характеризуется также **четностью** конфигурации, которой он принадлежит; она равна

$$P = (-1)^{\sum \ell_i}; \quad (13.4)$$

алгебраическое суммирование по всем электронам конфигурации.

12. Правила Хунда – правила, позволяющие определить основной терм (терм с наименьшей энергией) в заданной электронной конфигурации.

1) Среди термов, принадлежащих к одной конфигурации, наиболее глубоким (имеющим наименьшую энергию) является терм с наибольшим возможным в этой конфигурации значением полного спина S ;

2) Среди термов с одинаковым спином S наиболее глубоким является терм с наибольшим значением полного орбитального момента L .

13.1. Найдите значения суммарного орбитального момента в следующих электронных конфигурациях

$$nsn's, sp, sd, npn'p, pd, pf, df.$$

13.2. Найдите значения суммарного орбитального момента в трехэлектронной конфигурации pdf . Сравните различные последовательности сложения $pd(L')f$, $pf(L')d$, $df(L')p$, L' – квантовое число промежуточного момента, т. е. суммарного орбитального момента первых двух электронов.

13.3. Найдите термы двухэлектронной конфигурации pd ; укажите четность термов.

13.4. Найдите термы трехэлектронной конфигурации pdf ; укажите четность термов (см. задачу 13.2.).

13.5. Найдите термы двух неэквивалентных p -электронов; укажите четность термов.

13.6. Сколько эквивалентных p -электронов, d -электронов и f -электронов могут находиться в одной оболочке? Каковы главные квантовые числа этих оболочек?

13.7. Определите термы заполненной подоболочки и заполненной оболочки.

13.8. Найдите терм конфигурации, состоящей из единственного электрона поверх заполненной подоболочки. Например: s^2p ; $d^{10}s$; s^2f .

13.9. Составьте конфигурацию почти заполненной подоболочки p -электронов – заполненной подоболочки с одной «дыркой», «вынутым» электроном. Какие элементы периодической системы имеют такие конфигурации наружных электронов? Найдите термы такой подоболочки. Сделайте то же самое для подоболочек d - и f - электронов.

13.10. Найдите термы конфигураций эквивалентных электронов p^2 (атомы C, Si, Ge, Sn) и d^2 (атомы Ti, Zr, Gf) (сравн. с задачей 13.5).

13.11. Сравните термы двухэлектронных конфигураций p^2 и d^2 с термами двухдырочных конфигураций p^4 и d^8 (см задачу 13.10).

13.12. Найдите низшие термы (имеющие наименьшую энергию) конфигураций p^2 и d^2 (см. задачу 13.10).

13.13. Найдите низшие термы двухдырочных конфигураций p^4 и d^8 , сравните их с термами двухэлектронных конфигураций p^2 и d^2 (см задачу 13.12).

13.14. Найдите электронную конфигурацию и низший терм невозбужденного атома азота ($Z=7$).

13.15. Найдите низший терм электронной конфигурации d^3 (атомы ванадия V, тантала Ta, нильсбория Ns).

13.16. Найдите термы возбужденного атома углерода; возбужденный электрон находится в одном из состояний ns , np , или nd , $n > 2$. Укажите четность термов.

13.17. Найдите термы возбужденного атома азота; возбужденный электрон находится в одном из состояний ns , np , или nd , $n > 2$. Укажите четность термов. Сначала найдите *терм атомного остатка* (иона), состоящего из эквивалентных электронов – *родительский терм*, затем сложите моменты возбужденного электрона с моментами родительского терма.

13.18. Показать, что механические, а, следовательно, и магнитные моменты L , S , J , μ_L , μ_S , μ_J замкнутых оболочек и подоболочек равны нулю.

13.19. Один из электронов атома гелия имеет главное квантовое число $n=2$. Записать возможные электронные конфигурации и термы.

13.20. Показать, что терм 3S_1 атома He не может быть основным.

13.21. Определить основное состояние атома марганца (электронная конфигурация $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^5 4s^2$) и иона Mn^{++} (удалены $4s$ электроны).

13.22. Построить основные электронные конфигурации двухзарядного иона аргона и атома кальция.

13.23. Записать конфигурации и определить основные состояния атомов цинка и стронция.

13.24. Определите основное состояние атома хрома, электронная конфигурация которого $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^5 4s$.

13.25. Определите основной терм атомов, электронная конфигурация незаполненной оболочки которых d^3 и d^7 .

13.26. Найти основной терм и основное состояние атома в электронных конфигурациях d^5 , f^7 .

13.27. Найти основной терм и основное состояние атома в электронной конфигурации d^6 , f^8 .

13.28. Найти основной терм атома, электронная конфигурация незаполненной оболочки которого $4f^6 6s^2$ (самарий Sm).

13.29. Установите основной терм атома, электронная конфигурация незаполненной оболочки которого $4f^7 5d 6s^2$ (гадолиний Gd).

13.30. Напишите электронные конфигурации первых десяти элементов таблицы Менделеева. Воспользовавшись правилами Хунда, определите их основные термы.

13.31. Напишите электронные конфигурации элементов таблицы Менделеева с $Z=11-20$. Воспользовавшись правилами Хунда, определить их основные термы.

13.32. Среди первых двадцати элементов таблицы Менделеева выделите элементы, у которых основной терм является синглетом. Запишите соответствующие электронные конфигурации.

13.33. Среди первых двадцати элементов таблицы Менделеева выделите элементы, у которых основным является S-терм. Запишите соответствующие электронные конфигурации. Определите мультиплетность термина.

13.34. В атоме углерода один из электронов из $2p$ -подоболочки находится в состоянии с главным квантовым числом $n = 3$. Записать все возможные электронные конфигурации и соответствующие им термы.

13.35. Определить все возможные термы возбужденного атома лития с электронной конфигурацией $1s^1 2s^1 3s^1$. Какой терм в данной конфигурации имеет наименьшую энергию?

13.36. В приближении LS связи определить термы, принадлежащие конфигурации np^3 .

13.37. Известно, что число состояний данной электронной конфигурации не зависит от типа связи. Покажите это на примере $np\ n'd$ – конфигурации для LS - и jj -связей. Запишите соответствующие спектроскопические обозначения.

13.38. В изоэлектронной последовательности гелиеподобных ионов ($He, Li^+, Be^{2+}, \dots, U^{90+}$) определить заряд ядра Z , при котором нормальная LS связь сменяется jj связью.

13.39. Определить возможные термы и состояния, принадлежащие электронным конфигурациям $npn^1 p$ и np^2 , в приближении LS и jj связей.

13.40. В сильно возбужденных состояниях атомов встречается так называемая jl -связь. Порядок сложения моментов определяемый взаимодействиями в атоме, следующий:

$$\vec{J} = (\vec{j} + \vec{\ell}) + \vec{s} = \vec{K} + \vec{s}.$$

Здесь \vec{J} – момент импульса атома, \vec{j} – атомного остатка, $\vec{\ell}$ – орбитальный момент возбужденного электрона \vec{s} – его спин, \vec{K} – промежуточный момент. Найдите значение J для возбужденного p -электрона, если $j = 3/2$.

13.41 Определить количество различных (линейно независимых) многоэлектронных волновых функций в электронных конфигурациях p^2 , p^3 , d^2 , d^3 .

14. Тонкая и сверхтонкая структура атомных спектров.

1. Если не учитывать спин-орбитальное взаимодействие, все уровни одного термина, имеющие разные значения полного момента импульса, **вырождены**. Спин-орбитальное взаимодействие расщепляет терм в мультиплет в соответствии с правилом Ланде:

- если подболочка заполнена менее чем наполовину, наименьшую энергию имеет уровень с наименьшим значением J - нормальный мультиплет;

- если подболочка заполнена более чем наполовину, наименьшую энергию имеет уровень с наибольшим значением J - обращенный мультиплет.

- если подболочка заполнена ровно наполовину - терм нерасщеплен (существует единственное состояние с заданным J).



Оператор спин-орбитального взаимодействия в атоме записывается в виде $\hat{V}_{LS} = A(\hat{L}\hat{S})$, где \hat{L} и \hat{S} - операторы орбитального и спинового моментов электронной оболочки атома, A - константа связи моментов, определяемая видом волновой функции многоэлектронного атома, описывающей заданный терм. Спин-орбитальное взаимодействие приводит к сдвигу уровня с полным моментом J относительно нерасщепленного термина

$$\Delta E_J = \frac{A}{2}(J(J+1) - L(L+1) - S(S+1)). \quad (14.1)$$

Правило интервалов Ланде регламентирует расщепление термина в мультиплет:

$$\Delta E_{J,J-1} = A J;$$

$A > 0$, если $k < 2\ell + 1$, нормальный мультиплет;

$A < 0$, если $k > 2\ell + 1$, обращенный мультиплет;

$A = 0$, если $k = 2\ell + 1$, терм нерасщеплен;

k - число электронов в конфигурации ℓ^k .

2. Сверхтонкая структура уровня возникает в результате взаимодействия магнитного момента электронной оболочки атома с магнитным моментом атомного ядра. Это взаимодействие может быть записано в виде

$\hat{V} = B \left(\hat{J}\hat{I} \right)$, где \hat{J} , \hat{I} - операторы механического момента электронной оболочки атома и спина ядра соответственно, B - константа связи взаимодействия. В результате сверхтонкого взаимодействия уровень расщепляется на несколько компонент, число которых определяется числом возможных значений полного механического момента атома $\vec{F} = \vec{J} + \vec{I}$.

Сдвиг компоненты сверхтонкой структуры с полным моментом F относительно нерасщепленного уровня равен

$$\Delta E_F = \frac{B}{2} (F(F+1) - J(J+1) - I(I+1)). \quad (14.2)$$

Правило интервалов Ланде для сверхтонкой структуры: $\Delta E_{F, F-1} = BF$, $B > 0$.

14.1. В приближении LS связи найти все возможные термы в конфигурациях

- a) d^2s ; б) d^2p ; в) $nd^2 n'd$;

Найти основной терм и указать, сколько компонент имеет его тонкая структура.

14.2. Напишите электронную конфигурацию, в которой основной терм является

- а) кваттетом, б) квинтетом.

Определите основное состояние в этой конфигурации.

14.3. Напишите электронную конфигурацию, в которой основным является D – терм. Определите основное состояние в этой конфигурации.

14.4. Напишите электронные конфигурации и низший терм элементов второго периода периодической системы, укажите четность терма и определите его расщепление – нормальное или обращенное.

14.5. На рис.1 изображены мультиплеты основных термов атомов углерода и кислорода. Найдите отношение расщеплений в мультиплетах $\Delta E_1 / \Delta E_2$.

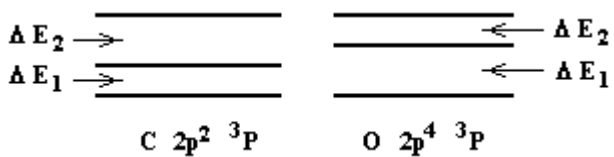


рис. 1

14.6. На рис.2 изображен мультиплет основного терма атома серы ($Z=16$) с указанием величин расщеплений. Определите величину константы связи моментов в формуле Ланде.

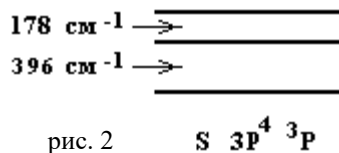


рис. 2

14.7. Изобразите расщепление основного термина атома Nd, электронная конфигурация атома $4f^4 6s^2$. Определите терм и соотношение интервалов между уровнями.

14.8. Компоненты тонкой структуры многоэлектронного атома характеризуются значениями квантового числа $J = 1, 2, 3$. Найти все возможные термы, дающие такую картину тонкого расщепления.

14.9. Элемент с $Z=23$. Определить число компонент тонкой структуры основного термина. Воспользовавшись правилом интервалов Ланде определить положение уровней относительно нерасщепленного мультиплетта. Расщепление термина на мультиплет изобразить графически.

14.10. Определить число компонент тонкой структуры основного термина однократно заряженного иона аргона ($Z=18$). Воспользовавшись правилом интервалов Ланде определить положение уровней относительно нерасщепленного мультиплетта. Расщепление термина на мультиплет изобразить графически.

14.11. Какие элементы $Z \leq 10$ имеют нерасщепленные основные термы?

14.12. Напишите электронные конфигурации первых десяти элементов таблицы Менделеева. У каких из этих элементов отсутствует тонкая структура основного термина.

14.13. Мультиплетность основного термина иона O^+ равна 4. Каково тонкое расщепление этого термина?

14.14. Используя правило интервалов Ланде, изобразите расщепление нижнего термина иона F^+ ($Z=9$) в основной конфигурации, укажите соотношения интервалов.

14.15. Сколько компонент имеет тонкая структура нижних возбужденных термов атомов неона ($Z=10$) и натрия ($Z=11$). Оценить величину расщепления.

14.16. Сколько компонент имеет тонкая структура нижнего возбужденного термина атома гелия ($Z=2$). Оценить величину расщепления.

14.17. С учетом тонкой структуры энергетический уровень некоторого термина атома расщепился на 3 подуровня, соответствующие различным возможным значениям полного момента импульса атома J . Причем, отношение $(\Delta E_3 - \Delta E_2) : (\Delta E_2 - \Delta E_1)$ было измерено в эксперименте и оказалось равным $=3/2$. Учитывая, что полученный триплет является обращенным, найти терм и основное состояние атома.

14.18. При каких условиях величина мультиплетности атомного термина указывает число компонент тонкой структуры? Приведите примеры, иллюстрирующие ответ.

14.19. Напишите электронные конфигурации элементов третьего периода таблицы Менделеева ($Z=11-18$). У каких из этих элементов тонкая структура основного термина состоит из двух компонент?

14.20. Напишите возможные состояния, соответствующие термам: ${}^2P, {}^3D, {}^4F, {}^3P, {}^2D, {}^4P$.

14.21. Возможны ли следующие состояния: ${}^2S_1, {}^3S_0, {}^3P_0, {}^3S_{1/2}, {}^2S_{1/2}, {}^3D_0, {}^2D_{1/2}$?

14.22. Дописать недостающие компоненты мультиплетов ${}^2P_{3/2}, {}^3D_1, {}^4F_{5/2}, {}^3P_2, {}^5D_4, {}^4P_{1/2}$.

14.23. Показать, что энергия тонкого спин-орбитального расщепления для водородоподобного иона имеет порядок величины $\Delta E \approx \alpha^2 Z^4 Ry$. Сделать численную оценку.

14.24. Оценить энергию сверхтонкого расщепления в атоме водорода и длину волны излучения, испускаемого при переходе между подуровнями сверхтонкой структуры.

14.25. На сколько компонент расщеплено основное состояние атома водорода сверхтонким взаимодействием?

14.26. Сколько компонент имеет сверхтонкая структура основного состояния атома дейтерия (спин дейтрона = 1)?

14.27. Спин ядра атома фтора ${}^{19}F$ $I=1/2$. Сколько компонент имеет сверхтонкая структура его основного состояния?

14.28. На рис.3 изображено сверхтонкое расщепление основного состояния некоторого изотопа атома йода (терм $p^5 {}^2P$). Измеренное соотношение расщеплений мультиплетта приблизительно описывается пропорцией: $(E_4-E_3):(E_3-E_2):(E_2-E_1)=4:3:2$. Определите спин ядра.

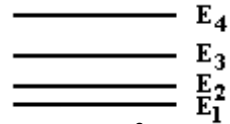


рис. 3

14.29. Компоненты сверхтонкой структуры некоторого атома характеризуются значениями квантового числа $F=1,2,3,4$. Какие значения спина ядра возможны в этом случае?

14.30. Определить число компонент сверхтонкой структуры нижнего возбужденного состояния атома натрия ${}^{22}_{11}Na$. Воспользовавшись правилом интервала Ланде определить положение подуровней относительно нерасщепленного состояния. Картину расщепления изобразить графически. Спин ядра $I=3$.

14.31. Определить число компонент сверхтонкой структуры основного состояния однократно заряженного положительного иона ${}^{13}_6C$. Воспользовавшись правилом интервала Ланде определить положение подуровней относительно нерасщепленного состояния. Картину расщепления изобразить графически. Спин ядра $I=1/2$.

14.32. Определить количество компонент сверхтонкой структуры нижнего возбужденного состояния атома 9_4Be (спин ядра $I=3/2$). Картину сверхтонкого расщепления изобразить графически.

14.33. Сколько компонент имеет сверхтонкая структура основного состояния атомов ${}^{10}_5B$ (спин ядра $I=3$) и кислорода ${}^{17}_8O$ (спин ядра $I=5/2$). Оценить величину расщепления.

14.34. Сколько компонент имеет сверхтонкая структура нижнего возбужденного состояния атомов 7_3Li (спин ядра $I=3/2$) и 3_2He (спин ядра $I=1/2$). Оценить величину расщепления.

14.35. Можно ли, и если «да», то при каких условиях по числу компонент сверхтонкой структуры определить спин атомного ядра? Приведите примеры, иллюстрирующие ответ.

14.36. Спин и магнитный момент ядра отличны от нуля. Может ли так быть, что у некоторого атомного состояния отсутствует сверхтонкая структура? Ответ обоснуйте. Приведите примеры.

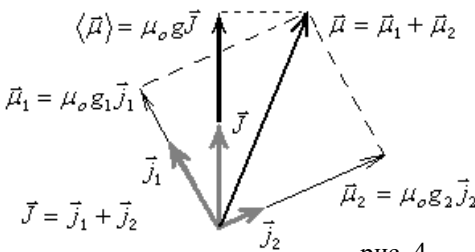
14.37. Нижнее возбужденное состояние атома ${}^{21}Ne - {}^3P_2$. Определить спин ядра, если известно, что его сверхтонкая структура состоит из 4 компонент.

14.38. Спин ядра атома ${}^{27}Al$ $I=5/2$. Определить количество компонент тонкой и сверхтонкой структуры основного терма. Картину расщепления изобразить графически.

14.39. Спин ядра атома иода ${}^{131}I$ равен $7/2$. Определить количество компонент тонкой и сверхтонкой структуры основного терма. Картину расщепления изобразить графически

14.40. С учетом сверхтонкой структуры энергетический уровень некоторого состояния атома с неизвестным полным моментом импульса электронной оболочки J расщепляется на 4 подуровня, соответствующие разным возможным значениям полного момента импульса атома F , причем, $(E_4-E_3):(E_3-E_2):(E_2-E_1)=3:2:1$. Учитывая, что спин ядра этого атома $I = 3/2$, найти момент импульса электронной оболочки J .

14.41. Сверхтонкая структура основного состояния атома, имеющего конфигурацию p^4 , состоит из трех компонент. Определить спин ядра.



14.42. Найти гиромагнитное отношение g составной системы состоящей из двух частиц, определенное соотношением $\langle \vec{\mu} \rangle = \mu_0 g \vec{J}$, где $\langle \vec{\mu} \rangle$ - проекция магнитного момента системы на направ-

ление полного момента $\vec{J} = \vec{j}_1 + \vec{j}_2$, \vec{j}_1, \vec{j}_2 - полные моменты частиц, μ_0 - некоторая константа (см. рис.). Гиромагнитные отношения каждой из частиц g_1, g_2 произвольны (на рис. $g_1, g_2 > 0$).

14.43. Длина волны излучения, соответствующая переходам между компонентами сверхтонкой структуры основного состояния атома водорода, равна $\lambda_H = 21.1$ см. Определить длину волны перехода между компонентами сверхтонкой структуры атома дейтерия λ_D , если известно, что спин протона $I_p = 1/2$, спин дейтрона $I_D = 1$, а гиромагнитные отношения для протона и нейтрона равны $g_p = 5.59$, $g_n = -3.83$ соответственно.

15. Спектры атомов с одним оптическим электроном.

Под одноэлектронным атомом подразумевается атом водорода и водородоподобные ионы (ядро с зарядом $Z +$ один электрон), атомы щелочных металлов (Li, Na, K, Rb, Cs и Fr) и щелочеподобные ионы (ионы изоэлектронной последовательности щелочных металлов), а также атомы некоторых других элементов с одним электроном сверх полностью заполненных подоболочек (например Al – электронная конфигурация $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p$; Ga – электронная конфигурация $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p$ и т.п.

К этой же категории атомов можно отнести ридберговские атомы с одним сильно возбужденным электроном, движущимся вдали от атомного остатка - иона.

1. Квантовые числа оптического электрона.

Атом водорода.

$$\begin{aligned} n - \text{главное квантовое число} & \quad n = 1, 2, 3 \dots \\ \ell - \text{орбитальное квантовое число} & \quad 0 \leq \ell \leq n - 1 \\ s - \text{спиновое квантовое число} & \quad s = 1/2 \\ j - \text{квантовое число полного} & \quad j = \ell \pm s \\ & \quad \text{момента импульса} \end{aligned}$$

В атомной спектроскопии состояния с различными значениями орбитального момента ℓ принято обозначать буквами латинского алфавита:

$$\begin{aligned} \ell = 0 & \quad 1 \quad 2 \quad 3 \quad 4 \dots \\ & \quad s \quad p \quad d \quad f \quad g \dots \end{aligned}$$

Атомы щелочных металлов.

Квантовые числа - те же, что и для атома водорода, но пределы их изменения для валентного электрона иные.

Для s- и p- электронов

$$n = n_0, n_0 + 1, n_0 + 1, \quad (15.1)$$

где n_0 - главное квантовое число внешнего электрона в основном состоянии:

$$\begin{array}{cccccc} \text{Li} & \text{Na} & \text{K} & \text{Rb} & \text{Cs} & \text{Fr} \\ n_0 = & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 & 7 \end{array}$$

Для электронов с $\ell \geq 2$ минимальное значение главного квантового числа $(n_\ell)_{\min}$ определяется наименьшей незаполненной ℓ - подоболочкой:

$$\begin{array}{cccccc} \text{Li} & \text{Na} & \text{K} & \text{Rb} & \text{Cs} & \text{Fr} \\ (n_d)_{\min} & 3 & 3 & 3 & 4 & 5 & 6 \\ (n_f)_{\min} & 4 & 4 & 4 & 4 & 4 & 5 \end{array} \quad (15.2)$$

2. Энергии уровней без учета тонкой структуры.

Атом водорода (водородоподобный ион).

$$E_n = -\frac{Z^2}{n^2} Ry. \quad (15.3)$$

Атомы щелочных металлов.

$$E_{n\ell} = -\frac{(Z - a_{n\ell})^2}{n^2} Ry = -\frac{Ry}{(n - \Delta_\ell)^2}. \quad (15.4)$$

В формулах (15.3) и (15.4) $Ry = me^4/2\hbar^2 = 13.606$ эВ; Δ_ℓ - квантовый дефект; $a_{n\ell}$ - константа экранирования для энергии уровня (без учета тонкой структуры).

3. Энергии уровней с учетом тонкой структуры.

Атом водорода (водородоподобный ион).

$$E_{nj} = -\frac{Z^2 Ry}{n^2} - \frac{\alpha^2 Z^4 Ry}{n^3} \left(\frac{1}{j+1/2} - \frac{3}{4n} \right). \quad (15.5)$$

Интервал тонкой структуры - разность энергий уровней

$$\Delta E_{n\ell} = E_{n,j=\ell+1/2} - E_{n,j=\ell-1/2}:$$

$$\Delta E_{n\ell} = \frac{\alpha^2 Z^4 Ry}{n^3 \ell(\ell+1)}. \quad (15.6)$$

В формулах (15.5) и (15.6) $\alpha = e^2/\hbar c = 1/137$ - постоянная тонкой структуры.

Атомы щелочных металлов.

Интервал тонкой структуры

$$\Delta E_{n\ell} = \frac{\alpha^2 (Z - a')^4 Ry}{n^3 \ell(\ell+1)}, \quad (15.7)$$

где a' - константа экранирования для тонкой структуры.

4. Спектральные обозначения состояний одноэлектронных атомов.

Атом водорода (водородоподобный ион).

Для полного описания состояния электрона в одноэлектронном атоме достаточно задать квантовые числа n , ℓ и j . Обычно их записывают в виде

$$n\ell_j \quad (15.8)$$

Например: $1s_{1/2}$, $2p_{3/2}$, $4f_{7/2}$ и т.п.

Иногда встречаются более сложные обозначения которые содержат избыточную для данного случая информацию (существенную для многоэлектронных систем), а именно описание состояния электронной оболочки (электронной конфигурации) и величин, результирующих угловых моментов атома (которые обозначаются прописными латинскими буквами)

$$n\ell^{2S+1}L_J \quad (15.9)$$

Здесь $2S+1$ – мультиплетность; S – полный спин. Для одноэлектронной системы $S = s = 1/2$ и $2S + 1 = 2$: уровни одноэлектронного атома – дублетные.

Примеры записи типа (9) $1s^2S_{1/2}$, $2p^2P_{3/2}$, $4f^2F_{7/2}$ и т.п.

Чаще используют сокращенные (по сравнению с (9)) обозначения

$$n^{2S+1}L_j \quad (15.10)$$

Например $1^2S_{1/2}$, $2^2P_{1/2}$, $4^2F_{7/2}$ и т.п.

Атомы щелочных металлов.

Обозначения состояний оптического электрона - те же, что и для атома водорода. Для полного описания необходимо добавить характеристики электронного остова (иона). Например, электронные конфигурации и основные состояния атомов щелочных металлов записываются следующим образом:

Li $1s^22s^2S_{1/2}$

Na $1s^22s^22p^63s^2S_{1/2}$

K $1s^22s^22p^63s^23p^64s^2S_{1/2}$

Rb $1s^22s^22p^63s^23p^63d^{10}4s^24p^65s^2S_{1/2}$

Cs $1s^22s^22p^63s^23p^63d^{10}4s^24p^64d^{10}4s^25p^66s^2S_{1/2}$

Fr $1s^22s^22p^63s^23p^63d^{10}4s^24p^64d^{10}4f^{14}5s^25p^65d^{10}6s^26p^67s^2S_{1/2}$

Последний s -электрон расположен над заполненной p -подоболочкой иона.

15.1. Нарисовать диаграмму энергетических уровней водородоподобного иона Ve^{3+} учетом тонкой структуры.

15.2. Нарисовать диаграмму энергетических уровней иона Mg^+ учетом тонкой структуры.

15.3. Вычислить величину тонкого расщепления резонансной линии атома водорода (переход $2p \rightarrow 1s$).

15.4. Оценить отношение энергий тонкого расщепления $3p$ и $4p$ уровней атома лития.

15.5. Оценить отношение энергий тонкого расщепления $4p$ и $4f$ уровней атома лития.

15.6. Сравните по порядку величины тонкое и сверхтонкое расщепления в атоме позитрония.

15.7. Потенциалы ионизации атомов цезия и натрия соответственно составляют 3.89 и 5.14 эВ. Определить квантовые дефекты основных состояний.

15.8. Потенциал ионизации иона Ve^+ составляет $I = 18.21$ эВ. Определить квантовый дефект основного состояния.

15.9. Потенциал ионизации иона V^{++} составляет $I = 37.93$ эВ. Определить квантовый дефект основного состояния.

15.10. Потенциал ионизации однозарядного иона Ca^+ равен 11.9 эВ. Определить квантовый дефект основного состояния.

15.11. Потенциал ионизации однозарядного иона Mg^+ равен 15.1 эВ. Определить квантовый дефект основного состояния.

15.12. Определить квантовый дефект основных состояний атомов бора ($Z = 5$) и алюминия ($Z = 13$), если известно, что их потенциалы ионизации равны 8.30 и 5.99 эВ соответственно.

15.13. Определить постоянную экранирования атомного ядра для основного состояния атомов щелочных металлов Li , Na , K , Rb , Cs , если известно, что значения квантовых дефектов s – состояний для этих атомов равны соответственно 0.41, 1.37, 2.23, 3.19, 4.13.

16. Электромагнитные переходы в атомах. Правила отбора.

1. Правила отбора для электрических дипольных излучательных переходов в одноэлектронном атоме:

$$\Delta n - \text{произвольное};$$

$$\Delta \ell = \pm 1;$$

$$\Delta j = 0, \pm 1;$$

$$\Delta m_s = 0.$$

2. Спектральные серии щелочных металлов.

$$\text{Главная серия } n_o \text{ } ^2S_{1/2} \rightarrow n \text{ } ^2P_{1/2,3/2}; n \geq n_o;$$

$$\text{Резкая серия } n_o \text{ } ^2P_{1/2,3/2} \rightarrow n \text{ } ^2S_{1/2}; n \geq n_o + 1;$$

$$\text{Диффузная серия } n_o \text{ } ^2P_{1/2} \rightarrow n \text{ } ^2D_{3/2}; n \geq (n_d)_{\min};$$

$$n_o \text{ } ^2P_{3/2} \rightarrow n \text{ } ^2D_{3/2,5/2}; n \geq (n_d)_{\min}$$

$$\text{Фундаментальная серия } n \text{ } ^2D_{3/2} \rightarrow n' \text{ } ^2F_{5/2}; n \geq (n_f)_{\min};$$

$$(\text{серия Бергмана}) \quad n \text{ } ^2D_{5/2} \rightarrow n' \text{ } ^2F_{5/2,7/2}; \quad n' \geq (n_f)_{\min}.$$

3. Переходы в многоэлектронном атоме. LS - связь.

Одноэлектронный оптический переход в электрическом дипольном приближении разрешен, если удовлетворяются следующие правила отбора (сравн. с правилами отбора в одноэлектронном атоме).

Правило Лапорта - переход возможен только между четными и нечетными термами:

$$\Delta \sum \ell_i = \pm 1;$$

следовательно, должны быть заданы обе электронные конфигурации.

$$\Delta L = 0, \pm 1;$$

$$\Delta S = 0 - \text{интеркомбинационный запрет};$$

$$\Delta J = 0, \pm 1;$$

переход $J=0 \leftrightarrow J'=0$ **запрещен** ($0 \leftrightarrow 0$ переход).

При рассмотрении сверхтонкой структуры оптических спектров действует правило для полного момента импульса атома \vec{F} :

$$\vec{F} = \vec{J} + \vec{I}.$$

Правило отбора для F

$$\Delta F = 0, \pm 1.$$

Переход $F=0 \leftrightarrow F'=0$ **запрещен**.

16.1. Укажите переходы, образующие тонкую структуру головной линии серии Лаймана.

16.2. Укажите переходы, образующие тонкую структуру головной линии серии Бальмера. Отметьте переходы с одинаковой частотой.

16.3. Для состояний электрона в атоме водорода с главными квантовыми числами $n = 1$ и 2 изобразить схематично картину энергетических уровней с учетом тонкой структуры. Показать разрешенные переходы.

16.4. Для состояний электрона в атоме водорода с главными квантовыми числами $n = 2$ и 3 изобразить схематично картину энергетических уровней с учетом тонкой структуры. Показать разрешенные переходы.

16.5. Используя формулу Дирака (тонкой структуры) определить длины волн переходов, образующих головную линию серии Бальмера. Лэмбовский сдвиг не учитывать.

16.6. Для двукратно ионизированного атома лития построить схему разрешенных переходов между состояниями с главными квантовыми числами $n_1=2$ и $n_2=3$. Указать крайние линии мультиплета.

16.7. Найти длины волн спектральных линий возникающих при каскаде переходов возбужденных атомов натрия из состояния $4s$ в основное состояние $3s$. Квантовые дефекты для s - и p - термов равны $\Delta_s = 1.37$, $\Delta_p = 0.88$.

16.8. Длины волн линий резонансного дублета натрия равны 5896 \AA и 5890 \AA , энергия ионизации $I = 5.14 \text{ эВ}$. Пренебрегая тонким расщеплением определите квантовые дефекты для s - и p - термов натрия.

16.9. Длина волны резонансной линии калия равна 7665 \AA , а длина волны границы главной серии 2858 \AA . Определить квантовые дефекты для s - и p - термов и ионизационный потенциал атома калия.

16.10. Определить энергию квантов головной линии диффузной серии в атомах лития и натрия. Квантовые дефекты p - и d - состояний равны $\Delta_p = 0.041$ и $\Delta_d = 0.002$ для атома лития и $\Delta_p = 0.883$ и $\Delta_d = 0.010$ для атома натрия соответственно.

16.11. Определить энергию ионизации и величину расщепления дублетных уровней $3^2P_{1/2,3/2}$ иона Mg^+ , если константа экранирования для энергии $3s$ - уровня $a = 8.85$, а константа экранирования для тонкой структуры $3p$ - уровней иона $a' = 6.61$.

16.12. Одна из компонент резонансного дублета натрия имеет длину волны $\lambda_1 = 5890 \text{ \AA}$. Чему равна длина волны λ_2 второй компоненты этого дублета, если для тонкой структуры $3p$ -уровней натрия константа экранирования $a' = 7.45$?

16.13. Какие переходы образуют спектр поглощения натрия? Укажите начальную и конечную конфигурации атома и термы.

16.14. При интенсивном облучении желтым светом ($5880 \text{ \AA} - 6000 \text{ \AA}$) атомы натрия возбуждаются на резонансный уровень $3p^2P_{1/2,3/2}$. Какие спектральные серии возникают при поглощении света возбужденными атомами натрия?

16.15. Какие переходы образуют серии спектра поглощения атомов алюминия? Сравните спектр поглощения атома алюминия со спектром поглощения возбужденного атома натрия (см. задачу 16.14).

16.16. Возбужденный электрон в атоме Ne ($Z=10$) занимает состояние $4s$. В каких нижележащих состояниях может оказаться электрон в каскаде разрешенных переходов $4s \rightarrow n\ell \rightarrow n'\ell'$... «на пути» в основное состояние. Изобразите схему уровней и переходов.

16.17. Спектральные линии $3p \rightarrow n\ell$ одной из серий поглощения атома алюминия являются триплетами. Изобразите схему уровней и переходов с учетом тонкой структуры.

16.18. Возбужденный электрон в ионе Mg^+ ($Z=12$) занимает состояние $4p$. В каких нижележащих состояниях может оказаться электрон в каскаде разрешенных переходов $4p \rightarrow n\ell \rightarrow n'\ell'$... «на пути» в основное состояние. Изобразите схему уровней и переходов.

16.19. В атоме водорода электрон находится в одном из состояний $5s$, $5p$, $5d$, $5f$. Какие спектральные линии и каких серий могут возникнуть при спонтанных переходах в каждом из этих случаев? Тонкую структуру не учитывать. Схему уровней и возможных переходов изобразить графически.

16.20. В атоме натрия электрон находится в одном из состояний $5s$, $5p$, $5d$, $5f$. Какие спектральные линии и каких серий могут возникнуть при спонтанных переходах в каждом из этих случаев? Тонкую структуру не учитывать. Схему уровней и возможных переходов изобразить графически.

16.21. Нарисовать диаграмму всех энергетических уровней (вплоть до значений главного квантового числа $n=5$) с учетом тонкой структуры для внешнего (валентного) электрона ионов Be^+ и B^{2+} . Указать возможные переходы в основное состояние и оценить величину тонкого расщепления резонансной линии.

16.22. Нарисовать диаграмму энергетических уровней с учетом тонкой структуры для ионов B^{4+} и N^{6+} . Указать возможные переходы в основное состояние и оценить величину тонкого расщепления резонансной линии.

16.23. Определите, разрешены или запрещены следующие оптические переходы (для атомов с одним валентным электроном):

$${}^2S_{1/2} \rightarrow {}^2D_{3/2}, {}^2S_{1/2} \rightarrow {}^2P_{3/2}, {}^3S_1 \rightarrow {}^2P_{3/2}, {}^2P_{1/2} \rightarrow {}^2D_{5/2}.$$

Объясните, почему.

16.24. Являются ли нижеуказанные переходы разрешенными в электрическом дипольном приближении (указаны конфигурации и термы):

$$s^2\ ^1S \leftrightarrow sp\ ^1P; pd\ ^1D \leftrightarrow sp\ ^1P; np^2\ ^3D \leftrightarrow n'p\ ^3P; p^2\ ^1D \leftrightarrow pd\ ^1D; p^2\ ^1S \leftrightarrow ps\ ^1P?$$

16.25. Найдите низколежащие метастабильные состояния атома углерода.

16.26. Какие переходы возможны при поглощении излучения из основного терма атома углерода? Укажите только конфигурации и термы.

16.27. Найдите все термы, принадлежащие основной конфигурации иона O^{++} и расположите их в порядке возрастания энергии. Возможны ли разрешенные переходы из найденных вышележащих термов в основной? Укажите все правила отбора, разрешающие или запрещающие переход.

16.28. Какие переходы возможны при поглощении из основного терма атома кислорода в возбужденные состояния с родительским термом 4S ? Укажите только конфигурации и термы.

16.29. Учитывая расщепление энергетических уровней атома углерода согласно правилу интервалов Ланде, рассмотрите тонкую структуру линий поглощения атома углерода. Константу связи моментов в возбужденных термах считайте малой по сравнению с константой связи моментов в основном терме; расщепление возбужденных термов считайте нормальным. Изобразите переходы на схеме уровней. Отметьте крайние линии мультиплетов. Считать, что при переходе меняется состояние одного из p электронов.

16.30. Учитывая расщепление термов кислорода согласно правилу интервалов Ланде, рассмотрите тонкую структуру линий поглощения атомов кислорода. Константу связи моментов возбужденных термов считайте малой по сравнению с константой связи моментов в основном терме; расщепление возбужденных термов считайте обращенным. Изобразите переходы на схеме уровней. Отметьте крайние линии мультиплетов. Считать, что при переходе меняется состояние одного из p электронов.

16.31. Какие переходы возможны при поглощении из основного терма атома фтора (или другого галогена)? Укажите только конфигурации и термы. Родительским термом возбужденного атома считайте терм невозбужденного иона.

16.32. Рассмотрите тонкую структуру линий поглощения атома фтора в рамках правила интервалов Ланде. Константу связи моментов в возбужденных термах считайте малой по сравнению с константой связи моментов в основном терме, расщепление – обращенным. Изобразите переходы на схеме уровней. Отметьте крайние линии мультиплетов. Считать, что при переходе меняется состояние одного из p электронов.

16.33. Какие переходы возможны при поглощении из основного терма атома азота, укажите только конфигурации и термы. Родительским термом возбужденного атома азота считайте терм невозбужденного иона.

16.34. Рассмотрите тонкую структуру линий поглощения азота (см. задачу 16.33) в рамках правила интервалов Ланде. Изобразите переходы на схеме уровней и отметьте крайние линии мультиплета.

16.35. Атом углерода находится на терме 3D , принадлежащим электронной конфигурации $2p^4$. В какие нижележащие термы электромагнитные переходы разрешены в дипольном приближении?

16.36. Атом серы находится на терме 1F , принадлежащим электронной конфигурации $3p^4$. В какие нижележащие термы электромагнитные переходы разрешены в дипольном приближении?

16.37. Атом неона находится на терме 3D , принадлежащим электронной конфигурации $2p^5$. В какие нижележащие термы электромагнитные переходы разрешены в дипольном приближении?

16.38. Атом неона находится на терме 3P , принадлежащим электронной конфигурации $2p^5$. В какие нижележащие термы каких конфигураций электромагнитные переходы разрешены в дипольном приближении? Сколько компонент имеет тонкая структура каждой из спектральных линий?

16.39. Атом аргона находится на терме 1P , принадлежащим электронной конфигурации $3p^5$. В какие нижележащие термы электромагнитные переходы разрешены в дипольном приближении?

16.40. Переходы между какими термами конфигураций $2p^2$ и $2p3s$ в атоме углерода возможны? Сколько компонент имеет тонкая структура каждой из спектральных линий?

16.41. Переходы между какими термами конфигураций $3s^23p$ и $3s3p^2$ в атоме алюминия возможны? Сколько компонент имеет тонкая структура каждой из спектральных линий?

16.42. Какие переходы возможны между термами конфигураций $3p^2$ и $3p5d$ в атоме кремния? Сколько компонент имеет тонкая структура каждой из спектральных линий?

16.43. Какие переходы возможны между основным термом конфигураций $3p^3$ и термами конфигураций $3p^24d$ в атоме фосфора? Сколько компонент имеет тонкая структура каждой из спектральных линий?

16.44. Атом кислорода находится на терме 5P , принадлежащим электронной конфигурации $2p^3$. В какие нижележащие термы каких конфигураций электромагнитные переходы разрешены в дипольном приближении? Сколько компонент имеет тонкая структура каждой из спектральных линий?

16.45. Какие переходы возможны между основным термом конфигурации $3p^3$ и термами конфигурации $3p^24d$ в атоме фосфора? Сколько компонент имеет тонкая структура каждой из спектральных линий?

16.46. Определить все возможные термы атома углерода для электронных конфигураций:

- а) $1s^22s^22p^13s^1$; б) $1s^22s^22p^13p^1$; в) $1s^22s^22p^13d^1$.

Указать, все разрешенные в дипольном приближении переходы между термами заданной конфигурации и основным термом.

16.47. Определить возможные термы атома азота в конфигурациях $1s^2 2s^2 2p^2 [^3P] \beta \ell^1$. Указать термы, из которых возможен переход в основной терм конфигурации $1s^2 2s^2 2p^3$?

16.48. При аннигиляции невозбужденного атома позитрония испущено три фотона. Орто - или парапозитроний аннигилировал?

16.49. Заряженная частица находится в одномерной бесконечно глубокой прямоугольной потенциальной яме шириной d в стационарном состоянии с $n = 10$. Определить частоты, которые могут наблюдаться в спектре излучения.

16.50. Заряженная частица находится в одномерной симметричной прямоугольной потенциальной яме конечной глубины. Какие частоты будут наблюдаться в спектре поглощения, если частица находится в нижнем возбужденном состоянии, а полное число стационарных состояний в дискретном спектре равно семи. Положение уровней считать известным.

16.51. Какие правила отбора для электромагнитных переходов в электрическом дипольном приближении должны выполняться для водородо-подобного иона, описываемого моделью Томсона? Указание: решить задачу в декартовой системе координат.

17. Рентгеновские спектры.

Характеристическое рентгеновское излучение. Закон Мозли

$$\frac{1}{\lambda_{n_2 \rightarrow n_1}} \cong R \cdot (Z - \sigma)^2 \cdot \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right), \quad (17.1)$$

где R - постоянная Ридберга; Z - порядковый номер элемента; σ - постоянная экранирования.

Для линий K - серии $\sigma_K \approx 1$; для L - серии $\sigma_L \approx 7.4$; n_1, n_2 - главные квантовые числа атомных оболочек между которыми происходит переход.

17.1. Начиная с какого элемента периодической системы, можно наблюдать излучение K - и L - серий?

17.2 Можно ли излучение рентгеновской трубки при анодном напряжении 100 кВ использовать для наблюдения фотоэффекта с K - оболочки урана ^{92}U ?

17.3. Найти величину расщепления (в электронвольтах) рентгеновского дублета $K_{\alpha 1}$ и $K_{\alpha 2}$ молибдена (константа экранирования для тонкой структуры в L - оболочке $a' \approx 3.5$).

17.4. Показать, что величина расщепления $\Delta\lambda$ рентгеновских дублетов в шкале длин волн в атомах элементов с большими зарядами ядер Z не зависит от Z .

17.5. Вычислить энергии квантов соответствующих K_{α} - линии и энергию связи K - электронов в атоме вольфрама ($\sigma_K \approx 1$).

17.6. Длины волн K_{α} - линий некоторых элементов равны $\lambda_1 = 1.795 \text{ \AA}$ и $\lambda_2 = 2.29 \text{ \AA}$. Определите эти элементы.

17.7. Вольфрамовая мишень бомбардируется электронами с энергией 80 кэВ. Оцените энергию электронов, выбитых с K - и L - оболочек ($\sigma_K \approx 1$, $\sigma_L \approx 7.4$).

17.8. Оцените энергию фотоэлектронов, выбитых из K - оболочек урана ($Z = 92$) и свинца ($Z = 82$) рентгеновским излучением с энергией 150 кэВ.

17.9. Известны длины волн головных линий L -серий серебра ($\lambda_1 = 4.156 \text{ \AA}$) и молибдена ($\lambda_2 = 5.411 \text{ \AA}$). Считая поправки экранирования σ_L для этих линий одинаковыми, оценить значение постоянной Ридберга и величину поправки σ_L .

17.10. Какие электроны могут заполнять вакансию в K -оболочке?

17.11. Рентгеновское излучение с длиной волны равной длине волны K_{α} - линии вольфрама пропускается через образец из вольфрама. Поглощается ли это излучение? Если да, то за счет каких процессов?

17.12. В процессе работы молибденовый антикатод рентгеновской трубки окисляется. Будет ли такая трубка испускать K_{α} - линию молибдена?

17.13. Оценить величину тонкого расщепления K_{α} рентгеновской линии атомов урана ($Z=92$), свинца ($Z=82$), и ртути ($Z=80$).

17.14. Оценить длину волны K_{β} линии рентгеновского излучения, испускаемого атомом ртути ($Z=80$, постоянная экранирования $\sigma_K \approx 1$).

17.15. Определить число компонент тонкой структуры головной линии L - серии рентгеновского излучения.

18. Эффекты Зеемана и Пашена – Бака. Опыт Штерна и Герлаха.

1. Магнитный момент атома в приближении LS -связи.

$$\vec{\mu}_J = \vec{\mu}_L + \vec{\mu}_S = -\frac{e}{2mc} (\hbar\vec{L} + 2\hbar\vec{S}) = -\mu_B(\vec{L} + 2\vec{S}) = -\mu_B(\vec{J} + \vec{S})$$

$$\vec{\mu}_L = -\mu_B\vec{L} \text{ - орбитальный магнитный момент атома;}$$

$$\vec{\mu}_S = -2\mu_B\vec{S} \text{ - спиновый магнитный момент атома;}$$

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2mc} = 0.927 \cdot 10^{-20} \text{ эрг/Гс - магнетон Бора;}$$

вектора \vec{L} , \vec{S} , \vec{J} – орбитальный, спиновый и полный моменты импульса атома, обезразмеренные на постоянную Планка \hbar .

Эффективный магнитный момент атома – компонента магнитного момента атома, коллинеарная полному моменту импульса

$$\begin{aligned} \langle \vec{\mu} \rangle &= \frac{(\vec{\mu}_J \cdot \vec{J}) \cdot \vec{J}}{|\vec{J}|^2} = -\mu_B g \vec{J}, \\ g &= \frac{(\vec{L} + 2\vec{S}) \cdot \vec{J}}{|\vec{J}|^2} = \frac{(\vec{J} + \vec{S}) \cdot \vec{J}}{|\vec{J}|^2} = 1 + \frac{\vec{S}\vec{J}}{|\vec{J}|^2} \\ &= 1 + \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)} \text{ - фактор Ланде.} \end{aligned} \quad (18.1)$$

2. Слабое магнитное поле.

Слабым считается поле, нерывающее LS – связи. Взаимодействие магнитных моментов друг с другом значительно сильнее их взаимодействия с магнитным полем H :

$$A(L, S) \gg \mu_B H, \quad (18.2)$$

$A(L, S)$ – константа связи моментов, определяющая расщепление терма в мультиплет (правило интервалов Ланде).

3. Энергия взаимодействия атома с магнитным полем:

$$\Delta E = -\langle \vec{\mu} \rangle \vec{H} = \mu_B g H M_J, \quad (18.3)$$

M_J – квантовое число проекции полного момента импульса на направление магнитного поля.

4. Сила, действующая на атом в слабом неоднородном магнитном поле (ось z направлена вдоль вектора \vec{H} , направления вектора \vec{H} и его градиента совпадают):

$$\vec{F} = \langle \vec{\mu} \rangle \nabla \vec{H}; \quad F_z = -\mu_B g M_J \frac{dH}{dz}. \quad (18.4)$$

5. Эффект Зеемана. Сдвиг частоты спектральной линии в магнитном поле относительно нерасщепленной линии:

$$\Delta\omega(M_{J_1}, M_{J_2}) = \Delta\omega_L (g_1 M_{J_1} - g_2 M_{J_2}); \quad (18.5)$$

$\Delta\omega_L = \mu_B H/\hbar = eH/2mc$ - нормальное лоренцево расщепление; индекс 1 относится к верхнему уровню перехода, а индекс 2 - к нижнему.

В случае перехода между уровнями синглетных термов ($S=0, g_1=g_2=1$) имеет место нормальный (простой) эффект Зеемана; во всех остальных случаях - аномальный (сложный) эффект Зеемана.

6. Сильное магнитное поле.

Сильное поле разрывает LS связь. В этом случае

$$\mu_L H, \mu_S H \gg A(L, S). \quad (18.6)$$

7. Энергия взаимодействия атома с сильным магнитным полем (спин-орбитальное взаимодействие не учитывается):

$$\Delta E = -\vec{\mu}_L \vec{H} - \vec{\mu}_S \vec{H} = \mu_B H (M_L + 2M_S). \quad (18.7)$$

8. Эффект Пашена-Бака. Сдвиг частоты спектральной линии в сильном магнитном поле относительно частоты перехода между вырожденными термами (не расщепленными спин-орбитальным взаимодействием)

$$\Delta\omega(M_{L_1}, M_{L_2}) = \frac{\mu_B H}{\hbar} (M_{L_1} - M_{L_2}) = \mu_B H \Delta M_L. \quad (18.8)$$

Это - нормальный лоренцевский триплет.

9. Сила, действующая на атом в сильном неоднородном магнитном поле (ось z направлена вдоль вектора \vec{H} , направления вектора \vec{H} и его градиента совпадают)

$$F_z = -\mu_B (M_L + 2M_S) \frac{dH}{dz} \quad (18.9)$$

10. Дополнительные правила отбора, действующие в поле внешних сил:

$$\Delta M_J = \pm 1 - \sigma \text{ - компоненты,} \quad (18.10)$$

$$\Delta M_J = 0 - \pi \text{ - компоненты.} \quad (18.11)$$

Переход $M_{J_1} = 0 \leftrightarrow M_{J_2} = 0$ запрещен, если при переходе $\Delta J = 0$ ($J_1 = J_2$).

При разрыве LS - связи в сильном магнитном поле:

$$\Delta M_L = \pm 1 - \sigma \text{ - компоненты,} \quad (18.12)$$

$$\Delta M_L = 0 - \pi \text{ - компоненты,} \quad (18.13)$$

$$\Delta M_S = 0. \quad (18.14)$$

18.1. Определить множители Ланде следующих состояний ${}^3D_1, {}^5F_1, {}^2D_{3/2}, {}^4P_{1/2}, {}^8F_{1/2}, {}^4D_{1/2}$.

18.2. Вычислить множители Ланде для состояний 3F_4 , ${}^4D_{1/2}$, 9H_1 . Определить направление магнитного момента относительно механического.

18.3. Определить эффективные магнитные моменты атомов в состояниях 3P_1 , ${}^2D_{5/2}$.

18.4. Определить эффективный магнитный момент атомов в состоянии 3D_2 и возможные значения его проекций на направление внешнего магнитного поля.

18.5. Определите эффективные магнитные моменты атомов и возможные значения их проекций на направление внешнего магнитного поля в состояниях: 1P_1 , ${}^4D_{1/2}$, 9H_1 , 3P_2 .

18.6. Какие из приведенных значений фактора Ланде возможны и каков их физический смысл: $g = 2$, $g = 1$, $g = 0$, $g = -1$? Приведите примеры состояний для возможных g .

18.7. Может ли так быть, что атомная оболочка характеризуется ненулевым полным механическим моментом количества движения, однако, магнитным момент атома равен нулю? Ответ обоснуйте.

18.8. Найти величину полного механического момента атома \vec{J} и возможные его проекции на выделенное направление, а также угол между \vec{J} и орбитальным моментом \vec{L} для состояний 3P_2 , ${}^4D_{7/2}$, ${}^2D_{5/2}$, 5F_1 .

18.9. Найти угол между вектором полного механического момента \vec{J} и вектором полного магнитного момента атома $\vec{\mu}_J$ для состояний 3P_1 , 5F_1 , ${}^2D_{3/2}$, ${}^4D_{1/2}$, 3P_0 , 9H_1 .

18.10. Определить максимальную величину энергии, приобретаемой атомом в состоянии 1D_2 в магнитном поле $H = 10^4$ Э.

18.11. Электронная конфигурация атома кислорода имеет вид: $1s^2 2s^2 2p^4$. Для основного состояния найти величину эффективного магнитного момента $\langle \vec{\mu} \rangle$, определяющего магнитные свойства такого атома в слабом магнитном поле.

18.12. На сколько энергетических подуровней расщепятся в слабом магнитном поле уровни энергии атома в состояниях ${}^4D_{1/2}$, ${}^2P_{1/2}$?

18.13. Вычислить величину расщепления пучка атомов лития в опыте Штерна и Герлаха, если длина полюсов магнита $L = 10$ см градиент магнитного поля $dH/dz = 3 \cdot 10^5$ Э/см, температура печи $T = 10^3$ К. Расщепление измеряется у концов полюсов.

18.14. Определить гиромагнитное отношение в единицах $e/2mc$ для спина электрона в опыте Штерна и Герлаха с пучком атомов серебра, вылетающим из печи с температурой 1100 К. Градиент магнитного поля $dH/dz = 3 \cdot 10^5$ Э/см, протяженность поля $l = 4$ см. Расстояние от магнита до экрана $L = 10$ см. Расщепление пучка на экране $\Delta x = 1.76$ см.

18.15. Оценить величину градиента магнитного поля, в котором можно подвесить невозбужденный атом натрия так, чтобы сила, действующая со стороны поля, уравновешивала силу тяжести. Как должны быть направлены магнитное поле и его градиент?

18.16.² На сколько компонент расщепится в опытах Штерна и Герлаха пучок атомов гелия, находящихся в низшем метастабильном состоянии?

18.17. Расщепится ли пучок атомов ртути в основном состоянии в опыте Штерна и Герлаха?

18.18. Определить максимальные значения проекций магнитных моментов атомов ванадия, марганца и железа (основные термы 4F , 6S , 5D), если известно, что пучки атомов в неоднородном магнитном поле расщепляются на 4, 6 и 9 компонент. Определить основные состояния атомов.

18.19. На сколько компонент расщепятся пучки атомов бора, азота, кислорода и фтора, находящихся в основном состоянии, в эксперименте Штерна и Герлаха в случае слабого и сильного магнитных полей. В сильном поле LS взаимодействием пренебречь.

18.20. На сколько компонент расщепятся пучки атомов фосфора и серы, находящихся в основном состоянии, в эксперименте Штерна и Герлаха в случае слабого и сильного магнитных полей. В сильном поле LS взаимодействием пренебречь. Оценить величину критического магнитного поля.

18.21. На сколько компонент расщепится пучок атомов бериллия в низшем возбужденном состоянии в эксперименте Штерна и Герлаха в случае слабого и сильного магнитных полей. В сильном поле LS взаимодействием пренебречь. Оценить величину критического магнитного поля.

18.22. Пучок атомов водорода в состоянии $2p$ пролетает через область неоднородного магнитного поля. На сколько компонент произойдет расщепление пучка в случае слабого и сильного магнитного полей. Определить критическую величину магнитного поля, разделяющего области слабого и сильного полей.

18.23. Напишите электронные конфигурации элементов третьего периода таблицы Менделеева ($Z=11-18$). У каких из этих элементов, находящихся в основном состоянии, в опыте Штерна – Герлаха расщепление пучка атомов не произойдет? Магнитное поле считать слабым.

18.24. На сколько компонент расщепятся в опыте Штерна-Герлаха (в слабом поле) пучки атомов, находящихся в состояниях 5F_1 , 3D_1 ?

² Всюду в этом разделе, если это не оговорено особо, магнитное поле полагается слабым.

18.25. Пучок атомов в нижнем энергетическом состоянии, принадлежащим rd – конфигурации, пролетает через область неоднородного магнитного поля. На сколько компонент произойдет расщепление в случае слабого и сильного магнитного полей? Оценить критическую величину магнитного поля.

18.26. Пучок атомов в состоянии ${}^4D_{1/2}$ пролетает через область слабого неоднородного магнитного поля. На сколько компонент произойдет расщепление пучка? В какой конфигурации такое состояние является основным?

18.27. Пучок атомов в состоянии ${}^4D_{7/2}$ пролетает через область сильного неоднородного магнитного поля. На сколько компонент произойдет расщепление пучка? В какой конфигурации возможно такое состояние?

18.28. Пучок атомов в нижнем энергетическом состоянии, принадлежащим nd^2 – конфигурации, пролетает через область неоднородного магнитного поля. На сколько компонент произойдет расщепление в случае слабого и сильного магнитного полей? Оценить критическую величину магнитного поля.

18.29. Пучок возбужденных атомов гелия пролетает через область неоднородного магнитного поля. На сколько компонент произойдет расщепление пучка, если атомы были приготовлены в суперпозиции состояний, принадлежащих конфигурации $1s2s$?

18.30. Пучок атомов водорода пролетает через область неоднородного магнитного поля. На сколько компонент произойдет расщепление пучка, если атомы водорода были приготовлены в суперпозиции $1s$ и $2s$ состояний?

18.31. Имеется последовательность трех приборов Штерна и Герлаха, градиент магнитного поля в которых направлен:

- а) вдоль оси z , вдоль оси y , вдоль оси z ;
- б) вдоль оси z , вдоль оси y , вдоль оси y ;
- в) вдоль оси z , вдоль оси y , под углом $\pi/4$ к оси z в плоскости zy ;

Определить число компонент, на которые расщепится пучок атомов водорода в основном состоянии, на выходе из описанной системы.

18.32. В эксперименте О.Штерн и В.Герлах (1922 г.) наблюдали расщепление пучка атомов серебра в основном состоянии при пролете через область неоднородного магнитного поля. Исторически целью эксперимента являлась проверка предложенного Бором правила квантования механического момента. Расщепление пучка на две компоненты было истолковано, как подтверждение правила квантования по Бору. Почему? В чем отличие интерпретации результатов опыта Штерна-Герлаха в рамках модели Бора и квантовой механики?

18.33. Начертить схему зеемановского расщепления спектральной линии для перехода ${}^3S_1 \leftrightarrow {}^3P_2$ и определить сдвиг отдельных компонент относительно невозмущенной линии. Напряженность поля $H = 6 \cdot 10^3 \text{ Э}$.

18.34. Сколько спектральных линий будет наблюдаться при переходах ${}^1D_2 \leftrightarrow {}^1P_1$ и ${}^3D_2 \leftrightarrow {}^3P_1$ в слабом магнитном поле?

18.35. Изобразить графически расщепление уровней ${}^4D_{5/2}$ и ${}^4F_{7/2}$ в слабом магнитном поле и указать возможные переходы между ними.

18.36. Каков характер (нормальный, аномальный) эффекта Зеемана в слабом магнитном поле для первых девяти элементов периодической системы?

18.37. Какой эффект Зеемана (нормальный, аномальный) наблюдается при переходах: 1. ${}^1S_0 \leftrightarrow {}^1P_1$, 2. ${}^2D_{3/2} \leftrightarrow {}^2P_{3/2}$, 3. ${}^3S_1 \leftrightarrow {}^3P_0$, 4. ${}^3S_1 \leftrightarrow {}^3P_1$.

18.38. “Расстояние” между крайними зеемановскими компонентами спектральной линии ${}^3S_1 \leftrightarrow {}^3P_2$ ($\lambda = 4811 \text{ \AA}$ составляет 0.5 \AA). Определить величину магнитного поля.

18.39. Оценить критическую величину магнитного поля, выше которой наблюдается эффект Пашена-Бака для резонансного дублета цезия ($\lambda_1 = 8521 \text{ \AA}$, $\lambda_2 = 8943 \text{ \AA}$).

18.40 Длины волн головной линии основной серии атома натрия составляют 5890 \AA и 5896 \AA соответственно. Сколько линий будет наблюдаться в эффекте Зеемана на этом переходе в слабом магнитном поле? Оценить величину критического магнитного поля, при котором на этом переходе будет наблюдаться эффект Пашена – Бака.

18.41. На каких линиях серии Лаймана иона He^+ при $H = 300 \text{ Э}$ будет наблюдаться эффект Пашена-Бака?

18.42. Для каких линий серии Лаймана атома водорода магнитное поле Земли $H \sim 0.5 \text{ Э}$ является критическим?

18.43. Нарисовать схему расщепления и возможные переходы между уровнями термов 2P и 2S в слабом и сильном магнитном поле. В сильном поле LS взаимодействием пренебречь.

18.44. Определить число компонент расщепления и расстояние между крайними π - компонентами линии ${}^3F_2 \leftrightarrow {}^3D_1$ в магнитном поле с напряженностью $H = 10^4 \text{ Э}$.

18.45. Нарисовать схему переходов, определить число компонент и величину расщепления в эффекте Зеемана на линии ${}^4D_{1/2} \rightarrow {}^4P_{1/2}$. Магнитное поле считать слабым.

18.46. Нарисовать схему переходов, определить число компонент и величину расщепления в эффекте Зеемана на переходе ${}^1F_3 \rightarrow {}^1D_2$. Магнитное поле считать слабым.

18.47. Рассмотреть эффект Зеемана в слабом магнитном поле на переходе между основным и нижним возбужденным состоянием атома Al (определить число линий и величину расщепления). Оценить величину критического магнитного поля, разделяющего область слабых и сильных магнитных полей.

18.48. Нарисовать картину зеемановского расщепления на переходе ${}^5P_1 \rightarrow {}^5D_0$ в слабом магнитном поле. Сколько линий будет наблюдаться на указанном переходе? Определить величину расщепления.

18.49. Нарисовать картину зеемановского расщепления на переходах $nd^3n'p {}^5D_4 \rightarrow nd^4 {}^5D_4$, $nd^3n'p {}^5D_2 \rightarrow nd^4 {}^5D_1$ и $nd^3n'p {}^5D_1 \rightarrow nd^4 {}^5D_0$ в слабом магнитном поле. Сколько линий будет наблюдаться на указанных переходах? Определить величину расщепления.

18.50. Нарисовать картину зеемановского расщепления на переходах $np^2 {}^3P_1 \rightarrow np, n'd {}^3P_1$, $pd {}^1D_2 \rightarrow np, n'p {}^1P_1$ и $sp {}^3P_1 \rightarrow np, n'p {}^3P_0$ в слабом магнитном поле. Сколько линий будет наблюдаться на указанных переходах? Определить величину расщепления.

18.51. Нарисовать картину зеемановского расщепления между нижними термами электронных конфигураций $1s2p$ и $1s2s$ атома гелия в слабом магнитном поле. Сколько линий будет наблюдаться на указанных переходах? Определить величину расщепления.

18.52. Изобразите схему расщеплений и разрешенных переходов в слабом магнитном поле для одной из спектральных линий серии поглощения из основного состояния атома цинка ($Z=30$), принадлежащего конфигурации (заполн. оболочки) $4s^2$. Сколько спектральных линий будет видно в спектрографе?

18.53. Нарисовать картину зеемановского расщепления L_{β} линии серии Лаймана в спектре атома водорода в магнитном поле $H = 1$ кЭ. Рассчитать величину расщепления. Определить величину критического магнитного поля для этого перехода.

18.54. Нарисовать картину зеемановского расщепления десятой линии серии Лаймана в спектре атома водорода в магнитном поле $H = 1$ кЭ. Рассчитать величину расщепления. Определить величину критического магнитного поля для этого перехода.

18.55. Напишите электронные конфигурации элементов таблицы Менделеева ($Z=11-20$). У каких из этих элементов при переходе из возбужденного состояния в основное можно наблюдать нормальный эффект Зеемана?

18.56. Рассмотрите эффект Зеемана для перехода ${}^5G_2 \rightarrow {}^5F_1$. Покажите на схеме расщепление каждого из уровней в магнитном поле и разрешенные переходы. Исходя из факторов Ланде для каждого из уровней,

определите смещения расщепленных подуровней относительно первоначального состояния и частоты, наблюдаемые в спектре. Магнитное поле считать «слабым».

18.57. Определить частоту СВЧ излучения, при которой будет наблюдаться резонансное поглощение СВЧ мощности веществом, содержащим ионы хрома Cr^+ (электронная конфигурация $3d^5$) и помещенным во внешнее магнитное поле напряженностью H .

18.58. Показать, что для всех уровней, у которых $L=S$ и $J \neq 0$, множитель Ланде равен $g=3/2$.

18.59. В каких случаях спектральная линия в слабом магнитном поле расщепляется на три компоненты?

18.60. Определите условие, при котором для обоих уровней спектральной линии множители Ланде $g_{J_1}, g_{J_2} \rightarrow 1$, то есть, когда сложный эффект Зеемана вырождается в простой?

18.61. Показать, что для каждого уровня с $J=J_{max}=L+S$ множитель Ланде равен $g=1+S/J_{max}$.

19. Основы физики молекул.

1. В двухатомной молекуле стационарные состояния электронов можно охарактеризовать точно определенным значением проекции орбитального момента на межъядерную ось. Состояния электронов в оболочке обозначаются в соответствии со схемой:

проекция момента - $\lambda = |m_\ell| = 0, 1, 2, 3 \dots$
 состояние электрона - $\sigma, \pi, \delta, \phi$

Здесь квантовое число m_ℓ определяют проекцию орбитального момента электрона на ось молекулы.

2. Квантовые числа, характеризующие состояние электронной оболочки молекулы:

а) проекция орбитального момента электронной оболочки на ось молекулы

$$\Lambda = \left| \sum m_\ell \right|,$$

проекция момента - $\Lambda = 0, 1, 2, 3, \dots$

состояние оболочки - $\Sigma, \Pi, \Delta, \Phi, \dots$

б) мультиплетность $2S + 1$, S - полный спин

3. Термы электронной оболочки молекулы принято записывать в виде:

$$^{2S+1}\Lambda,$$

Например: $^1\Sigma, ^3\Pi, ^2\Delta, \dots$ и т.п.

Основной терм двухатомной молекулы, за редкими исключениями, $^1\Sigma$.

4. Энергия колебаний двухатомной молекулы в приближении гармонического осциллятора:

$$E_v = \hbar \Omega (v + 1/2),$$

где $\Omega = \sqrt{k/\mu}$ - частота колебаний (гармонических) молекулы, k - постоянная квазиупругой силы, v - колебательное квантовое число, $v = 0, 1, 2, 3, \dots$

5. Энергия ангармонических колебаний двухатомной молекулы, описываемой потенциалом Морзе:

$$E_v = \hbar \Omega (v + 1/2) - \kappa \hbar \Omega (v + 1/2)^2$$

где $\kappa = \hbar \Omega / 4D$ - постоянная ангармонизма; D - энергия диссоциации молекулы.

6. Вращательная энергия жесткой двухатомной молекулы:

$$E_J = \frac{\hbar^2}{2I} J(J + 1) = BJ(J + 1),$$

где $B = \hbar^2/2I$ - вращательная постоянная, $I = \mu R_0^2$ - момент инерции двухатомной молекулы, $\mu = M_1 M_2 / (M_1 + M_2)$ - приведенная масса; M_1 и M_2 - массы атомов, R_0 - равновесное расстояние между ядрами.

7. Ядерный момент количества движения молекулы, вращающейся с частотой ω : $L = I\omega = \hbar\sqrt{J(J+1)}$, где J - вращательное квантовое число, $J = 0, 1, 2 \dots$

8. Правила отбора для электрических дипольных излучательных переходов:

$$\Delta L = 0, \pm 1, \quad \Delta S = 0,$$

$\Delta v = \pm 1$ (приближение гармонического осциллятора для колебательно вращательных переходов в гетероядерных молекулах),

$$\Delta J = \begin{cases} \pm 1 & \text{для гомоядерных молекул,} \\ 0, \pm 1 & \text{для гетероядерных молекул.} \end{cases}$$

19.1. Частица массы m находится в потенциале (сферическая система координат) $V = V(r, \theta)$. Написать общее выражение для волновой функции состояния с точно определенным значением z - проекции момента количества движения. Может ли такое состояние быть стационарным? (см. задачу 6.13.)

19.2. Какие электронные конфигурации и молекулярные термы возникают при образовании молекулярного иона водорода H_2^+ из: а) $H(1s) + H^+$; б) $H(2p) + H^+$?

19.3. Какие электронные конфигурации и молекулярные термы возникают при образовании молекулы водорода: а) из двух атомов в $1s$ - состояниях; б) из атомов в $1s$ и $2p$ - состояниях?

19.4. Какие молекулярные термы образуют атомы а) $O + H$, б) $F + F$, в) $H + Cl$, г) $C + N$, д) $C + H$, е) $C + O$, находящиеся в основном состоянии?

19.5. Какие молекулярные термы могут образовать атомы Na и F , если атом F находится в основном, а атом Na - в нижнем возбужденном состоянии?

19.6. Какие молекулярные термы могут образовать атомы Li и Cl , если атом Cl находится в основном, а атом Li - в нижнем возбужденном состоянии?

19.7. Какие молекулярные термы могут образовать два атома водорода, находящиеся в состояниях $2s$ и $2p$?

19.8. Какие молекулярные термы могут образовать два атома лития, один из которых находится в основном, а другой - в нижнем возбужденном состоянии?

19.9. Эффективный потенциал взаимодействия ядер в двухатомной молекуле может быть аппроксимирован выражениями

$$\text{потенциал Морзе: } V(R) = D(1 - \exp(-\alpha(R - R_0)))^2, \quad \alpha R_0 \gg 1,$$

$$\text{потенциал Кратцера: } V(R) = D(R_0^2/R^2 - 2R_0/R),$$

где R - межъядерное расстояние. Считая, что массы атомов образующих молекулы равны M , исходя из соотношения неопределенностей, оценить величину энергии основного состояния (нулевых колебаний).

19.10. В условиях предыдущей задачи, оценить размер области локализации ядерного волнового пакета, соответствующего основному колебательному состоянию молекулы. Сравнить полученное значение с равновесным расстоянием между ядрами.

19.11. Определить амплитуду нулевых колебаний ядер в молекуле водорода в основном колебательном состоянии; колебательная частота равна $\Omega \approx 8.29 \cdot 10^{14} \text{ с}^{-1}$. Сравните амплитуду с равновесным межъядерным расстоянием $R = 0.84 \text{ \AA}$.

19.12. Молекулярный терм некоторой молекулы задается выражением $V_{\text{eff}}(R) = D(R_0^2/R^2 - 2R_0/R)$. Найти колебательно-вращательный спектр молекулы.

19.13. Считая степень колебательного возбуждения малой, решить предыдущую задачу в приближении гармонических колебаний.

19.14. Одно из ядер (массовое число ~ 10) двухатомной молекулы поглощает γ - квант с энергией $E \approx 1 \text{ МэВ}$. Энергия диссоциации молекулы $D \approx 1 \text{ эВ}$. Может ли молекула диссоциировать после поглощения ядром γ - кванта?

19.15. Определить энергию диссоциации молекулы водорода, находящейся в основном состоянии, если частота ее колебаний равна $\Omega \approx 8.29 \cdot 10^{14} \text{ с}^{-1}$, а постоянная ангармоничности $\kappa = 0.0285$.

19.16. Найдите отношение колебательных частот молекул водорода H_2 , дейтерия D_2 и трития T_2 (изотопический сдвиг).

19.17. Отношение колебательных частот молекул D_2 и H_2 равно 0.707 (см. задачу 19.16), а для молекул DCl^{35} и HCl^{35} оно равно 0.717, т.е. близко к отношению колебательных частот молекул дейтерия и водорода. Объясните причину этого явления.

19.18. Энергия диссоциации молекулы водорода равна $D_H = 4.46 \text{ эВ}$, а молекулы дейтерия $D_D = 4.54 \text{ эВ}$. Оценить энергию нулевых колебаний молекулы H_2 . Равновесные расстояния между ядрами этих молекул одинаковы.

19.19. Энергия диссоциации и энергия нулевых колебаний молекулы H_2 равны $D_H = 4.46 \text{ эВ}$ и $E_0 = 0.26 \text{ эВ}$ соответственно. Определите энергию диссоциации D_D молекулы дейтерия D_2 .

19.20. Определить теплоемкость разреженного газа, состоящего из двухатомных молекул. Молекулы считать гармоническими осцилляторами.

19.21. Теплоемкость молекулярного водорода H_2 при температуре $T = 1000 \text{ K}$ равна $C_H = 2.7k$ (k - постоянная Больцмана). Определить теплоемкость молекулярного дейтерия D_2 при той же температуре.

19.22. Двухатомная молекула состоит из атомов с массами M_1 и M_2 . Определить изотопический сдвиг в колебательном спектре этой молекулы, возникающий при изменении массы ядра M_1 на величину $\Delta M_1 \ll M_1$.

19.23. Определите частоту колебаний молекулы бромистого водорода, если длины волн фиолетового (антистоксова) и красного (стоксова) спутников комбинационного рассеяния (КР) равны: $\lambda_a = 3385 \text{ \AA}$ и $\lambda_s = 4095 \text{ \AA}$.

19.24. Определите частоту колебаний молекулы кислорода, если при температуре $T = 400 \text{ K}$ отношение интенсивностей фиолетового и красного спутников в спектре комбинационного рассеяния равно $\eta = 0.004$.

19.25. Определите длины волн фиолетового (λ_a) и красного (λ_s) спутников в колебательном спектре комбинационного рассеяния молекул кислорода, возбуждаемого квантами света с длиной волны $\lambda = 3650 \text{ \AA}$. Частота собственных колебаний молекулы кислорода $\Omega \approx 2.97 \cdot 10^{14} \text{ c}^{-1}$.

19.26. Определить межъядерное расстояние в молекуле HBr , если волновые числа линий ее вращательного спектра разделены интервалом $\Delta\nu = 17 \text{ cm}^{-1}$.

19.27. Оценить влияние изотопического эффекта на вращательные уровни двухатомной молекулы.

19.28. Определить оператор дипольного момента для ядерной подсистемы молекул H_2^+ и HD^+ . Показать, что в гомоядерных молекулах в дипольном приближении электромагнитные переходы в пределах одного электронного термина запрещены.

19.29. В двухатомной молекуле происходит электромагнитный переход из основного колебательного состояния возбужденного электронного термина на нижележащий электронный терм. Определить вероятность колебательного возбуждения молекулы, если энергии колебательных квантов на обоих терминах одинаковы, а равновесное межъядерное расстояние на верхнем терме в два раза больше, чем на нижнем терме $R^* = 2R_g$. Колебания молекулы в обоих электронных состояниях считать гармоническими.

19.30. Оценить характерное время жизни относительно электромагнитного перехода колебательно-возбужденной молекулы $NaCl$. Колебания молекулы считать гармоническими, энергия колебательного кванта $\hbar\Omega = 0.045 \text{ эВ}$.

19.31. В твердом теле потенциальная энергия межатомного взаимодействия в зависимости от расстояния между атомами R определяется выражением $V(R) = D(1 - \exp(-\alpha(R - R_0)))^2$. Определить коэффициент теплового линейного расширения твердого тела. Сделать численную оценку для $D = 4$ эВ, $R_0 = 2 \text{ \AA}$, $\alpha = 10^7 \text{ см}^{-1}$.

19.32. Рассматривая атомный электрон как квантовый осциллятор с частотой ω_0 , показать, что на больших расстояниях между атомами $R \gg a_0$ (a_0 - характерная амплитуда колебаний электрона) возникают силы притяжения, описываемые потенциалом $U(R) \sim -1/R^6$ (силы Ван-дер-Ваальса).

Решения

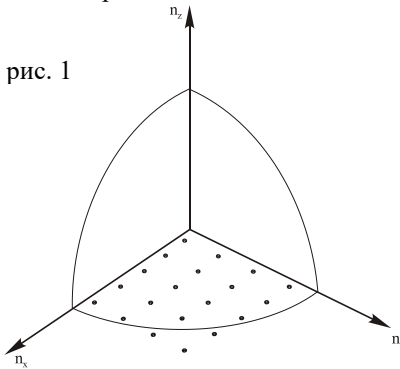
I. История развития квантовых представлений

1. Равновесное электромагнитное излучение.

1.1. Запишем условие образования стоячих волн в полости $L \times L \times L$ с зеркальными стенками:

$$k_x = \frac{\pi}{L} n_x \quad k_y = \frac{\pi}{L} n_y \quad k_z = \frac{\pi}{L} n_z,$$

где k_x, k_y, k_z - компоненты волнового вектора \vec{k} ; n_x, n_y, n_z - целые числа. Таким образом, каждая колебательная мода характеризуется набором из трех целых чисел и может быть изображена точкой в 3-х мерном k -пространстве (см. рис.).



Учитывая, что $\omega = ck$, получим:

$$n_x^2 + n_y^2 + n_z^2 = \left(\frac{L\omega}{\pi c} \right)^2.$$

Тогда искомое число колебательных мод N равно числу точек, которое попадает внутрь элемента сферы радиуса $L\omega/\pi c$ (см. рис.):

$$N = 2 \frac{1}{8} \cdot \frac{4}{3} \pi (L\omega/\pi c)^3 = \frac{1}{3} \frac{\omega^3}{\pi^2 c^3} L^3.$$

Здесь мы также учли, что каждой точке на рис. 1 соответствует два состояния поляризации, поэтому общее число мод должно удвоиться. Продифференцируем полученное выражение и поделим на объем полости. Тогда число колебательных мод электромагнитного поля в единице объема в интервале частот $(\omega, \omega + d\omega)$ дается выражением:

$$dn_\omega = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3} d\omega.$$

$$1.2. \langle \varepsilon \rangle = \frac{\sum_n \varepsilon_n e^{-\varepsilon_n/kT}}{\sum_n e^{-\varepsilon_n/kT}}, \text{ где } \varepsilon_n = n\hbar\omega, n=0,1,2,\dots$$

Воспользовавшись свойствами бесконечно убывающей геометрической прогрессии, проведем суммирование и получим:

$$\langle \varepsilon \rangle = \frac{\hbar\omega}{e^{\hbar\omega/kT} - 1}.$$

1.3. а) Полагая в формуле Планка $\exp(\hbar\omega/kT) \cong 1 + \hbar\omega/kT$ при $\hbar\omega/kT \ll 1$, получим:

$$\rho_{\omega}(T) \cong \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3} kT \quad (\text{закон Рэлея-Джинса}).$$

б) Пренебрегая в знаменателе формулы Планка единицей по сравнению с $\exp(\hbar\omega/kT)$ при $\hbar\omega/kT \gg 1$, получим:

$$\rho_{\omega}(T) \cong \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3} e^{-\hbar\omega/kT} \quad (\text{закон Вина}).$$

1.4. а)
$$u(T) = \int_0^{\infty} \rho_{\omega}(T) d\omega = \frac{k^4 T^4}{\pi^2 c^3 \hbar^3} \int_0^{\infty} \frac{x^3 dx}{e^x - 1},$$

где в подынтегральном выражении введен безразмерный параметр $x = \hbar\omega/kT$. Значение интеграла дано в приложении. Окончательный результат имеет вид:

$$u(T) = \alpha T^4,$$

где
$$\alpha = \frac{\pi^2 k^4}{15 c^3 \hbar^3} = 7.57 \cdot 10^{-15} \left(\frac{\text{эрг}}{\text{см}^3 \text{К}^4} \right).$$

б)
$$S(T) = \frac{c}{4} u(T) = \sigma T^4,$$

где
$$\sigma = \frac{\pi^2 k^4}{60 c^2 \hbar^3} = 5.67 \cdot 10^{-5} \left(\frac{\text{эрг}}{\text{см}^2 \text{с} \text{К}^4} \right).$$

1.5.
$$n(T) = \int_0^{\infty} n_{\omega}(T) d\omega = \frac{k^3 T^3}{\pi^2 \hbar^3 c^3} \cdot \int_0^{\infty} \frac{x^2 dx}{e^x - 1},$$

где в подынтегральном выражении введен безразмерный параметр $x = \hbar\omega/kT$. Значение интеграла дано в приложении. Окончательный результат имеет вид:

$$n(T) = \eta T^3, \quad \eta \cong \frac{2.4 \cdot k^3}{\pi^2 \hbar^3 c^3} = 20.3 \text{ см}^{-3} \text{К}^{-3}.$$

1.6.
$$\langle \varepsilon \rangle = u(T)/n(T) = \alpha T^4 / \eta T^3 = \chi T,$$

где $\chi \cong \frac{\pi^4}{2.4 \cdot 15} k = 3.73 \cdot 10^{-16} \text{ эрг} \cdot \text{К}^{-1}$.

1.7. Воспользуемся соотношением $\rho_\omega d\omega = -\rho_\lambda d\lambda$. Знак “-“ отражает тот факт, что росту частоты излучение соответствует уменьшение длины волны. Далее, чтобы получить выражение для ρ_λ , необходимо в формуле Планка для ρ_ω провести замену переменной: $\omega = 2\pi c/\lambda$, а также преобразовать дифференциал $d\omega = -2\pi c/\lambda^2 d\lambda$. Окончательный результат имеет вид:

$$\rho_\lambda = \frac{8\pi h c}{\lambda^5} \frac{1}{\exp(hc/\lambda k T) - 1}.$$

1.8. Выражение для спектральной плотности энергии ρ_λ можно привести к виду $\rho_\lambda = C \cdot f(x)$, где C - некоторая константа, а $x = hc/\lambda k T$ - безразмерный параметр. Максимум спектральной плотности находится в точке x_0 , в которой $f'(x_0) = 0$. Тогда получим $\lambda_{\max} T = hc/kx_0$, или $\lambda_{\max} T = B$.

1.9. Из условия $d\rho_\lambda/dx = 0$, где $x = hc/\lambda k T$, получим уравнение:

$$5 - x = 5e^{-x} \quad (1)$$

Подбором ($x_0 = 5 + \delta$, $\delta \ll 1$) найдем корень уравнения (1): $x_0 \cong 4.965$. Тогда $B = hc/kx_0 \cong 0.29 \text{ см} \cdot \text{К}$.

Из аналогичного условия $d\rho_\omega/dy = 0$, где $y = \hbar\omega/kT$, получим:

$$3 - y = 3e^{-y} \quad (2)$$

Подбором ($y_0 = 3 + \varepsilon$, $\varepsilon \ll 1$) найдем корень уравнения (2): $y_0 \cong 2.8$. Тогда $\omega_{\max} = A \cdot T$, где $A = ky_0/\hbar \cong 3.7 \cdot 10^{11} \text{ с}^{-1} \cdot \text{К}^{-1}$.

Так как $\omega_{\max} = A \cdot T$, $\omega^* = 2\pi c/\lambda_{\max} = 2\pi c T/B$, получим $\omega^*/\omega_{\max} = 2\pi c/AB \cong 1.76$.

Чтобы ответить на вопрос о причине расхождения, достаточно заметить, что:

$$\rho_\lambda = \rho_\omega(\omega(\lambda)) \cdot \frac{2\pi c}{\lambda^2}. \quad (3)$$

Тогда

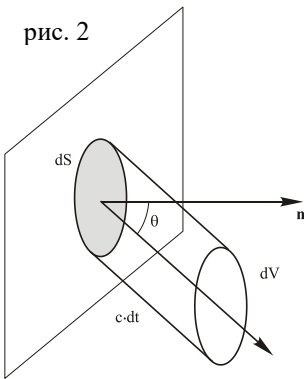
$$\frac{d\rho_\lambda}{d\lambda} = \frac{d\rho_\omega}{d\omega} \frac{d\omega}{d\lambda} \cdot \frac{2\pi c}{\lambda^2} + \rho_\omega(\omega(\lambda)) \cdot \frac{d(2\pi c/\lambda^2)}{d\lambda}. \quad (4)$$

Если бы не второй член в выражении (4), из условия $d\rho_\omega/d\omega = 0$ сразу следовало бы $d\rho_\lambda/d\lambda = 0$, и ω_{\max} совпадала бы с $\omega^* = 2\pi c/\lambda_{\max}$. Таким образом, различие частот полностью обусловлено наличием в (3) дополнительного фактора $2\pi c/\lambda^2$, который проистекает из нелинейной связи между дифференциалами $d\omega$ и $d\lambda$.

1.10. $\omega_{\max} \cong 2.13 \cdot 10^{15} \text{ c}^{-1}$, $\omega^* \cong 3.75 \cdot 10^{15} \text{ c}^{-1}$.

1.11. Согласно закону Стефана-Больцмана интегральная лучеиспускательная способность $S(T) = \sigma T^4$. Исходя из этого, получим, что Солнце за 1 секунду излучает энергию

$$W = 4\pi R^2 \sigma T^4 \cong 3.87 \cdot 10^{33} \text{ эрг} / \text{c}.$$



1.12. Выделим элемент поверхности черного тела площадью dS . Вся энергия электромагнитного излучения, которая попадает на площадку, целиком поглощается, а затем переизлучается в пространство. Таким образом, чтобы найти поток энергии с поверхности абсолютно черного тела нужно найти энергию излучения, которая падает на поверхность в единицу времени. Учитывая изотропию равновесного теплового излучения, получим, что энергия, приходящая из элемента телесного угла $d\Omega = \sin \vartheta d\theta d\varphi$, дается выражением (см. рис.):

$$dW_\omega = dV \cdot \rho_\omega(T) \cdot \frac{d\Omega}{4\pi} = dS \cdot c dt \cos \vartheta \cdot \rho_\omega(T) \cdot \frac{d\Omega}{4\pi}.$$

Тогда $dI_\omega = \frac{c\rho_\omega(T)}{4\pi} \cdot \cos \vartheta d\Omega$. Проинтегрировав данное выражение по всем направлениям, получим:

$$I_\omega(T) = \frac{c\rho_\omega(T)}{4\pi} \cdot \int \cos \vartheta d\Omega = \frac{c}{4} \rho_\omega(T).$$

Интегральный поток энергии дается выражением:

$$S(T) = \int_0^\infty I_\omega(T) d\omega = \frac{c}{4} u(T) = \sigma T^4.$$

1.13. $\beta = \frac{W}{4\pi R_{orb}^2} = \frac{4\pi R_S^2}{4\pi R_{orb}^2} \sigma T^4 \cong 1.37 \cdot 10^6 \text{ эрг} / \text{см}^2 \text{ c} = 1.37 \text{ квт} / \text{м}^2.$

1.14. Температуру холодной (темной) звезды находим из закона смещения Вина $\lambda_X T_X = 0.29 \text{ см} \cdot \text{К}$: $T_X = 10^4 \text{ К}$. Пульсации мощности излучения – результат “захода” одной звезды за другую. Таким образом, $(T_\Gamma/T_X)^4 = 256$; $T_\Gamma = 4 \cdot 10^4 \text{ К}$.

$$\mathbf{1.15.} \quad n_{3\text{К}} \cong 545 \text{ см}^{-3}, \quad n_{300\text{К}} \cong 5.45 \cdot 10^8 \text{ см}^{-3}.$$

1.16. При энергии квантов $\hbar\omega > \hbar\omega_0 = 1 \text{ эВ}$ и температуре излучения $T = 300 \text{ К}$ выполняется соотношение $\hbar\omega/kT \gg 1$. Тогда для проведения оценки вместо формулы Планка можно воспользоваться асимптотическим приближенным выражением:

$$\rho_\omega(T) \cong \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3} e^{-\hbar\omega/kT} \quad (\text{формула Вина}).$$

$$\begin{aligned} \text{Тогда } n_0(T) &= \int_{\omega_0}^{\infty} \rho_\omega / \hbar\omega d\omega \cong \frac{k^3 T^3}{\pi^2 \hbar^3 c^3} \cdot \int_{\hbar\omega_0/kT}^{\infty} x^2 e^{-x} dx \cong \\ &\cong \frac{kT\omega_0^2}{\pi^2 \hbar c^3} e^{-\hbar\omega_0/kT} \cong 5.4 \cdot 10^{-6} \text{ см}^{-3}. \end{aligned}$$

$$\mathbf{1.17.} \quad n_0 \cong 2 \cdot 10^{-5} \text{ см}^{-3}.$$

1.18. При энергии квантов $\hbar\omega < \hbar\omega_0 = 0.1 \text{ эВ}$ и температуре излучения $T = 1 \text{ эВ}$ выполняется соотношение $\hbar\omega/kT \ll 1$. Тогда для проведения оценки вместо формулы Планка можно воспользоваться асимптотическим приближенным выражением для низких частот:

$$\rho_\omega(T) \cong \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3} kT \quad (\text{закон Рэлея-Джинса}).$$

$$\text{Тогда } n_0(T) = \int_0^{\omega_0} \rho_\omega / \hbar\omega d\omega \cong \frac{k^3 T^3}{\pi^2 \hbar^3 c^3} \cdot \int_0^{\hbar\omega_0/kT} x dx \cong \frac{kT\omega_0^2}{2\pi^2 \hbar c^3} \cong 6.6 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-3}.$$

$$\mathbf{1.19.} \quad \Delta T \cong -304 \text{ К}.$$

1.20. Увеличится в 3 раза.

$$\mathbf{1.21.} \quad \text{а) } \lambda_{\text{max}} = B/T \cong 1 \text{ мм}.$$

$$\text{б) } n(T) = \eta T^3 \cong 399 \text{ см}^{-3} \quad (\text{см. задачу 1.5})$$

$$\text{в) } \langle \lambda \rangle = \frac{1}{n} \int_0^{\infty} \lambda n_\lambda d\lambda,$$

где $n_\lambda d\lambda = \frac{\rho_\lambda d\lambda}{\hbar\omega} = \frac{8\pi}{\lambda^4} \frac{d\lambda}{e^{\hbar c/\lambda kT} - 1}$. Подставим приведенное выражение в интеграл и получим: $\langle \lambda \rangle = \frac{\pi^3}{7.2} \frac{\hbar c}{kT} = 0.36 \text{ см}$.

1.22. Запишем формулу Планка в виде $\rho_\omega(T) = \text{const } f(x)$, $x = \hbar\omega/kT$.

Тогда искомая доля есть $\eta = \frac{\int_{x_{\max}}^{\infty} f(x) dx}{\int_0^{\infty} f(x) dx}$. Интеграл в знаменателе равен

$\pi^4/15$ (см. Приложение). Интеграл в числителе можно оценить, считая $x_{\max} = 2.8214$ «достаточно большим», чтобы использовать формулу Вина $f(x) \approx x^3 e^{-x}$. Получаем $\int_{x_{\max}}^{\infty} x^3 e^{-x} dx = \Gamma(4, x_{\max})$ - неполная гамма-

функция, представимая **конечным** рядом $\Gamma(n+1, x) = n! e^{-x} \sum_{m=0}^n \frac{x^m}{m!}$. Так

что $\eta = \frac{\Gamma(4, x_{\max})}{\pi^4/15} = 0.636$. Точное численное интегрирование дает значение 0.646. Для оценок - приблизительно 2/3. Отметим, что эта доля энергии **не зависит** от температуры.

2. Корпускулярные свойства излучения.

2.1. Интегральная по спектру плотность потока солнечных фотонов на орбите Земли равна

$$\Pi = \frac{c}{4} \frac{R_S^2}{R_{orb}^2} \int_0^{\infty} n_\omega(T) d\omega = \frac{c}{4\pi^2} \left(\frac{kT}{\hbar c} \right)^3 \cdot 2.404 \cdot \frac{R_S^2}{R_{orb}^2} \approx 0.633 \cdot 10^{18} \text{ 1/см}^2\text{с}.$$

В зрачок ежесекундно попадает $\Pi \cdot \pi R^2 \approx 2 \cdot 10^{16} \text{ с}^{-1}$.

2.2. $v = \sqrt{\frac{4\pi\hbar c}{m\lambda}} \approx 2.18 \cdot 10^8 \text{ см/с}$ - это скорость электрона на первой

боровской орбите в атоме водорода.

2.3. $\lambda = h/mc \approx 2.43 \cdot 10^{-10} \text{ см}$.

2.4. $\hbar\omega = \sqrt{W^2 + 2Wmc^2}$. Для нерелятивистского случая $W = 100 \text{ эВ}$ имеем $\hbar\omega \approx \sqrt{2Wmc^2} \approx 10^4 \text{ эВ}$, для $W = 1 \text{ МэВ}$ - $\hbar\omega \approx 1.4 \text{ МэВ}$.

2.5. Изменение энергии фотона в гравитационном поле описывается уравнением

$$\hbar d\omega = -G \frac{Mm_{ph}}{r^2} dr,$$

где G – гравитационная постоянная. Интегрируя полученное уравнение с учетом $m_{ph} = \hbar\omega/c^2$, получим $\ln(\omega/\omega_0) = \ln(\lambda_0/\lambda) = -GM/Rc^2$ (интегрирование проводится от поверхности звезды до бесконечности). Отсюда находим $\lambda = \lambda_0 \exp(R_g/2R)$, где $R_g = 2GM/c^2$ – радиус Шварцшильда. Поскольку $R \gg R_g$, имеем $\lambda \approx \lambda_0(1 + R_g/2R)$. Поэтому $\Delta\lambda = \lambda - \lambda_0 \approx \lambda_0 R_g/2R \approx 0.023 \text{ \AA}$.

2.6. В поле тяготения Солнца вследствие «притяжения» фотонов к Солнцу происходит изменение волнового вектора k на величину $\hbar\Delta k_{\perp} \sim GM \frac{\hbar\omega/c^2}{R^2} \frac{2R}{c} \ll k$. Отсюда получаем оценку для угла отклонения $\vartheta = \Delta k_{\perp}/k \approx 2GM/(c^2 R) = R_g/R \approx 7.1 \cdot 10^{-6} \approx 1.47''$. Полученный ответ является точным в рамках ньютоновской теории тяготения. Экспериментальные измерения, проведенные в 1919 году дали вдвое большее значение, совпадающее с предсказаниями общей теории относительности.

2.7. Величина доплеровского смещения $\Delta\lambda_D = \lambda \cdot v/c$. Величина гравитационного красного смещения (см. задачу 2.5) $\Delta\lambda_G = \lambda \frac{GM}{Rc^2}$. Отсюда

$$\frac{\Delta\lambda_D}{\Delta\lambda_G} = \frac{vR}{GM} \approx 4.7 \cdot 10^4 \gg 1. \text{ Поэтому гравитационное смещение можно не}$$

учитывать при определении лучевой скорости звезды по доплеровскому смещению.

2.8. Колебательная энергия электрона $E_e = e^2 E_0^2 / 4m\omega^2$.

2.9. Будем считать электрон неподвижным. Если допустить, что фотон передает электрону всю свою энергию, то из закона сохранения энергии $\hbar\omega + mc^2 = \sqrt{p_e^2 c^2 + m^2 c^4}$ следует, что импульс электрона $p_e = \frac{\hbar\omega}{c} \sqrt{1 + 2mc^2/\hbar\omega} = p_{\gamma} \sqrt{1 + 2mc^2/\hbar\omega} > p_{\gamma}$. Это противоречит закону сохранения импульса $\vec{p}_e = \vec{p}_{\gamma}$.

2.10. Красная граница фотоэффекта в опытах Столетова $\omega^* = 2\pi c/\lambda \approx 6.4 \cdot 10^{15}$ см. Работа выхода $A \approx 4.2$ эВ.

2.11. Записывая для обоих случаев закон Эйнштейна фотоэффекта в виде

$$h\nu_1 - A = eU_1,$$

$$h\nu_2 - A = eU_2,$$

найдем $h = e(U_2 - U_1)/(\nu_2 - \nu_1) \approx 6.6 \cdot 10^{-27}$ эрг.с.

$$2.12. W = hc(1/\lambda - 1/\lambda^*) \approx 11.7 \text{ эВ.}$$

$$2.13. A = \frac{1}{3} \frac{hc}{\lambda_2} (4 - \lambda_2 / \lambda_1) \approx 1.89 \text{ эВ.}$$

2.14. Воздействующее излучение представляет собой поток квантов с энергиями $\hbar\omega_0 = 4.21$ эВ и $\hbar(\omega_0 \pm \omega) = 7.37, 1.05$ эВ. Поэтому в спектре фотоэлектронов будет два пика с энергиями 0.61 и 3.77 эВ соответственно.

2.15. Величина фототока j_e определяется потоком квантов излучения, частота которых превышает красную границу фотоэффекта

$\omega^* = A/\hbar$: $j_e = e\eta\Pi S$, где $\Pi = \frac{c}{4} \left(\frac{R_S}{R_{orb}} \right)^2 \int_{\omega^*}^{\infty} n_{\omega} d\omega$, где R_S, R_{orb} - радиус Солнца и земной орбиты. Учитывая, что интеграл берется по виновской части спектра, получим $\int_{\omega^*}^{\infty} n_{\omega} d\omega \approx \frac{kT(\hbar\omega^*)^2}{\pi^2 c^3 \hbar^3} \exp(-\hbar\omega^*/kT) \approx 3.0 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-3}$.

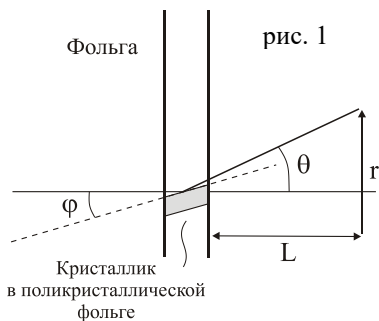
Поэтому $j_e \approx 7.8 \cdot 10^{-6} \text{ А/см}^2$.

2.16. Энергия вырываемого электрона $E_e = \hbar\omega - A$. Поэтому для средней энергии фотоэлектронов имеем $\langle \varepsilon \rangle = \int_{\omega^*}^{\infty} (\hbar\omega - A)n_{\omega} d\omega / \int_{\omega^*}^{\infty} n_{\omega} d\omega$,

$\omega^* = A/\hbar$ - красная граница фотоэффекта, $n_{\omega} = \frac{\rho_{\omega}}{\hbar\omega} = \frac{1}{\pi^2 c^3} \frac{\omega^2}{\exp(\hbar\omega/kT) - 1}$

- распределение фотонов по спектру. Учитывая, что в рассматриваемых условиях при вычислении средней энергии интегралы берутся по «виновской» части спектра, для средней энергии получим

$$\langle E_e \rangle \approx \frac{\int_{\omega^*}^{\infty} (\hbar\omega - A)\omega^2 \exp(-\hbar\omega/kT) d\omega}{\int_{\omega^*}^{\infty} \omega^2 \exp(-\hbar\omega/kT) d\omega} = kT.$$



Средняя энергия фотоэлектронов не зависит ни от энергии кванта, ни от работы выхода материала.

2.17. В соотношении Вульфа-Брегга $2d \sin \varphi = n\lambda$ угол φ - угол скольжения, который вдвое меньше угла рассеяния θ (см. рис.). Учитывая это и считая угол φ малым, получим $\sin \varphi = \sin(\theta/2) \approx r/2L$, откуда $\lambda \approx d \cdot r/L \approx 0.36 \text{ \AA}$. Граница тормозного континуума определяется кинетической энергией электрона с длиной волны $\lambda \approx 0.36 \text{ \AA}$: $W \approx h^2/2m\lambda^2 \approx 1.2 \text{ кэВ}$ ($\lambda^* \approx 11 \text{ \AA}$).

$$\mathbf{2.18.} \quad W = \frac{\hbar\omega_0}{1 + \frac{mc^2}{\hbar\omega_0(1 - \cos\theta)}} = 0.36 \text{ МэВ.}$$

2.19. Максимум энергии электронов достигается при рассеянии назад. Поэтому из соотношения $\frac{hc}{\lambda} - \frac{hc}{\lambda + 2\Lambda_e} = K_{\max}$ ($\Lambda_e = h/mc$ - комптоновская длина волны электрона) имеем $\lambda = \Lambda_e \left(-1 + \sqrt{1 + 2mc^2/K_{\max}} \right) \approx 0.73\Lambda_e \approx 1.77 \cdot 10^{-10} \text{ см}$.

2.20. Искомая величина определяется соотношением $\frac{v}{c} = \sqrt{1 - \frac{1}{\left(1 + W/mc^2\right)^2}}$, где $W = \frac{\hbar\omega_0}{1 + \frac{mc^2}{\hbar\omega_0(1 - \cos\theta)}}$ - кинетическая энергия

электрона. В условиях задачи $W = mc^2$, $v = 3c/\sqrt{2} \approx 2.6 \cdot 10^{10} \text{ см/с}$.

$$\mathbf{2.21.} \quad \Delta\lambda = \frac{\Lambda_e}{\varepsilon \left(\frac{\varepsilon}{1/\sqrt{1-\beta^2}} - 1 \right)} \approx 0.00802 \text{ \AA},$$

где $\varepsilon = \hbar\omega_0/mc^2 = \Lambda_e/\lambda_0$.

$$\mathbf{2.22.} \quad \frac{\hbar\omega_0}{\hbar\omega} = 1 + 2 \frac{\hbar\omega_0}{mc^2} = 7.$$

2.23. По условию задачи энергия рассеянного фотона $\hbar\omega = \frac{\hbar\omega_0}{1 + \hbar\omega_0/m_0c^2} = \hbar\omega_0/2$, откуда $\hbar\omega_0 = mc^2$.

2.24. В классической электродинамике интенсивность рассеянного излучения пропорциональна квадрату ускорения заряженной частицы во внешнем электромагнитном поле. Поскольку величина ускорения в поле электромагнитной волны $a \sim 1/m$ (m - масса частицы), то интенсивность рассеянного света будет обратно пропорциональна квадрату массы части-

цы, на которой происходит рассеяние. То есть, рассеяние электромагнитного излучения в твердых телах происходит, прежде всего, на электронной подсистеме.

2.25. Спектр состоит из двух линий, соответствующих рассеянию на электроне и протоне: $\lambda_1 = \lambda_0 + \Lambda_e$, $\lambda_2 = \lambda_0 + \Lambda_p$, где Λ_e, Λ_p - комптоновские длины волн электрона и протона соответственно. Энергии этих квантов равны 0.36 МэВ и ~ 1.25 МэВ. Интенсивность линии, обусловленной рассеянием на протонах, примерно на шесть порядков меньше, чем интенсивность линии, связанной с рассеянием на электронах (см. задачу 2-24).

2.26. Запишем законы сохранения энергии и импульса в виде

$$\hbar\omega_0 = \hbar\omega + W = 2\hbar\omega,$$

$$\hbar\omega_0 = \hbar\omega \cos\theta + p_e c \cos\phi,$$

$$\hbar\omega \sin\theta = p_e c \sin\phi.$$

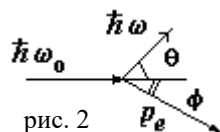


рис. 2

Здесь W , p_e - кинетическая энергия и импульс

электрона отдачи, а θ, ϕ - углы рассеяния фотона и электрона соответственно. Учитывая, что $\phi = \pi/2 - \theta$, получим $(2 - \cos\theta)/\sin\theta = \text{tg}\theta$, откуда

$\theta = \pi/6, \phi = \pi/3$. Учитывая, что $p_e c = \sqrt{W^2 + 2Wmc^2}$, для энергии кванта получим $\hbar\omega_0 = 2mc^2$.

2.27. Из закона сохранения импульса (обозначения на рис.) имеем

$$\text{tg}\phi = \frac{\hbar\omega \sin\theta}{\hbar\omega_0 - \hbar\omega \cos\theta}. \text{ Учитывая, что } \hbar\omega = \frac{\hbar\omega_0}{1 + (\hbar\omega_0/mc^2)(1 - \cos\theta)}, \text{ полу-}$$

чим $\text{tg}\phi = \frac{\sin\theta}{(1 - \cos\theta)(1 + \hbar\omega_0/mc^2)}$. Для случая $\theta = \pi/2$ имеем

$\text{tg}\phi = \frac{1}{1 + \hbar\omega_0/mc^2}$. В случае $\hbar\omega_0 \gg mc^2$ $\text{tg}\phi \approx mc^2/\hbar\omega_0 \ll 1$, при

$\hbar\omega_0 \ll mc^2$ $\text{tg}\phi \approx 1 - \hbar\omega_0/mc^2 \rightarrow 1, \phi \rightarrow \pi/4$.

2.28. $\hbar\omega_0 = \sqrt{2}mc^2, \hbar\omega = mc^2$.

2.29. $\theta = \pi/2$.

2.30. $\hbar\omega_0 = mc^2$.

2.31. Уравнение, описывающее движение свободного электрона в поле электромагнитной волны, имеет вид

$$m\dot{\vec{v}} = e\vec{E} + \frac{e}{c} [\vec{v} \times \vec{H}] + \vec{f}_r,$$

где $\vec{f}_r = \frac{2e^2}{3c^3} \ddot{\vec{v}}$ - сила радиационного трения. Считая электрон нерелятивистским, а силу радиационного трения малой по сравнению с силой eE , выражение для силы радиационного трения приближенно запишем в виде $\vec{f}_r = -\frac{2e^2\omega^2}{3c^3} \vec{v}$, где ω -частота поля электромагнитной волны.

Выберем систему координат так, что ось z направлена вдоль вектора \vec{k} , электрическое и магнитное поля волны имеют только x и y компоненты соответственно. Тогда уравнения движения имеет вид

$$\begin{aligned} \dot{v}_x + \gamma v_x &\approx (eE_0/m)\cos\omega t, \\ m\dot{v}_z &= (ev_x H_0/c)\cos\omega t. \end{aligned}$$

Здесь $\gamma = 2e^2\omega^2/3mc^3$ - классическая постоянная затухания. Выражая из полученной системы уравнений v_x : $v_x = \frac{eE_0}{m(\omega^2 + \gamma^2)} (\omega \sin \omega t + \gamma \cos \omega t)$,

получим уравнение для z – компоненты скорости:

$$m\dot{v}_z = \frac{e^2}{mc} \frac{E_0 H_0}{(\omega^2 + \gamma^2)} (\omega \sin \omega t + \gamma \cos \omega t) \cos \omega t.$$

Усредняя полученное уравнение по периоду высокочастотных колебаний и учитывая, что $\gamma \ll \omega$, получим

$$m\dot{v}_z \approx \frac{e^2 \gamma}{2mc\omega^2} E_0 H_0 = \frac{1}{c} \sigma_T I,$$

где $\sigma_T = (8\pi/3)r_e^2$ - томсоновское сечение рассеяния, $r_e = e^2/mc^2$ - классический радиус электрона, $I = cE_0^2/8\pi$ - интенсивность излучения.

2.32. В поле световой волны электрон приобретает скорость v , поэтому световая волна, «догоняя» его, воздействует на него с меньшей частотой, т.е. $\lambda' = \lambda_0(1 + v/c)$. Именно эту длину волны электрон излучает в собственной системе отсчета. В лабораторной системе отсчета наблюдаемая длина волны будет $\lambda = \lambda'(1 - (v/c)\cos\theta)$, где θ - угол, под которым наблюдатель регистрирует рассеянный свет. Поэтому $\Delta\lambda = \lambda - \lambda_0 = (v/c)\lambda_0(1 - \cos\theta)$. Таким образом, угловая зависимость для $\Delta\lambda$ совпадает с комптоновской. Однако, множитель перед скобкой не является постоянным, а зависит от времени, т.к. $v \sim Ft$ (F - сила светового давления).

2.33. Длина волны $\lambda = (4/3R)$ увеличится на $\Delta\lambda = 2\Lambda_e = 2h/mc$. В результате $\Delta\lambda/\lambda = (3/4)\alpha^2 \approx 4 \cdot 10^{-5}$ ($\alpha = e^2/\hbar c$ - постоянная тонкой структуры).

2.34. а) $\hbar\omega_0 \gg mc^2$: $\hbar\omega_\pi \approx \frac{mc^2}{2} \left(1 - mc^2/2\hbar\omega_0\right) \approx 0.249$ МэВ. Энергия фотона рассеянного назад, ни при каких условиях не может превышать величину $mc^2/2 \approx 0.255$ МэВ.

б) $\hbar\omega_0 \ll mc^2$: $\hbar\omega_\pi \approx \hbar\omega_0 \left(1 - 2\hbar\omega_0/mc^2\right) \approx \hbar\omega_0 = 10$ эВ.

2.35. $\delta = \frac{\hbar\omega_0 - \hbar\omega_\pi}{\hbar\omega_0} = 1 - \frac{\hbar\omega_\pi}{\hbar\omega_0}$. В предельных случаях (см. задачу

2.34):

а) $\delta \rightarrow 1$ при $\hbar\omega_0 \gg mc^2$, б) $\delta \rightarrow 0$ при $\hbar\omega_0 \ll mc^2$. Для указанных энергий квантов получим:

$$\hbar\omega_0 = 256 \text{ МэВ} \quad \delta = 0.999,$$

$$\hbar\omega_0 = 0.255 \text{ МэВ} \quad \delta = 0.5,$$

$$\hbar\omega_0 = 10 \text{ эВ} \quad \delta = 4 \cdot 10^{-5}.$$

2.36. Запишем законы сохранения энергии и импульса

$$\hbar\omega_0 + \frac{mc^2}{\sqrt{1-\beta_0^2}} = \hbar\omega + \frac{mc^2}{\sqrt{1-\beta^2}}, \quad \hbar\vec{k}_0 + \frac{m\vec{v}_0}{\sqrt{1-\beta_0^2}} = \hbar\vec{k} + \frac{m\vec{v}}{\sqrt{1-\beta^2}}.$$

Здесь $\omega_0, \vec{k}_0, \omega, \vec{k}$ - частоты и волновые вектора фотонов до и после рассеяния, \vec{v}_0, \vec{v} - скорости электрона до и после рассеяния. Введем единичные векторы в направлении импульсов фотона и электрона до и после рассеяния: $\vec{n}_0 = \vec{k}_0/k_0$, $\vec{n} = \vec{k}/k$, $\vec{v}_0/v_0 = -\vec{n}_0$, $\vec{n}_e = \vec{v}/v$. Перепишем законы сохранения в безразмерном виде

$$\varepsilon_0 + \frac{1}{\sqrt{1-\beta_0^2}} = \varepsilon + \frac{1}{\sqrt{1-\beta^2}}, \quad (1)$$

$$\varepsilon_0 \vec{n}_0 - \frac{\beta_0 \vec{n}_0}{\sqrt{1-\beta_0^2}} = \varepsilon \vec{n} + \frac{\beta \vec{n}_e}{\sqrt{1-\beta^2}}. \quad (2)$$

Здесь $\varepsilon_0 = \hbar\omega_0/mc^2$, $\varepsilon = \hbar\omega/mc^2$.

Умножим (2) на $2\varepsilon\vec{n}$ и вычтем результат из возведенного в квадрат уравнения (2), получим

$$(\varepsilon_0 - \varepsilon)^2 + 2\varepsilon\varepsilon_0(1 - \cos\theta) - \frac{2\beta_0}{\sqrt{1 - \beta_0^2}}(\varepsilon_0 - \varepsilon \cos\theta) = \frac{\beta^2}{1 - \beta^2} - \frac{\beta_0^2}{1 - \beta_0^2}, \quad (3)$$

где $\vec{n}_0\vec{n} = \cos\theta$, θ - угол рассеяния фотона. Переписывая (1) в виде

$$(\varepsilon_0 - \varepsilon) + \frac{1}{\sqrt{1 - \beta_0^2}} = \frac{1}{\sqrt{1 - \beta^2}},$$

и возводя его в квадрат, после вычитания из него (3) получим

$$\frac{1}{\sqrt{1 - \beta_0^2}}(\varepsilon_0 - \varepsilon + \beta_0\varepsilon_0 - \beta_0\varepsilon \cos\theta) - \varepsilon\varepsilon_0(1 - \cos\theta) = 0$$

После преобразования получим:

$$\varepsilon = \frac{(1 + \beta_0)\varepsilon_0}{1 + \beta_0 \cos\theta + \varepsilon_0(1 - \cos\theta)\sqrt{1 - \beta_0^2}}.$$

При рассеянии на покоящемся электроне ($\beta_0 = 0$) получаем «обычную»

формулу $\varepsilon = \frac{\varepsilon_0}{1 + \varepsilon_0(1 - \cos\theta)}$, при рассеянии назад ($\theta = \pi$)

$\varepsilon = \frac{(1 + \beta_0)\varepsilon_0}{1 - \beta_0 + 2\varepsilon_0\sqrt{1 - \beta_0^2}}$, в частном случае $\beta_0 \rightarrow 1$ $\varepsilon \rightarrow \frac{1}{\sqrt{1 - \beta_0^2}}$, т.е. энер-

гия фотона, рассеянного на угол π ультрарелятивистским электроном, не зависит от начальной энергии фотона и целиком определяется начальной энергией электрона.

2.37. Энергии фотона и электрона не изменяются при рассеянии назад, если полный импульс до рассеяния равен нулю. Поэтому

$$\frac{\hbar\omega_0}{c} = \frac{m\beta_0 c}{\sqrt{1 - \beta_0^2}}, \text{ или } \varepsilon_0 = \frac{\beta_0}{\sqrt{1 - \beta_0^2}}.$$

$$\mathbf{2.38.} \quad \Delta\varepsilon_e = \varepsilon_0 - \varepsilon = \varepsilon_0 \left(1 - \frac{(1 + \beta_0)}{1 + \beta_0 \cos\theta + \varepsilon_0(1 - \cos\theta)\sqrt{1 - \beta_0^2}} \right) \quad (\text{обозна-}$$

чения – см. задачу 2.36). При рассеянии фотона назад $\theta = \pi$ в ультрарелятивистском пределе $\beta_0 \rightarrow 1$ получаем $\Delta\varepsilon_e \approx -1/\sqrt{1 - \beta_0^2}$. Таким образом, ультрарелятивистский электрон отдает фотону почти всю свою энергию.

2.39. $\lambda \approx \lambda_0 / (4\gamma^2)$, где $\gamma = E/mc^2 \approx 10^4$ - релятивистский фактор.

Поэтому $\lambda \approx 2.5 \cdot 10^{-12}$ см, происходит преобразование ИК излучения в жесткий рентген.

2.40. Давление света определяется импульсом, передаваемым фотонами единичной поверхности в одну секунду. Поток фотонов есть $\Pi = c(\rho/\hbar\omega)$. Поглощенный фотон передает стенке импульс $\hbar k$, при отражении фотона импульс, передаваемый стенке, есть $2\hbar k$. Поэтому для давления света получаем $p = c(\rho/\hbar\omega)((1-R)\hbar k + 2R\hbar k) = (1+R)\rho$.

2.41. Сила давления равна переданному излучением Земле импульсу за одну секунду: $F = \pi R_0^2 \int \Pi_\omega (\hbar\omega/c) d\omega$, где $\Pi_\omega = \left(\frac{c\rho_\omega}{4\hbar\omega} \right) \frac{R_S^2}{R_{orb}^2}$ - спектральная плотность потока фотонов на орбите Земли. Таким образом, получим

$$F = \frac{1}{4} \left(\frac{R_S}{R_{orb}} \right)^2 \pi R_0^2 \int \rho_\omega d\omega = \frac{1}{4} \left(\frac{R_S}{R_{orb}} \right)^2 \pi R_0^2 \alpha T^4 \approx 5.91 \cdot 10^4 \text{ Т.}$$

2.42. Из баланса сил, действующих на диск, $mg = pS = 2\hbar k \cdot n \cdot c \cdot S$ ($k = 2\pi/\lambda$) для плотности фотонов в пучке найдем $n \approx 1.2 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-3}$. Такая плотность фотонов соответствует интенсивности излучения $I = n c \hbar \omega \approx 1.5 \cdot 10^5 \text{ Вт/см}^2$.

2.43. Из условия равенства моментов $M = k\alpha = p(\pi d^2/4)\ell$ для светового давления p найдем $p \approx 3.5 \cdot 10^{-6} \text{ дин/см}^2$.

2.44. Вычислим, прежде всего, давление, создаваемое излучением, в изотропной термодинамически равновесной плазме с температурой T . Выделяя элемент поверхности площадью S , определим силу давления излучения, обусловленную фотонами, летящими под углом θ к нормали за время Δt :

$$P(\theta) = \int d\omega n_\omega \frac{2\hbar\omega}{c} \cos\theta \cdot S c \cos\theta \Delta t = 2US\Delta t \cos^2 \theta,$$

где $u = \int \hbar\omega n_\omega d\omega = \alpha T^4$ - объемная плотность энергии электромагнитного излучения. Тогда для давления излучения получим $p = \frac{1}{S\Delta t} \int P(\theta) d\Omega = u/3$ (здесь интеграл вычисляется по полусфере $0 \leq \theta \leq \pi/2$). Таким образом, давление излучения равно одной трети от объемной плотности энергии.

Полагая, что водород является полностью ионизованным и диссоциированным, запишем равенство газокинетического давления и давления излучения в виде: $\frac{1}{3} \alpha T^4 = 2 \frac{\rho}{m_p} kT$ (m_p - масса протона). Отсюда находим

$$T = \left(6 \frac{\rho}{m_p} \frac{k}{\alpha} \right)^{1/3} \approx 4 \cdot 10^7 \text{ K} \approx 3.47 \text{ кэВ.}$$

2.45. Перейдем в систему отчета, в которой нижняя пластина неподвижна, а верхняя пластина движется относительно нижней со скоростью \vec{V} . Будем пока рассматривать только тепловое излучение первой пластины. Импульс одного фотона $p = \hbar\omega/c$. Рассмотрим фотон, излучаемый первой пластиной под углом θ к ее плоскости, в положительном направлении оси x . Этот фотон имеет составляющую скорости, совпадающую по направлению со скоростью движения верхней пластины. Поэтому вторая пластина будет «видеть» несколько меньшую частоту этого фотона. С учетом эффекта Доплера (мы рассматриваем нерелятивистский случай):

$$\omega = \omega_0 \left(1 - \frac{V}{c} \cos\theta \right),$$

где ω_0 - частота фотона, испущенного нижней пластиной, ω - частота фотона, которую «видит» верхняя пластина. Так как тепловое излучение изотропно, то для любого фотона, испущенного под углом $\theta_+ < \pi/2$ к оси x (положительное направление) найдется фотон, испущенный под углом $\theta_- = \pi - \theta_+$, т.е. в отрицательном направлении оси x . «Видимая» второй пластиной величина проекции импульса на ось x фотона, испущенного в положительном направлении нижней пластиной:

$$p_x^+ = \frac{\hbar\omega_0}{c} \left(1 - \frac{V}{c} \cos\theta \right) \cos\theta.$$

Для фотона, испущенного в отрицательном направлении оси x :

$$p_x^- = -\frac{\hbar\omega_0}{c} \left(1 + \frac{V}{c} \cos\theta \right) \cos\theta.$$

Видно, что $|p_x^-| > |p_x^+|$, что и приводит к возникновению силы, приложен-



ной ко второй пластине, направленной против относительной скорости движения пластин и за-



рис. 3



висящей от этой скорости. Эту силу и называют силой бесконтактного трения. Предположим, что верхняя пластина полностью поглощает все падающие на нее фотоны. Тогда результирующее изменение импульса верхней пластины при поглощении пары фотонов будет таким:

$$\Delta p_x = p_x^+ + p_x^- = -\frac{2V\hbar\omega_0 \cos^2 \theta}{c^2}.$$

2.46. С учетом решения предыдущей задачи, силу радиационного трения между пластинами найдем так:

$$F = \int d\omega \int d\Omega \Delta p_x(\omega, \theta) \Pi_\omega \cdot S,$$

где $\Pi_\omega = \frac{c}{4} n_\omega$ - спектральная плотность потока фотонов, S - площадь пластины, излучающей фотоны (предполагается, что все испущенные фотоны поглощаются другой пластиной). После интегрирования по спектру получаем

$$F = \frac{V}{2c} \alpha T^4 S \cdot \int_0^\pi d\varphi \int_0^{\pi/2} \cos^2 \theta \sin \theta d\theta = \frac{\pi V}{6c} \cdot \alpha T^4 \cdot S$$

В предположении, что пластины находятся при одинаковой температуре, необходимо учесть излучение второй пластины, увеличив результат в 2 раза. Тогда выражение для силы бесконтактного трения примет вид:

$$F = \frac{\pi V}{3c} \cdot \alpha T^4 \cdot S,$$

где V - относительная скорость движения двух пластин, S - площадь каждой из пластин (площади пластин предполагаются равными).

Оценим величину силы бесконтактного трения в случае двух пластин площадью 1 см^2 , движущихся с относительной скоростью 1 см/с при температуре 300 К . Получим $F \approx 2 \cdot 10^{-15} \text{ дин} = 2 \cdot 10^{-20} \text{ Н}$. Столь малое значение находится на грани современных измерительных возможностей.

2.47. Поскольку пара нерелятивистская, γ - кванты разлетятся в противоположные стороны, их длины волн $\lambda = 2\pi\hbar/mc \approx 2.43 \cdot 10^{-10} \text{ см}$.

3. Волны де Бройля. Соотношения неопределенностей.

3.1. $\lambda_D < 2\pi\hbar/mc$. Отсюда $p > mc$, следовательно

$$T = \sqrt{p^2 c^2 + m^2 c^4} - mc^2 > (\sqrt{2} - 1) mc^2.$$

3.2. По условию задачи $\lambda_D = h/p = \lambda$. С другой стороны кинетическая энергия вылетевших электронов $T = hc/\lambda - A =$

$\sqrt{(mc^2)^2 + (cp)^2} - mc^2$. Считая электрон нерелятивистским ($cp \ll mc^2$), получим $p \approx A/c$, откуда $T \approx A^2/2mc^2 \ll A$. Длина волны $\lambda = hc/A = 3.1 \cdot 10^{-5}$ см = 3100 Å.

$$3.3. \quad \lambda_D \approx 5.6 \cdot 10^{-8} \text{ см.}$$

$$3.4. \quad 3.9 \cdot 10^{-9} \text{ см и } 1.2 \cdot 10^{-13} \text{ см.}$$

$$3.5. \quad \lambda_e \approx \frac{hc}{E} \approx 1.2 \cdot 10^{-11} \text{ см, } \lambda_p \approx \frac{h}{\sqrt{2m_p E}} \approx 0.9 \cdot 10^{-12} \text{ см.}$$

3.6. $\lambda_D = \sqrt{\lambda \Lambda_e / 2} = 0.11 \text{ Å}$, где Λ_e - комптоновская длина волны электрона.

$$3.7. \quad \Delta\lambda = \frac{h}{\sqrt{2mT}} - \frac{hc}{\sqrt{(T+mc^2)^2 - m^2c^4}} = \frac{h}{2mc} (1 - 1/\sqrt{2}).$$

$$3.8. \quad \lambda_D = \frac{hc}{\sqrt{T(T+2mc^2)}}.$$

$$3.9. \quad \lambda_D = \frac{hc}{\sqrt{(T+mc^2)^2 - m^2c^4}}$$

$$3.10. \quad \lambda_D = \Lambda_p = h/M_p c$$

$$3.11. \quad \lambda_D = \frac{hc}{\sqrt{E^2 - m^2c^4}} \rightarrow \frac{hc}{E}.$$

3.12. Указание. Предельно разрешающая способность порядка длины волны де Бройля пучка электронов.

3.13. $T \approx M_p c^2 \left(\sqrt{1 + (\Lambda_p/l)^2} - 1 \right) \approx 0.66 M_p c^2$, Λ_p - комптоновская длина волны протона.

3.14. Пусть в некоторый начальный момент времени пакет $\psi_0(x)$ представим в виде $\psi(x) = \int a(k) \exp(ikx) dk$, причем спектр волновых векторов является узким и лежит в малой окрестности Δk вблизи k_0 . Разлагая вектор $\omega(k)$ в ряд вблизи k_0 в первом порядке дисперсионной зависимости $\omega(k) \approx \omega(k_0) + (k - k_0) \left(\frac{d\omega}{dk} \right) \Big|_{k=k_0}$, для функции $\psi(x, t)$ получим $\psi(x, t) \approx a(k_0) \int \exp(i(kx - \omega(k_0)t - (k - k_0)v_g t)) dk$. Здесь введено обозначение $v_g = \left(\frac{d\omega}{dk} \right) \Big|_{k=k_0}$. Вычисляя интеграл, получим

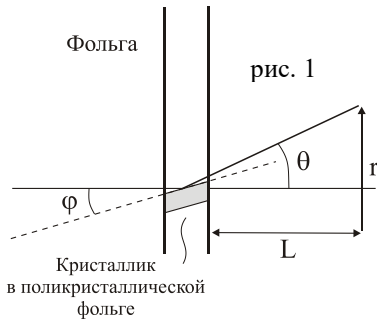
$$\psi(x,t) \approx a(k_0) \exp(i(k_0x - \omega(k_0)t)) \int_{k_0-\Delta k/2}^{k_0+\Delta k/2} \exp(i(k-k_0)(x-v_g t)) dk = a(k_0)\Delta k \exp(i(k_0x - \omega(k_0)t)) \frac{\sin((x-v_g t)\Delta k/2)}{(x-v_g t)\Delta k/2}.$$

Как видно, в рассматриваемом приближении волновой пакет движется как целое со скоростью v_g и сохраняет свою пространственную форму. Пространственная ширина пакета Δx определяется из условия $\Delta x \Delta k \sim 1$.

3.15. Дисперсионное соотношение для волн де Бройля в релятивистском случае $\omega^2 = k^2 c^2 + m^2 c^4 / \hbar^2$, в нерелятивистском - $\hbar\omega = \hbar^2 k^2 / 2m$. Отсюда для групповой и фазовой скоростей находим: в релятивистском случае $v_{ph} = c^2/v$, $v_g = v$; в нерелятивистском случае $v_{ph} = v/2$, $v_g = v$.

3.16. Условие минимума $b \sin \alpha_{\min} = n \lambda$; максимума: $b \sin \alpha_{\max} = (2n+1)\lambda/2$, а де-бройлевская длина волны $\lambda = h/\sqrt{2mE} = 6.13 \cdot 10^{-10}$ см. Поскольку $\lambda \ll b$, то

$$\alpha_{\min} \approx \lambda/b \approx 10^{-5} \approx 2'', \quad \alpha_{\max} \approx 3\lambda/2b \approx 1.5 \cdot 10^{-5} \approx 3''.$$



3.17. В соотношении Вульфа - Брегга $d \sin \varphi = n \lambda$ угол φ это угол скольжения, который вдвое меньше угла рассеяния θ (см рис.). Учитывая это и считая угол φ малым, а также принимая во внимание релятивистские эффекты, получим

$$d = \frac{L}{r} \frac{h}{\sqrt{2meU}} \frac{1}{\sqrt{1+eU/(2mc^2)}} \approx 2.2$$

А.

3.18. $\ell \sim \sqrt{\lambda L} \approx \sqrt{\frac{Lh}{\sqrt{mkT}}} \approx 10^{-4}$ см.

3.19. $E \sim p^2/m \sim \hbar^2/mL^2$. Для электрона в атоме имеем $E \sim 10$ эВ, для макрочастицы $E \sim 10^{-42}$ эВ.

3.20. а) 10 эВ; б) 5 эВ.

3.21. $E \sim 0.5 \div 1$ МэВ.

3.22. В соответствии с соотношением неопределенностей электрон, локализованный в пределах атомного ядра размером R , обладает импульсом $p \sim \hbar/R$ и кинетической энергией

$$T = \sqrt{p^2 c^2 + m^2 c^4} - mc^2 = mc^2 \left(\sqrt{1 + (\Lambda_e / 2\pi R)^2} - 1 \right).$$

Поскольку комптоновская длина волны $\Lambda_e = 2\pi\hbar/mc \gg R$, перепишем выражение для кинетической энергии в виде $T \approx mc^2 \frac{2\pi\Lambda_e}{R} \approx \hbar c/R$. Если эта величина превышает потенциальную энергию электрона в ядре $|V| \sim Ze^2/R$, то электрон не может удерживаться в ядре электростатическими силами. Условие $\hbar c/R > Ze^2/R$ выполняется для всех $Z \leq Z^* = 1/\alpha = 137$.

3.23. Поскольку для осциллятора $\Delta p \sim p$, $\Delta x \sim x$, соотношение неопределенностей запишем в виде $x \cdot p \sim \hbar$. Полная энергия осциллятора есть $E \approx \frac{\hbar^2}{2mx^2} + \frac{m\omega^2 x^2}{2}$. Минимизируя это выражение, найдем амплитуду нулевых колебаний $x \approx \sqrt{\hbar/m\omega}$ и энергию $E \approx \hbar\omega$.

$$\mathbf{3.26.} \quad E \approx -me^4/2\hbar^2.$$

$$\mathbf{3.27.} \quad r \approx \hbar^2/Zme^2.$$

$$\mathbf{3.29.} \quad 2mV_0R^2/\hbar^2 \geq 1.$$

3.30. Неопределенность скорости электрона есть $\Delta v \sim \hbar/m\Delta x_0$. Поэтому удвоение ширины пакета произойдет за время $\tau \sim \Delta x_0/\Delta v \sim m(\Delta x_0)^2/\hbar \approx 4 \cdot 10^{-16}$ с.

3.31. Неопределенность скорости электрона есть $\Delta v \sim \hbar/m\Delta x_0$. Поэтому на больших временах ширина пакета есть $\Delta x \approx \Delta v \cdot t \sim \hbar t/m\Delta x_0$. По условию задачи $10 \cdot \Delta x_0 \sim \hbar t/m\Delta x_0$, откуда для начальной ширины получим $\Delta x_0 \sim \sqrt{\hbar t/10m} \approx 10^{-8}$ см.

$$\mathbf{3.33.} \quad \Delta x_0 \sim 10^{-9} \text{ см.}$$

$$\mathbf{3.34.} \quad \tau \sim \hbar^2/(me^2c) \sim 10^{-19} \text{ с.}$$

3.35. $\Delta\lambda \sim \lambda^2/c\tau$, где τ - время жизни атома в возбужденном состоянии. $\Delta\lambda_1 \sim 10^{-3}$ А, $\Delta\lambda_2 \sim 10^{-8}$ А.

$$\mathbf{3.36.} \quad \tau \sim 5 \text{ фс.}$$

$$\mathbf{3.37.} \quad \Delta\lambda/\lambda \sim 0.1.$$

$$\mathbf{3.38.} \quad \text{Для лазера на стекле } \tau \sim 0.1 \text{ пс, для лазера на гранате } \tau \sim 5 \text{ пс.}$$

3.39. В соответствии с соотношением неопределенностей акты испускания и поглощения пиона должны разделяться промежутком времени $\tau \sim \hbar/E_\pi$, где $E_\pi = mc_\pi^2$ - энергия пиона. Радиус действия ядерных сил определяется максимальным расстоянием, на которое может удалиться пион от точки своего рождения за время τ . Оценивая эту величину как $R \approx c\tau$, получим $R \approx \hbar/m_\pi c = \Lambda_\pi$ - комптоновская длина волны пиона. Отсюда $m_\pi c^2 \approx \hbar c/R \approx 120$ МэВ. Точные значения $E_{\pi^+} = 139.57$ МэВ, $E_{\pi^0} = 134.96$ МэВ.

3.40. Из соотношения неопределенностей $pH \sim \hbar$ и закона сохранения энергии $M_n gH \approx p^2 / M_n \approx \hbar^2 / M_n H^2$ находим высоту $H \approx (\frac{\hbar^2}{M_n^2 g})^{1/3} \approx 10$ мк.

4. Модели атомов Томсона и Резерфорда.

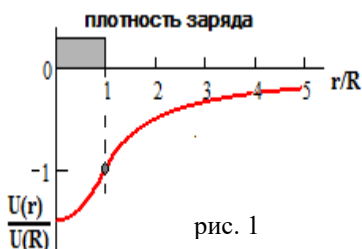


рис. 1

4.1. В предположении, что полный заряд шара $+Ze$, а точечный заряд равен заряду электрона e :

$$U(r) = \begin{cases} -Ze^2/r, & r > R, \\ -Ze^2/R \cdot (3/2 - r^2/2R^2), & r \leq R. \end{cases}$$

Важно: этот потенциал **не** имеет кулоновской особенности ($\sim 1/r$) в начале координат.

4.2. По теореме Гаусса внутри шара электрическое поле есть $E = e\vec{r}/R^3$. Уравнение движения электрона записывается в виде $m\ddot{\vec{r}} = -e\vec{E}$ или $\ddot{\vec{r}} + \omega_0^2 \vec{r} = 0$, где частота колебаний определяется соотношением $\omega_0 = \sqrt{e^2/mR^3} \approx 10^{16} \text{ с}^{-1}$.

4.3. $\tau = \gamma^{-1}$, где $\gamma = \frac{2e^2\omega_0^2}{3mc^3}$ - классическая постоянная затухания, ча-

стота ω определяется решением задачи 4.2. Так что $\tau \approx 1.6 \cdot 10^{-9} \text{ с}$.

4.4. $W = W_0 \exp(-\gamma t)$, где W_0 - начальное значение энергии,

γ - классическая постоянная затухания.

4.5. Наблюдаемые частоты колебаний $\omega = \omega_0, \omega_0 \pm \Omega$, где $\Omega = eH/2mc$. Полученные три частоты излучения образуют **нормальный** триплет Лоренца. Для $H = 10^5$ Э имеем $\Omega \approx 10^{12}$ с⁻¹.

4.6. $\theta_{\max} \cong \frac{2Ze^2/b}{E_\alpha} \approx 4 \cdot 10^{-4}$.

4.7. Высота потенциального барьера, созданного шаром с зарядом Ze радиуса R , есть $V_0 = 3Ze^2/2R$ (см. задачу 4.1). При $E_\alpha > V_0$ частицы будут рассеиваться на нулевой угол, при $E_\alpha < V_0$ - отражаться. Значение $R^* = 3Ze^2/2E_\alpha \approx 5 \cdot 10^{-12}$ см разделяет искомые области.

4.8. Спектральный состав тормозного электромагнитного излучения определяется как $I_\omega \sim |\vec{a}_\omega|^2 = |a_{\omega\parallel}|^2 + |a_{\omega\perp}|^2$, где $\vec{a}_\omega \sim \int \vec{a}(t) \exp(-i\omega t) dt$ -

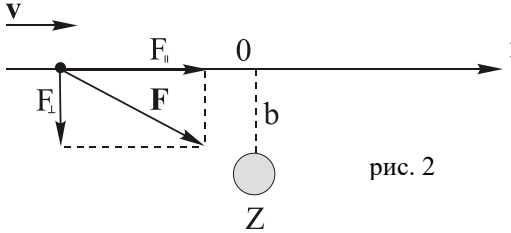


рис. 2

спектральное значение ускорения частицы. Считая траекторию движения частицы прямолинейной (см. рис.), приближенно выражение для ускорения частицы запишем виде

$$a_{\perp}(t) = \frac{Ze^2 b}{m(b^2 + (vt)^2)^{3/2}}, \quad a_{\parallel}(t) = \frac{Ze^2 vt}{m(b^2 + (vt)^2)^{3/2}}$$

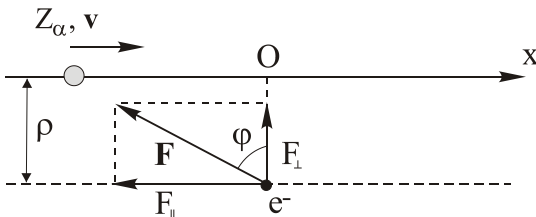
(здесь за $t=0$ принят момент времени, когда удаление пролетающей частицы от рассеивающего центра минимально и равно b , $v = \sqrt{2E/m}$ - скорость частицы). Переходя от интегрирования по времени к интегрированию вдоль траектории, получим

$$a_{\omega\perp} \sim \frac{Ze^2}{mv} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{b \exp(-i\omega x/v)}{(b^2 + x^2)^{3/2}} dx, \quad a_{\omega\parallel} \sim \frac{Ze^2}{mv} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{x \exp(-i\omega x/v)}{(b^2 + x^2)^{3/2}} dx.$$

Основной вклад в эти интегралы вносит интервал координат $|x| \leq b$, поэтому $\vec{a}_\omega \sim \exp(-b\omega/v)$, а, следовательно,

$$I_\omega \sim \exp(-2b\omega/v),$$

т.е. спектральная интенсивность тормозного излучения экспоненциально мала в области высоких частот, однако отлична от нуля при сколь угодно больших ω .



4.9. При условиях задачи электрон получит импульс только в направлении перпендикулярном скорости α - частицы - поперечном. Поперечный импульс полученный электроном, равен $p_{\perp} = \int_{-\infty}^{\infty} F_{\perp} dt = 2 \int_0^{\infty} F_{\perp} dt$. Отсчет времени ведется от момента наибольшего сближения - точки О (см.

рис.). Поскольку $F_{\perp} = \frac{Z_{\alpha} e^2 \rho}{(\rho^2 + (vt)^2)^{3/2}}$ ($Z_{\alpha} e$ - заряд α - частицы, v - ее скорость), получим $p_{\perp} = \frac{2Z_{\alpha} e^2}{\rho v}$, энергия полученная электроном есть

$$W = \frac{p_{\perp}^2}{2m} = \frac{2}{m} \left(\frac{Z_{\alpha} e^2}{\rho v} \right)^2.$$

4.10. Отклонение α -частиц на большие углы происходит, когда их кинетическая энергия меньше потенциальной энергии взаимодействия с ядром при их максимальном сближении. Полагая, что минимальное расстояние между α -частицей и ядром в процессе рассеяния есть величина порядка размера ядра, получим

$$R \sim \frac{2Ze^2}{E_{\alpha}} \sim 5 \cdot 10^{-12} \text{ см.}$$

4.11. Дифференциальное сечение упругого кулоновского (резерфордского) рассеяния $d\sigma/d\Omega$ зависит от параметров Z и Mv^2 рассеивающихся частиц как $d\sigma/d\Omega = f(Z/Mv^2)$, причем $Mv^2 = 2ZeU$. Поэтому все частицы будут рассеиваться одинаково.

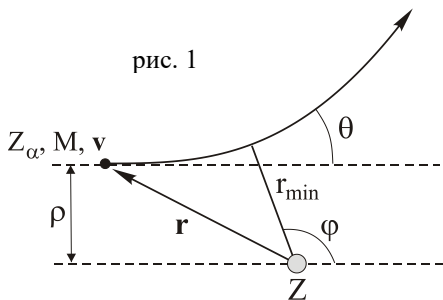
4.12. Расстояние между частицами будет минимальным, когда $\dot{r} = 0$ (см. рис.) Определим r_{\min} из законов сохранения энергии

$$\frac{M}{2} (\dot{r}^2 + r^2 \dot{\varphi}^2) + \frac{2Ze^2}{r} = \frac{Mv^2}{2} = W$$

и момента количества движения $Mvr = Mr^2 \dot{\varphi}$. Исключая из этих уравнений $\dot{\varphi}$ и полагая $\dot{r} = 0$, получаем

$$r_{\min}^2 - 2\rho_{\perp} r_{\min} - \rho^2 = 0,$$

где $\rho = \rho_{\perp} \operatorname{ctg}(\theta/2)$, $\rho_{\perp} = 2Ze^2/Mv^2$. Окончательно получим



$$r_{\min} = \rho_{\perp} + \sqrt{\rho_{\perp}^2 + \rho^2} = \frac{2Ze^2}{2W}(1 + \csc(\theta/2)) \cong 3.3 \cdot 10^{-11} \text{ см.}$$

4.13. Сечение «рассеяния назад» определим как $\sigma_0 = 2\pi \int_{\pi/2}^{\pi} \frac{d\sigma}{d\Omega} \sin(\theta) d\theta = \frac{\pi \varphi_{\perp}^2}{2} \int_{\pi/2}^{\pi} \frac{1}{\sin^4(\theta/2)} \sin(\theta) d\theta = \pi \varphi_{\perp}^2$. Тогда вероятность рассеяться «назад» на фольге толщиной ℓ есть $P = 1 - \exp(-N\sigma_0\ell) \approx N\sigma_0\ell$, где $N \approx 6 \cdot 10^{22} \text{ см}^{-3}$ - концентрация атомов золота. Для заданных параметров имеем $\sigma_0 \approx 7.85 \cdot 10^{-23} \text{ см}^2$, $P \approx 5 \cdot 10^{-4}$.

$$\mathbf{4.14.} \quad \rho_{\perp} = 2Ze^2 / \mu v^2 = \rho_{\perp}(\infty)(1 + M_{\alpha}/M_{Ca}), \quad \mu = \frac{M_{\alpha}M_{Ca}}{M_{\alpha} + M_{Ca}},$$

$$\rho_{\perp} = 2Ze^2 / M_{\alpha} v^2; \quad \rho_{\perp}(\infty) = 10^{-12} \text{ см}, \quad \rho_{\perp}(Ca) = 1.1 \cdot 10^{-12} \text{ см.}$$

4.15. Мощность излучения ускоренно движущегося электрона есть

$$\frac{dW}{dt} = -\frac{2e^2}{3c^3} \left| \ddot{\vec{r}} \right|^2. \quad (1)$$

На круговой орбите ускорение $\left| \ddot{\vec{r}} \right| = v^2/r$, где v - скорость электрона на

орбите. За один оборот теряется энергия $\frac{2e^2}{3c^3} \left| \ddot{\vec{r}} \right|^2 \cdot \frac{2\pi r}{v} \sim \left(\frac{v}{c} \right)^3 \frac{e^2}{r} \sim \left(\frac{v}{c} \right)^3 W$.

Эта энергия много меньше энергии электрона на орбите, поэтому траектория будет слабо скручивающейся спиралью. Учитывая, что $W = -e^2/2r$, из (1) получим

$$\dot{r} = -\frac{4}{3} \frac{e^4}{m^2 c^3} \frac{1}{r^2}$$

Интегрируя это уравнение, получим

$$r(t)^3 = r(0)^3 - 4 \frac{e^4}{m^2 c^3} t = r(0)^3 \left(1 - \frac{t}{\tau} \right).$$

Для энергии находим:

$$W(t) = -\frac{e^2}{2r(t)} = -\frac{e^2}{2r(0)} \frac{1}{\left(1 - \frac{t}{\tau} \right)^{1/3}};$$

$\tau = \frac{r(0)^3 m^2 c^3}{4e^4}$ - время падения электрона на ядро с начального радиуса $r(0)$. Оценка дает $\tau \approx 1.25 \cdot 10^{-10}$ с.

5. Модель Бора

5.1. Из условия равновесия на круговой орбите $\frac{mv^2}{r} = \frac{Ze^2}{r^2}$ и определения момента импульса $L = mvr$ находим скорость $v = \frac{Ze^2}{L}$, радиус $r = \frac{L^2}{Zme^2}$ и энергию $E = -\frac{Z^2 me^4}{2L^2}$. При переходе на соседнюю орбиту (при поглощении или излучении одного фотона) энергия атома, согласно принципу соответствия, изменяется на величину $\hbar\omega$:

$$\Delta E = \frac{Z^2 me^4}{L^3} \Delta L = \hbar\omega,$$

$\omega = v/r$ - частота обращения электрона по орбите. Так что получаем $\Delta L = \hbar$ и $L = n\hbar + const$, $n \geq 1$ - целое число, $0 \leq const < \hbar$.

В модели Бора $const = 0$ и $L = n\hbar$. Энергии уровней равны $E_n = -\frac{me^4}{2\hbar^2} \frac{Z^2}{n^2} = -Ry \frac{Z^2}{n^2}$.

5.2. Из условия равновесия на круговой орбите $\frac{mv^2}{r} = \frac{Ze^2}{r^2}$, и правила квантования момента импульса $mvr = n\hbar$, (m -приведенная масса), находим скорости $v_n = \frac{e^2 Z}{\hbar n} = v_0 \frac{Z}{n}$, $v_0 = e^2 / \hbar$, радиусы $r_n = \frac{\hbar^2 n^2}{me^2 Z} = a_0 \frac{n^2}{Z}$ и энергии $E_n = -\frac{me^4 Z^2}{2\hbar^2 n^2} = -Ry \frac{Z^2}{n^2}$. Частоты и периоды обращения, соответственно, равны $\omega_n = \frac{v_n}{r_n} = \frac{me^4 Z^2}{\hbar^3 n^3} = \omega_0 \frac{Z^2}{n^3}$ и $T_n = \frac{2\pi}{\omega_n} = T_0 \frac{n^3}{Z^2}$. Релятивистский параметр $\frac{v_n}{c} = \frac{e^2 Z}{\hbar c n} = \alpha \frac{Z}{n}$.

В атоме водорода $Z=1$.

Параметры первой орбиты: $a_0 = 0.529 \cdot 10^{-8}$ см; $v_0 = 2.2 \cdot 10^8$ см/с;
 Ридберг - $Ry = 13.6$ эВ; $\omega_0 = 4.13 \cdot 10^{16}$ рад/с; $T_0 = 1.52 \cdot 10^{-16}$ с;
 $\alpha = 1/137$.

5.3. $E = \frac{e}{a_0^2} \approx 5.2 \cdot 10^9$ В/см, a_0 - радиус первой боровской орбиты атома водорода.

5.4. $H = \alpha E = 1.3 \cdot 10^5$ Э, $\alpha = e^2 / \hbar c = 1/137$ - постоянная тонкой структуры.

5.5. На высоких орбитах ($n \gg 1$) $\omega_{n+1,n} \approx \omega_n \approx \frac{\omega_0}{n^3}$, $\omega_0 = v_0/a_0$; при переходе $2 \rightarrow 1$: $\omega_{2,1} \approx \frac{3}{8} \omega_0$.

5.6. Из условий Бора, в которых всюду массу электрона следует умножить на релятивистский фактор $\gamma = 1/\sqrt{1-(v/c)^2}$, находим $v_n/c = \alpha Z/n$, $\alpha = e^2 / \hbar c = 1/137$, $r_n = \frac{a_0 n^2}{Z} \sqrt{1-(\alpha Z/n)^2}$.

Для энергии, с учетом энергии покоя электрона, получим

$$E_n + mc^2 = mc^2 \sqrt{1-(\alpha Z/n)^2}.$$

Отметим, что при $n=1$ результаты имеют смысл лишь при $Z < 137$. При $v/c = \alpha Z/n \ll 1$ имеем обычные нерелятивистские уровни энергии; за вы-

четом энергии покоя: $E_n = -\frac{Z^2 Ry}{n^2}$.

$$\mathbf{5.7.} \quad \delta E_n = -\frac{\alpha^2 Z^4}{4n^4} Ry.$$

$$\mathbf{5.8.} \quad \text{Спектр водорода: } \frac{1}{\lambda_H} = R \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right);$$

$$\text{Спектр иона гелия: } \frac{1}{\lambda_{He^+}} = Z^2 R \left(\frac{1}{n_1^{*2}} - \frac{1}{n_2^{*2}} \right) = 4R \left(\frac{1}{n_1^{*2}} - \frac{1}{n_2^{*2}} \right).$$

$$\text{Если } n_1^* = 2n_1 \text{ и } n_2^* = 2n_2, \text{ то } \frac{1}{\lambda_{He^+}} = R \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right).$$

5.9. Это переходы $n \rightarrow 4, n > 4$ иона He^+ .

5.10. Это переходы $n \rightarrow 3, n > 3$ иона Li^{2+} .

5.11.

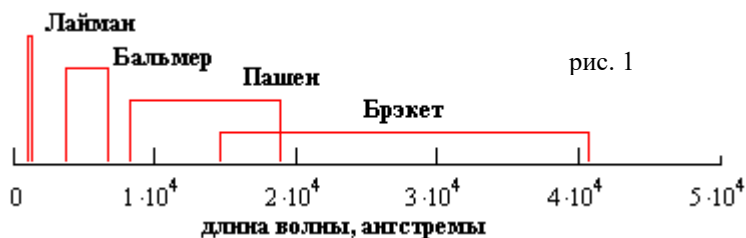
Ион	$r_I, \text{Å}$	$E_I, \text{эВ}$	$\lambda, \text{Å}$
He^+	0.265	-54.4	304
Li^{2+}	0.176	-122.4	135.1

5.12. Длины волн:

$$\text{Головная линия: } \lambda_\alpha = \frac{1}{R} \frac{n^2((n+1)^2)}{2n+1}.$$

Предел серии: $\lambda_\infty = \frac{1}{R} n^2$; n -номер нижнего уровня серии.

Серия	$\lambda_\alpha, \text{Å}$	$\lambda_\infty, \text{Å}$
Лаймана	1216	912
Бальмера	6565	3647
Пашена	18756	8206
Брэкета	40523	14588



Обратите внимание на перекрывание спектральных диапазонов серий, начиная с серии Пашена.

5.13. Из законов сохранения энергии и импульса находим: $v = c \frac{\hbar\omega_0}{Mc^2}$

, $\hbar\omega_0 = \frac{3}{4} Ry$, M - масса атома. Энергия фотона есть $\hbar\omega \cong \hbar\omega_0(1 - \frac{\hbar\omega_0}{2Mc^2})$

, причем $\frac{\hbar\omega_0}{2Mc^2} = 1.1 \cdot 10^{-8}$.

5.14. $\hbar\omega > Z^2 Ry = 54.4$ эВ.

5.15. а) $\hbar\omega = 2Ry = \alpha^2 mc^2$; $\beta = \frac{v}{c} \approx \alpha$; б) $\hbar\omega = mc^2$; $\beta = \frac{v}{c} \approx \frac{\sqrt{3}}{2}$;

5.16. Из формулы Бальмера (5.4) получаем для любого перехода $m \rightarrow n$:

$$\lambda_H = \lambda_\infty(1 + m_e / M_p), \quad \lambda_D = \lambda_\infty(1 + m_e / 2M_p), \quad \frac{1}{\lambda_\infty} = R_\infty \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right),$$

Здесь λ_∞ - длина волны спектральной линии $m \rightarrow n$ в атоме с бесконечно

тяжелым ядром. Отсюда находим : $\frac{M_p}{m_e} = \frac{1}{2} \frac{\lambda_H}{\Delta\lambda} - 1 = 1836$.

5.17.

Пара атомов или ионов	$\Delta\lambda_{Ly_\alpha}, \text{ \AA}$
H - D	0.33
$^3\text{He}^+ - ^4\text{He}^+$	$1.4 \cdot 10^{-2}$
$^{19}\text{Ne}^{9+} - ^{20}\text{Ne}^{9+}$	$2.1 \cdot 10^{-5}$

5.18. $\Delta\lambda_\infty = \frac{2}{R} \frac{m_e}{M_p} \cong 1 \text{ \AA}$.

5.19. См. 5.2. *m-приведенная* масса пары частиц. Отметим, радиусы, энергии, частоты, периоды зависят от массы частиц, скорости и релятивистский фактор – нет.

5.20. См. 5.19.

5.21. Воспользовавшись моделью Бора для атома водорода, получим

$r_n = \varepsilon \frac{\hbar^2}{\mu e^2} n^2 = 2\varepsilon \frac{m_e}{m^*} n^2 a_0$; здесь $\mu = m^*/2$ - приведенная масса электрона и

дырки, ε - диэлектрическая проницаемость среды. Энергия экситона

$$E_n = -\frac{\mu e^4}{2\hbar^2} \frac{1}{\varepsilon^2 n^2} = -\frac{1}{2} \frac{m^*}{m_e} \frac{Ry}{\varepsilon^2 n^2}. \text{ Для основного состояния } (n=1) \text{ получим}$$

$r_1 = 50.8 \text{ \AA}$; $E_1 = -1.18 \cdot 10^{-2} \text{ эВ}$. Отметим, размер экситона существенно превышает межатомное расстояние в решетке, что позволяет использовать макроскопический параметр – диэлектрическую проницаемость.

5.22. Серия Лаймана атома водорода $1216 \text{ \AA} - 912 \text{ \AA}$ не видна, спектр атома позитрония виден полностью.

5.23. Приведенная масса пары протон-мюон равна $186 m_e$;

радиусы - $r_n = \frac{1}{186} a_0 n^2$; скорости - $v_\mu = v_e$; энергии - $E_n = -186 Ry/n^2$.

5.24. Найдутся, на переходах $14 \rightarrow 13 \rightarrow 12$.

5.25. $R > a_0$.

5.26. Орбита с радиусом r_n , соответствующая моменту импульса $n\hbar$

, находится внутри или на краю шара, если $n^2 \leq \frac{R}{a_0}$. При условиях задачи

$n = 1$.

5.27. Один уровень (внутри шара) $E_1 = -\frac{3}{2} \frac{e^2}{R} + \hbar\omega$, $\hbar\omega = \frac{e^2}{R} \sqrt{\frac{a_0}{R}}$,

остальные $E_n = -Ry/n^2$, $n > 1$ (см. задачу 5.26).

5.28. Боровская орбита с номером n погружается в ядро, если $n^2 \leq 186 \frac{R_0}{a_0} 2.5^{1/3} Z_n^{4/3}$. Для $n = 1$ находим $Z_1 = 48$, $A = 120$. Для $n = 2$ необходимо ядро с $A \geq 340$.

5.29. $E = -\frac{3}{2} \frac{e^2}{R} + \hbar\omega$, $\hbar\omega = \hbar \sqrt{\frac{e^2}{2.5 \cdot R_0^3 \cdot 186 m_e}} = 12 \text{ МэВ}$, уровень

единственный (см. задачу 5.28). Отметим, что энергия $\hbar\omega$ не зависит от Z .

5.30. Из условия равновесия на круговой орбите $\frac{mv^2}{r} = F(r)$, $F(r)$ -

центростремительная сила $F(r) = -\frac{\partial U(r)}{\partial r}$, и правила квантования момента

импульса $mvr = n\hbar$ находим «универсальное» уравнение для определения радиусов орбит $n^2 \hbar^2 = m r_n^3 F(r)$, после чего находим скорости

$v_n = \frac{n\hbar}{mr_n}$ и энергии $E_n = U(r_n) + \frac{mv_n^2}{2}$, m -приведенная масса. В безраз-

мерных переменных $u_0 = \frac{U_0}{\hbar^2 / 2ma^2}$, $x_n = r_n^2 / a^2$ «универсальное» уравнение для «гауссова» потенциала становится $n = \sqrt{u_0} x e^{-x/2}$; оно имеет n корней, если $n < \sqrt{u_0} x^* e^{-x^*/2} < n+1$; в точке $x^* = 2$ - максимум функции $x e^{-x/2}$. Дейтрон имеет единственный уровень с энергией связи $E_b = 2.2$ МэВ; радиус находится итерациями $r_1 \approx 0.62 a$.

5.31. Вблизи дна ямы потенциал можно считать приблизительно гармоническим $U(r) \approx -U(0) + \frac{1}{2}kr^2$, $k = \left. \frac{\partial^2 U(r)}{\partial r^2} \right|_{r=0}$. Энергия низшего уровня равна $E_1 = -U_0 + \hbar\omega$, $\omega = \sqrt{k/m} = \sqrt{2U_0 / ma^2}$.

$$\mathbf{5.32.} \quad E_n = \frac{3}{2} \varepsilon \left(\frac{U_0}{\varepsilon} \right)^{2/3} n^{2/3}, \quad \varepsilon = \hbar^2 / ma^2.$$

$$\mathbf{5.33.} \quad E_n = n\hbar\omega, \quad \omega = \sqrt{k/m}, \quad \text{см. задачу 5.31.}$$

5.34. В «универсальном» уравнении для радиусов орбит (см. 5.30) $n^2 = \text{const} \cdot f(x)$ наибольшему возможному значению радиуса «последней» орбиты соответствует координата максимума функции $f(x)$:

$$\text{а) } x = \frac{r_{\max}}{a} = 2 \quad \text{и б) } x = \frac{\pi r_{\max}}{a} = 2.456.$$

5.35. Из радиального интеграла находим:

$$(n_r + \ell)^2 = \frac{e^2 \ell^2}{2p(-E)}, \quad p = a_o \ell^2, \quad L = \ell \hbar; \quad p \text{ - «параметр» эллипса.}$$

Таким образом, получаем

$$E = -\frac{e^2}{2a_o} \frac{1}{(n_r + \ell)^2}.$$

$$\mathbf{5.36.} \quad r_{\min, \max} = a_0 n^2 \left(1 \pm \sqrt{1 - \frac{\ell^2}{n^2}} \right).$$

5.37. При $\ell \ll n$ имеем (см. 5-36) $r_{\min} \cong a_0/2$, $r_{\max} \cong 2n^2 a_0$.

$$\mathbf{5.38.} \quad r_{\min, \max} = a_o n^2 \left(1 \pm \sqrt{\frac{2}{n}} \right), \quad (\text{см. 5-36}), \quad \frac{\Delta r}{a_o n^2} = \frac{2\sqrt{2}}{\sqrt{n}}.$$

$$5.39. \quad v_{\min, \max} = \frac{Ze^2}{\hbar} \frac{\ell}{n^2 (1 \pm \sqrt{1 - \ell^2 / n^2})}; \quad v_{\max} (\ell = 1; n \rightarrow \infty) \rightarrow 2 \frac{Ze^2}{\hbar}.$$

Отметим, $v_{\max} \rightarrow c$ при $Z \rightarrow 137/2$ (ср.5-6).

5.40. Из уравнения для мощности излучения и теоремы вириала

$$-\dot{E} = \frac{2}{3} \frac{e^2}{c^3} |\ddot{r}|^2, \quad E = -\frac{Z}{2} \frac{e^2}{r}, \quad \text{получим уравнение для изменения радиуса}$$

$$3r^2 dr = -4 \frac{Ze^4}{m^2 c^3} dt, \quad \text{интегрируя которое с заданным начальным услови-$$

ем, получим $r(t) = a_0 \frac{n^2}{Z} (1 - \frac{t}{\tau_n})^{1/3}$, где время «падения» электрона на яд-

ро равно $\tau_n = \frac{1}{4} \frac{1}{\omega_0} \frac{1}{\alpha^3} \frac{n^6}{Z^4}$; $\omega_0 = \frac{v_0}{a_0} = \frac{me^4}{\hbar^3}$ - циклическая частота обра-

щения на первой орбите. Период обращения на начальной орбите

$$T_n = \frac{2\pi}{\omega_0} \frac{n^3}{Z^2}, \quad \text{так что электрон совершает порядка } \frac{1}{\alpha^3} \frac{n^3}{Z^2} \gg 1 \text{ оборотов.}$$

Отметим, что непосредственно перед падением $\dot{r} \rightarrow \infty$. Время падения с первой орбиты равно $\tau_1 \approx 1.6 \cdot 10^{-11}$ с.

5.41. Время «падения» $n_1 \rightarrow n_2$ равно (см. 5.40):

$$\tau(n_1 \rightarrow n_2) = \frac{1}{4} \frac{1}{\omega_0} \frac{1}{\alpha^3} \frac{1}{Z^4} (n_1^6 - n_2^6).$$

5.42. Время «падения» мюона на ядро с орбиты с номером n равно (см. 5.40) $\tau_{\mu, n} = \tau_1 n^6 / 186 \approx 0.84 \cdot 10^{-13} n^6$ с. Стартуя с орбиты $n > 20$ мюон не долетит до ядра.

$$5.43. \quad E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} n^2, \quad (\text{см. задачу 7.1}).$$

$$5.44. \quad E_n = n\hbar\omega.$$

5.45. Из условия квантования Бора-Зоммерфельда $\oint p dx = 2\pi n\hbar$ и закона сохранения энергии $E = p^2/2m + mgx$ получаем



$2 \int_0^H \sqrt{2m(E - mgx)} dx = 2\pi n \hbar$, $n=1,2,3,\dots$ где $H = E/mg$ - максимальная

высота. Выполняя интегрирование, находим энергии и высоты:

$$E_n = \frac{1}{2} (3\pi g \hbar \sqrt{m})^{2/3} n^{2/3}; \quad H_n = \frac{1}{2} \left(\frac{3\pi \hbar}{m\sqrt{g}} \right)^{2/3} n^{2/3}.$$

($n=1$) для нейтрона равна ~ 16 микрон.

рис. 1

II. Основы формализма квантовой механики

6. Основные понятия квантовой механики. Волновая функция. Операторы физических величин. Среднее значение и дисперсия физической величины. Собственные значения и собственные функции операторов физических величин.

6.1. Средние значения вычисляем по формулам

$$\langle x \rangle = \int \psi^*(x) \cdot x \psi(x) dx, \quad \langle x^2 \rangle = \int \psi^*(x) \cdot x^2 \psi(x) dx,$$

$$\langle p \rangle = \int \psi^*(x) \cdot \hat{p} \psi(x) dx, \quad \langle p^2 \rangle = \int \psi^*(x) \cdot \hat{p}^2 \psi(x) dx.$$

Вычисляя интегралы с учетом свойства четности для заданной функции, получим

$$\langle x \rangle = \langle p \rangle = 0.$$

Вычисление квадратов средних дает

$$\langle x^2 \rangle = \frac{1}{a\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-x^2/a^2) x^2 dx = \frac{a^2}{2},$$

$$\langle p^2 \rangle = \frac{-\hbar^2}{a\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-x^2/2a^2) \frac{d^2}{dx^2} \exp(-x^2/2a^2) dx = \frac{\hbar^2}{2a^2}.$$

Заданное состояние описывает частицу с нулевым средним значением импульса (неподвижную частицу), локализованную вблизи начала координат $x = 0$. Отметим, что для заданного состояния $D_x D_p = \hbar^2/4$ и не зависит от ширины пакета.

6.2. $\langle x \rangle = x_0, \quad \langle p \rangle = \hbar k_0, \quad \langle x^2 \rangle = a^2/2, \quad \langle p^2 \rangle = \hbar^2/2a^2.$

Пакет описывает частицу локализованную вблизи точки с координатой $x = x_0$ и движущуюся с импульсом (средним) $\hbar k_0$.

6.3. Вычисляем константу A из условия нормировки

$$A^2 \int \exp(-r/a_0) r^2 dr \int d\Omega = 1.$$

Имеем $A = \sqrt{1/\pi a_0^3}$. Средние значения потенциальной и кинетической энергии электрона вычисляем по формулам

$$\langle V \rangle = - \int |\psi(r)|^2 \frac{e^2}{r} d^3 r = - \frac{e^2}{\pi a_0^3} \int_0^{\infty} r \exp(-2r/a_0) dr \int d\Omega = - \frac{e^2}{a_0},$$

$$\begin{aligned} \langle T \rangle &= \int \psi(r) \hat{T} \psi(r) d^3 r = \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{1}{\pi a_0^3} \int_0^\infty r \exp(-r/a_0) \frac{d^2}{dr^2} (r \exp(-r/a_0)) dr \int d\Omega = \frac{e^2}{2a_0}. \end{aligned}$$

Отметим, что вычисленные средние удовлетворяют соотношению $\langle T \rangle = -\langle V \rangle / 2$, а полная энергия $E = \langle T \rangle + \langle V \rangle = -\langle T \rangle = \langle V \rangle / 2$.

6.4. Из условия нормировки $\int |\psi(x)|^2 dx = 1$ находим $A = 1/\sqrt{a\sqrt{\pi}}$.

Вычисление средних (см. задачу 6.1) дает

$$\langle T \rangle = \frac{\langle p^2 \rangle}{2m} = \frac{\hbar^2}{4ma^2} = \frac{\hbar\omega}{4}, \quad \langle V \rangle = \frac{m\omega^2 \langle x \rangle^2}{2} = \frac{m\omega^2 a^2}{4} = \frac{\hbar\omega}{4}.$$

Отметим, что $\langle T \rangle = \langle V \rangle$.

6.5. Решая задачу $\hat{p}\psi_p(x) = p\psi_p(x)$, получим

$$\psi_p(x) = \exp\left(\frac{i}{\hbar} px\right).$$

Полученную функцию принято нормировать согласно условию $\int \psi_p(x) \psi_{p'}^*(x) dx = \delta(p - p')$, что дает

$$\psi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} px\right).$$

Спектр собственных значений оператора импульса непрерывный.

Аналогично для оператора \hat{L}_z находим

$$\psi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(im\varphi), \quad L_z = m\hbar, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

Дискретность спектра собственных значений L_z возникает из условия периодичности волновой функции $\psi_m(\varphi + 2\pi) = \psi_m(\varphi)$. Функции нормированы согласно условию

$$\int_0^{2\pi} |\psi_m(\varphi)|^2 d\varphi = 1.$$

6.6. Имеем два набора собственных функций оператора кинетической энергии $\psi_k(x) = \exp(\pm ikx)$ или $\psi_k(x) = \begin{cases} \cos(kx), \\ \sin(kx). \end{cases}$ Спектр собственных

значений является непрерывным $E_k = \hbar^2 k^2 / 2m$. Заметим, что функции из

первого набора являются также собственными функциями оператора импульса.

6.7. Используя решения задач 6.5 и 6.6, имеем

$$\psi_k(x) = \exp(\pm ikx).$$

В этом состоянии энергия и импульс частицы определены точно и равны $E_k = \hbar^2 k^2 / 2m$ и $p = \pm \hbar k$ соответственно.

6.8. Используя решения задач 6.5 и 6.6, например, имеем

$$\psi_k(x) = \cos(kx).$$

В этом состоянии энергия частицы определена точно и равна $E_k = \hbar^2 k^2 / 2m$. В то же время рассматриваемая функция не является собственной функцией оператора импульса, т.е. импульс не имеет точно определенного значения. Среднее значение импульса $\langle p \rangle = 0$.

6.9. $[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar$, $[\hat{x}, \hat{p}_y] = 0$.

6.10. Указание: Для доказательства справедливости соотношений подействовать каждым из коммутационных соотношений на некоторую волновую функцию $\psi(x, y, z)$.

6.11. Указание. Для доказательства справедливости утверждений достаточно показать, что операторы Гамильтона \hat{H} , \hat{L}^2 , и \hat{L}_z попарно коммутируют друг с другом, т.е. $[\hat{H}, \hat{L}^2] = [\hat{H}, \hat{L}_z] = [\hat{L}^2, \hat{L}_z] = 0$. Доказательство этих утверждений удобно проводить в сферической системе координат.

6.12. Указание. Вычислить коммутатор $[\hat{H}, \hat{p}_x]$.

6.13. Указание. Показать, что коммутатор $[\hat{H}, \hat{L}_z] = 0$, где ось z направлена вдоль оси симметрии системы (оси молекулы).

6.14. Указание. Достаточно остановиться на случае состояний, удовлетворяющих условиям $\langle x \rangle = \langle p \rangle = 0$. Рассмотреть функционал на множестве функций с интегрируемым квадратом

$$F(\psi) = \int_{-\infty}^{\infty} \left| \alpha \psi(x) + \frac{d\psi}{dx} \right|^2 dx$$

и сформулировать условие его неотрицательности.

6.15. Заданное состояние представим в виде суперпозиции состояний с заданным значением импульса $\psi_p(x) = \frac{\exp(ipx/\hbar)}{\sqrt{2\pi\hbar}}$:

$$\psi(x) = \int C_p \psi_p(x) dp.$$

Величина $W(p) = |C_p|^2$ является искомой плотностью вероятности и может быть определена как

$$C_p = \int \psi(x) \psi_p^*(x) dx.$$

Вычисляя этот интеграл, получим

$$W(p) dp = |C_p|^2 dp = \frac{a}{\hbar \sqrt{\pi}} \exp\left(-\frac{(p-p_0)^2 a^2}{\hbar^2}\right) dp.$$

Отметим, что распределение по импульсам тоже получилось гауссовым.

6.16. Каждую из заданных функций необходимо представить в виде линейной суперпозиции собственных функций оператора \hat{L}_z :

$$\psi(\varphi) = \sum C_m \psi_m(\varphi) = \sum C_m \frac{\exp(im\varphi)}{\sqrt{2\pi}}.$$

В рассматриваемых случаях это разложение легко проводится с учетом формул

$$\cos(\varphi) = \frac{\exp(i\varphi) + \exp(-i\varphi)}{2}, \quad \sin(\varphi) = \frac{\exp(i\varphi) - \exp(-i\varphi)}{2i}.$$

В результате для случая а), например, получаем

$$\psi(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2}} \psi_{+1}(\varphi) + \frac{1}{\sqrt{2}} \psi_{-1}(\varphi),$$

то есть данное состояние есть суперпозиция состояний с собственными значениями $L_z = \pm \hbar$. Эти значения и могут быть измерены в эксперименте. Вероятность их измерения определяется значениями $W_{\pm 1} = |C_{\pm 1}|^2 = 1/2$.

Аналогично в случае б) имеем

$$\psi(\varphi) = B \sin^2(3\varphi) = B(1 - \cos(6\varphi)) / 2 = \sqrt{\frac{2}{3}} \psi_0(\varphi) - \sqrt{\frac{1}{6}} \psi_{+6}(\varphi) - \sqrt{\frac{1}{6}} \psi_{-6}(\varphi).$$

Поэтому с вероятностью $W_0 = 2/3$ будет измерено значение $L_z = 0$ и с вероятностью $W_{\pm 6} = 1/6$ значения $L_z = \pm 6\hbar$. Среднее значение z-проекции момента импульса равно нулю.

6.17. Заданные состояния следует разложить по сферическим функциям, являющимся собственными состояниями операторов \hat{L}^2 и \hat{L}_z .

Например, для случая а) имеем

$$\psi(r, \theta, \varphi) = AR(r) \sin \theta \cos \varphi = R(r) \left(\frac{1}{\sqrt{2}} Y_{11}(\theta, \varphi) + \frac{1}{\sqrt{2}} Y_{1-1}(\theta, \varphi) \right).$$

Поэтому $L^2 = 2\hbar^2$ с вероятностью 1, а $L_z = \pm\hbar$ с вероятностью $1/2$.

6.18. $L_z = \pm\hbar$, вероятности $W_{\pm 1} = 1/2$, $\langle L_z \rangle = 0$, $D_{L_z} = \hbar^2$.

6.19. $L_z = \pm\hbar$, вероятности $W_{\pm 1} = 1/2$, $\langle L_z \rangle = 0$, $D_{L_z} = \hbar^2$,

$L^2 = 2\hbar^2$, вероятность $W = 1$, $\langle L^2 \rangle = 2\hbar^2$, $D_{L^2} = 0$.

6.20. Таких состояний можно построить бесконечно много, смешивая состояния с различными L_z . Например, в случае а) можно смешивать два состояния с $L_z = 0$ и $L_z = \hbar$:

$$\psi(\varphi) = C_0\psi_0(\varphi) + C_1\psi_1(\varphi).$$

Среднее значение L_z может быть найдено по формуле

$$\langle L_z \rangle = |C_0|^2 \cdot 0 + |C_1|^2 \cdot \hbar = \hbar/2.$$

Коэффициенты C_0 и C_1 удовлетворяют условию нормировки

$$|C_0|^2 + |C_1|^2 = 1.$$

В результате имеем $|C_0|^2 = |C_1|^2 = 1/2$, отсюда, например, $C_0 = 1/\sqrt{2}$, $C_1 = -1/\sqrt{2}$.

7. Стационарное уравнение Шредингера. Одномерные задачи.

7.1. Рассмотрим стационарные состояния частицы в потенциале

$$V(x) = \begin{cases} 0, & |x| \leq a/2, \\ \infty, & |x| > a/2. \end{cases}$$

Решаем уравнение

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi = 0 \quad (1)$$

в области $x \in (-a/2, a/2)$ с граничным условием

$$\psi(x = \pm a/2) = 0.$$

Вводя $k^2 = 2mE/\hbar^2$ ($k > 0$), запишем общее решение (1) в виде

$$\psi(x) = A \sin(kx) + B \cos(kx).$$

Граничные условия дают:

$$A \sin \frac{ka}{2} + B \cos \frac{ka}{2} = 0,$$

$$-A \sin \frac{ka}{2} + B \cos \frac{ka}{2} = 0.$$

Полученная система имеет ненулевое решение, если ее определитель обращается в ноль, т.е.

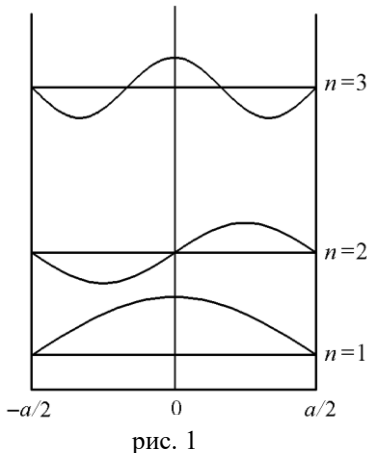
$$\begin{vmatrix} \sin \frac{ka}{2} & \cos \frac{ka}{2} \\ -\sin \frac{ka}{2} & \cos \frac{ka}{2} \end{vmatrix} = 0,$$

откуда находим $\sin(ka) = 0$, то есть

$$k_n = \frac{n\pi}{a}, \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} n^2, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

Нормированные волновые функции имеют вид



$$\Psi_n(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{a}} \cos \frac{n\pi x}{a}, & n = 1, 3, 5, \dots \\ \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi x}{a}, & n = 2, 4, 6, \dots \end{cases}$$

Волновые функции нескольких нижних состояний также приведены на рис. Отметим, что все состояния характеризуются определенной четностью.

Среднее значение координаты в любом стационарном состоянии $\langle x \rangle = 0$.

7.2. Максимумы и минимумы плотности вероятности $|\Psi_n(x)|^2$ достигаются в точках (см. задачу 7.1)

	max	min
$n=1$	$x=0$	$x=\pm a/2$
$n=2$	$x=\pm a/4$	$x=0, \pm a/2$
$n=3$	$x=0, \pm a/3$	$x=\pm a/6, \pm a/2$

7.3. Средние значения координаты и импульса в рассматриваемом случае равны нулю. Поэтому для вычисления дисперсий достаточно вычислить $\langle x^2 \rangle$ и $\langle p^2 \rangle$. Имеем

$$D_x = \int_{-a/2}^{a/2} x^2 \Psi_1^2(x) dx = \frac{4}{a} \int_0^{a/2} x^2 \cos^2 \frac{\pi x}{a} dx =$$

$$\frac{4a^2}{\pi^3} \int_0^{\pi/2} \xi^2 \cos^2 \xi d\xi = \frac{a^2}{2\pi^2} \left(\frac{\pi^2}{6} - 1 \right).$$

$$D_p = -\hbar^2 \int_{-a/2}^{a/2} \Psi_1(x) \frac{d^2}{dx^2} \Psi_1(x) dx = -\frac{4\hbar^2 \pi^2}{a^2} \int_0^{a/2} \cos \xi \frac{d^2}{d\xi^2} \cos \xi d\xi = \frac{\pi^2 \hbar^2}{a^2}.$$

$$D_x D_p = \frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{\pi^2}{6} - 1 \right) > \hbar^2 / 4.$$

7.4. Пусть потенциал задан в следующем виде (см. рис. 2):

$$V(x) = \begin{cases} 0, & |x| \leq a/2, \\ V_0, & |x| > a/2. \end{cases}$$

Введем $k^2 = 2mE/\hbar^2$ и $\kappa^2 = 2m(V_0 - E)/\hbar^2$. Обе введенные величины являются положительными. Тогда в каждой из областей непрерывности потенциала уравнение Шредингера имеет вид

$$\text{области I, III} \quad \psi'' - \kappa^2\psi = 0,$$

$$\text{область II} \quad \psi'' + k^2\psi = 0.$$

Рассмотрим поочередно случай четных и нечетных состояний.

а) четные состояния $\psi(x) = \psi(-x)$. Решения имеют вид

$$\text{область I} \quad \psi_I(x) = B_I \exp(\kappa x),$$

$$\text{область II} \quad \psi_{II}(x) = B_{II} \cos(kx),$$

$$\text{область III} \quad \psi_{III}(x) = A_{III} \exp(-\kappa x).$$

При этом $B_I = A_{III}$. «Сшивая» функции и первые производные в точке разрыва потенциала $x = a/2$, найдем

$$\begin{aligned} B_{II} \cos(ka/2) &= A_{III} \exp(-\kappa a/2), \\ -k B_{II} \sin(ka/2) &= -\kappa A_{III} \exp(-\kappa a/2) \end{aligned}$$

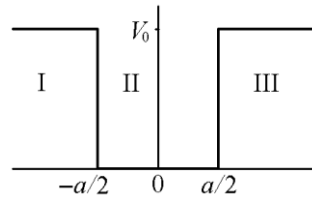


Рис. 2

Отсюда

$$ka \cdot \operatorname{tg}(ka/2) = \sqrt{2mV_0 a^2/\hbar^2 - (ka)^2}. \quad (1)$$

Будем анализировать решение уравнения (1) графически. Корни уравнения могут быть определены как абсциссы точек пересечения функции $f_1(\xi) = \xi \operatorname{tg}(\xi/2)$ и дуги окружности

$$f_2(\xi) = \sqrt{B - \xi^2} \quad (\text{здесь } \xi = ka) \text{ радиуса } \sqrt{B} = \sqrt{2mV_0 a^2/\hbar^2} \quad (\text{см. рис. 3}).$$

Как видно, хотя бы один корень уравнения, т.е. одно четное связанное состояние всегда существует.

б) нечетные состояния $\psi(-x) = -\psi(x)$. В этом случае

$$\text{область I} \quad \psi_I(x) = B_I \exp(\kappa x),$$

$$\text{область II} \quad \psi_{II}(x) = B_{II} \sin(kx),$$

$$\text{область III} \quad \psi_{III}(x) = A_{III} \exp(-\kappa x),$$

причем $B_I = -A_{III}$. Так же как и в предыдущем случае из условия непрерывности функции и ее первой производной получаем уравнение для определения значений энергии нечетных состояний

$$-ka \cdot \operatorname{ctg}(ka/2) = \sqrt{2mV_0a^2/\hbar^2 - (ka)^2}. \quad (2)$$

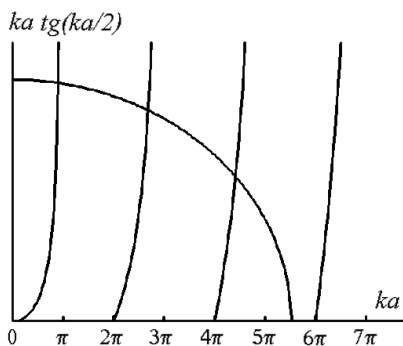


Рис. 3.

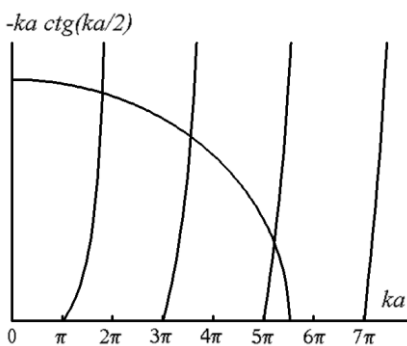


Рис. 4.

Структуру энергетического спектра, получающегося из решения уравнения (2), иллюстрирует рис. 4. Из графика видно, что условием возникновения первого нечетного состояния является неравенство

$$\frac{2mV_0a^2}{\hbar^2} \geq \pi^2. \quad (5.50)$$

7.5. Указание. Случай а) соответствует «мелкой» яме. Поэтому при решении уравнения (1) (задача 7.4) полагаем, что $ka \ll 1$, поэтому уравнение (1) запишется в виде

$$(ka)^2/2 \approx \sqrt{2mV_0a^2/\hbar^2 - (ka)^2},$$

откуда находим значение энергии состояния.

Случай б) соответствует «глубокой» яме. В этом случае приближенное решение уравнения (1) следует искать в виде $ka = \pi - \delta$, ($\delta \ll 1$).

7.6. Воспользовавшись решением задачи 7.4, имеем, что в яме имеется единственное связанное состояние.

7.7. Условие возникновения n -го стационарного состояния:
 $2mV_0a^2/\hbar^2 \geq \pi^2(n-1)^2$, $n=1,2,3,\dots$

7.8. Указание. Следует найти условия, при выполнении которых уравнение (2) (задача 7.4) имеет n корней.

7.9. Указание. Следует найти условия, при выполнении которых уравнение (1) (задача 7.4) имеет n корней.

$$7.10. W = \int_{-a/2}^{a/4} \psi_{n=2}^2(x) dx = 3/4.$$

7.11. Указание. Яма является «глубокой», поэтому состояния с малыми значениями n практически не отличаются от состояний в бесконечно глубокой потенциальной яме.

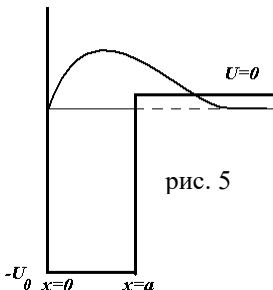
$$7.12. D_x = \frac{2}{a} \int_{-a/2}^{a/2} x^2 \cos^2 \frac{n\pi x}{a} dx \approx a^2/12, n \gg 1.$$

7.13. Указание. Структура уровней в такой яме аналогична структуре нечетных состояний в симметричной яме той же глубины V_0 , но удвоенной ширины ($2a$).

7.14. В рассматриваемой ситуации область локализации частицы много больше размера ямы a . Поэтому приближенно можно считать, что волновая функция частицы слабо связанного состояния $E_b \ll U_0$ имеет вид: $\psi(x) = A \exp(-\kappa x)$, $\kappa = \sqrt{2m(U_0 - E)/\hbar^2} = \sqrt{2mE_b/\hbar^2}$, A - нормировочная константа. Наиболее вероятное значение координаты есть $x^* \approx a$, среднее значение определяем как

$$\langle x \rangle = \int_0^\infty x \psi^2(x) dx \approx \frac{\int_0^\infty x \exp(-2\kappa x) dx}{\int_0^\infty \exp(-2\kappa x) dx} = 1/2\kappa = \hbar/2\sqrt{2mE_b} \approx \frac{a}{\pi} \sqrt{U_0/E_b} \gg a.$$

Качественный вид волновой функции слабо связанного состояния приведен на рисунке.



7.15. Используя решение задачи 7.14, получим $E_b \approx U_0 / (\alpha\pi)^2 \ll U_0$

$$7.16. E_b \approx U_0 - \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}.$$

7.17. Выберем начало координат так, чтобы волновые функции системы характеризовались определенной четностью. Тогда для четных (нечетных) состояний запишем:

$$\psi(x) = A(\exp(\kappa x) \pm \exp(-\kappa x)), 0 \leq x \leq b/2$$

$$\psi(x) = B \sin k(a + b/2 - x), b/2 \leq x \leq a + b/2$$

Здесь $k^2 = 2mE/\hbar^2$ и $\kappa^2 = 2m(V_0 - E)/\hbar^2$, а знак « \pm » соответствует соответственно четному и нечетному состояниям. Записанные решения удо-

влетворяют граничному условию в точке $x = a + b/2$. Из условия непрерывности функции и ее производной в точке $x = b/2$ получим уравнение для определения энергетического спектра

$$\operatorname{tg}(ka) = \frac{k}{\kappa} \cdot \frac{1 \pm \exp(-\kappa b)}{1 \mp \exp(-\kappa b)}. \quad (1)$$

В силу условий $2mV_0a^2/\hbar^2 \gg 1$ и $2mV_0b^2/\hbar^2 \gg 1$ очевидно, что $k/\kappa \ll 1$ и $\exp(-\kappa b) \ll 1$. Поэтому ищем решение уравнения (1) в виде $ka = \pi - \delta$, $\delta \ll 1$. Имеем

$$\delta \approx \sqrt{\frac{\pi^2 \hbar^2}{2mV_0a^2}} \left(1 \pm 2 \exp \left(-\sqrt{\frac{2mV_0b^2}{\hbar^2}} \right) \right).$$

В результате $E_{\pm} \approx \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} (1 - \delta/\pi)$. Произошло расщепление уровней, величина щели между четным и нечетным уровнями

$$\delta E = E_- - E_+ \approx \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} \cdot \frac{2\hbar}{\sqrt{2mV_0a^2}} \exp \left(-\sqrt{\frac{2mV_0b^2}{\hbar^2}} \right)$$

пропорциональна вероятности туннелирования через внутренний потенциальный барьер.

7.18. Для периодического одномерного потенциала с периодом a

$$V(x) = V(x+a). \quad (1)$$

Тогда стационарное уравнение Шредингера представимо в виде:

$$\psi''(x) + k^2(x)\psi(x) = 0; k^2(x) = \frac{2m}{\hbar^2}(E - V(x)) \quad (2)$$

Пусть $\psi_1(x)$ и $\psi_2(x)$ -- два линейно независимых решения уравнения (2).

Тогда любое решение этого же уравнения представимо в виде:

$$\psi(x) = C_1\psi_1(x) + C_2\psi_2(x) \quad (3)$$

Лемма. Среди решений уравнения (2) существует решение $\Phi(x)$, такое, что для любого x $\Phi(x+a) = \lambda\Phi(x)$; $\lambda = \text{const}$. *Доказательство.* Согласно (3) $\Phi(x) = C_1\psi_1(x) + C_2\psi_2(x)$. Линейно независимые решения, образующие фундаментальную совокупность решений (ФСР) для простоты выбираем так, чтобы $\psi_1(0) = 1$; $\psi_1'(0) = 0$; $\psi_2(0) = 0$; $\psi_2'(0) = 1$. Из условия непрерывности функции и ее производной в точке $x=0$ получаем, что для искомого решения $\Phi(x)$:

$$\Phi(x+a)|_{x=0} = C_1\psi_1(a) + C_2\psi_2(a) = \lambda\Phi(x)|_{x=0} = \lambda C_1,$$

$$\Phi'(x+a)|_{x=0} = C_1\psi'_1(a) + C_2\psi'_2(a) = \lambda\Phi'(x)|_{x=0} = \lambda C_2.$$

Эта система однородных уравнений относительно C_1 и C_2 совместна тогда и только тогда, когда

$$\begin{vmatrix} (\psi_1(a) - \lambda) & \psi_2(a) \\ \psi'_1(a) & (\psi'_2(a) - \lambda) \end{vmatrix} = (\psi_1(a) - \lambda)(\psi'_2(a) - \lambda) - \psi_2(a)\psi'_1(a) = 0. \quad (4)$$

Введем обозначение $\varphi(x) \equiv \psi_1(x)\psi'_2(x) - \psi_2(x)\psi'_1(x)$. Тогда из уравнения (2) следует, что $\varphi'(x) = 0$ и, следовательно, $\varphi(x) = const$; $\varphi(0) = \varphi(a) = 1$. Значит, уравнение (4) может быть переписано в виде: $\lambda^2 - 2L\lambda + 1 = 0$, где введен зависящей от энергии электрона параметр $2L = \psi_1(a) + \psi'_2(a)$.

$$\text{Таким образом, найдены два числа } \lambda_{1,2} = L \pm \sqrt{L^2 - 1}, \quad (5)$$

для которых $\Phi_{1,2}(x+a) = \lambda_{1,2}\Phi_{1,2}(x)$. Лемма доказана.

Рассмотрим общие свойства найденных решений $\Phi_{1,2}(x)$.

1) Пусть $|L| > 1$. Тогда $\lambda_{1,2} \in \mathfrak{R}$; $\lambda_1\lambda_2 = 1$ согласно теореме Виета, причем один корень больше единицы, другой – меньше, а $\Phi_{1,2}(x+na) = (\lambda_{1,2})^n \Phi_{1,2}(x)$, $n \in \mathbb{Z}$.

При стремлении целого числа n к $\pm\infty$, одно из решений $\Phi_{1,2}(x)$ неограниченно возрастает, а, значит, значения энергии E , соответствующие рассматриваемому случаю, запрещены.

2) Пусть $|L| < 1$. Тогда можно ввести обозначение $L = \cos(Ka)$, где $K = const$. Тогда $\lambda_{1,2} = \cos(Ka) \pm i \sin(Ka)$, и $\lambda_{1,2} = \exp(\pm iKa)$ (6)

Исследуемые решения можно записать в виде:

$$\Phi_{1,2}(x+a) = \exp(\pm iKa)\Phi_{1,2}(x) \quad (7)$$

С другой стороны решение всегда можно записать в виде $\Phi_{1,2}(x) = \exp(\pm iKx)P_{1,2}(x)$. Просто заменив здесь x на $x+a$, получим:

$\Phi_{1,2}(x+a) = \exp[\pm iK(x+a)]P_{1,2}(x+a)$. А новое представление записи (7) даёт:

$\Phi_{1,2}(x+a) = \exp[\pm iK(x+a)]P_{1,2}(x)$. Тогда $P_{1,2}(x+a) = P_{1,2}(x)$, период функции $P_{1,2}(x)$ совпадает с периодом потенциала.

Таким образом, волновая функция электрона в произвольном периодическом одномерном потенциале имеет вид:

$$\Psi_{1,2}(x,t) = \exp[\pm i(Kx - \omega t)]P_{1,2}(x) \quad (8)$$

7.19. Воспользуемся теоремой Блоха для волновых функций электрона в периодическом одномерном потенциале, доказательство которой приведено в решении задачи 7.18.

1) Пусть $E > V_0$. Фундаментальную совокупность решений (ФСР) уравнения Шредингера $\psi_1(x)$ и $\psi_2(x)$, учитывая требования непрерывности волновой функции и её производной, можно записать в виде:

$$\psi_1(x) = \cos(k_1 x); \quad \psi_2(x) = \frac{1}{k_1} \sin(k_1 x); \quad k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \text{ в области, где } V(x) = 0;$$

$$\psi_1(x) = \cos(k_1 a) \cos(k_2(x-a)) - \frac{k_1}{k_2} \sin(k_1 a) \sin(k_2(x-a)); \quad k_2 = \frac{\sqrt{2m(E-V_0)}}{\hbar}$$

$$\psi_2(x) = \frac{1}{k_1} \sin(k_1 a) \cos(k_2(x-a)) + \frac{1}{k_2} \cos(k_1 a) \sin(k_2(x-a)); \quad V(x) = V_0$$

Здесь мы ФСР в каждой из областей пространства искали как суперпозицию тригонометрических функций и учли, что $\psi_1(0) = 1$; $\psi_1'(0) = 0$; $\psi_2(0) = 0$; $\psi_2'(0) = 1$.

Тогда постоянная L , введенная в задаче 7.18, равна:

$$L = \frac{1}{2} [\psi_1(2a) + \psi_2'(2a)] = \cos(k_1 a) \cos(k_2 a) - \frac{1}{2} \left(\frac{k_1}{k_2} + \frac{k_2}{k_1} \right) \sin(k_1 a) \sin(k_2 a).$$

2) Пусть $0 < E \leq V_0$. Тогда необходимо в записи для ФСР понимать обозначение k_2 как $k_2 = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$ и заменить все тригонометрические функции, содержащие этот зависящий от энергии параметр, на гиперболические:

$$L = \cos(k_1 a) \operatorname{ch}(k_2 a) - \frac{1}{2} \left(\frac{k_1}{k_2} - \frac{k_2}{k_1} \right) \sin(k_1 a) \operatorname{sh}(k_2 a).$$

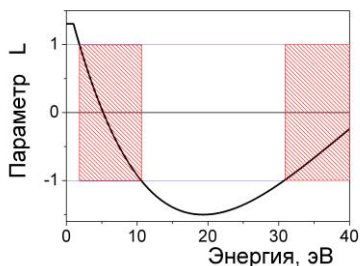


рис. 6

На рис. 6 представлена зависимость параметра L от энергии частицы для указанных в задаче параметров потенциала. В задаче 7.18 было показано, что допустимы лишь те значения энергии E , для которых $|L| < 1$. Эти разрешенные энергетические зоны, заштрихованные на рисунке, чередуются с запрещенными зонами, причем ширина разрешенных зон растет с ростом энергии.

7.20. Запишем уравнение Шредингера для всего пространства за исключением малой ε -окрестности особой точки $x = 0$. Причем будем рас-

смаатривать лишь случай, когда энергия частицы $E < 0$. Тогда решения уравнения Шредингера имеют вид:

$$\psi_I(x) = C \exp(-kx); \quad x < -\varepsilon \tag{1}$$

$$\psi_{II}(x) = C \exp(kx); \quad x > \varepsilon. \quad E = -\hbar^2 k^2 / 2m$$

В ε -окрестности особой точки $x = 0$ уравнение Шредингера представимо в виде: $-\psi''(x) - 2k_0\psi(x)\delta(x) = -k^2\psi(x), k_0 = \sqrt{|\tilde{k}_0|}$. Проинтегрируем это уравнение по x от $-\varepsilon$ до ε и устремим ε к нулю:

$$-\psi'(x = -0) + \psi'(x = +0) + 2|k_0|\psi(0) = 0 \tag{2}$$

Поскольку из (1) следует, что $\psi(x = +0) = \psi(x = -0) = C$, то из уравнения (2) получаем: $-kC - kC + 2|k_0|C = 0; \Rightarrow k = |k_0|$. Это условие и определяет положение **единственного** уровня энергии, что может существовать в такой яме.

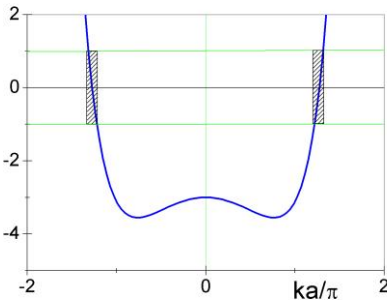


рис. 7

7.21. Будем рассматривать лишь случай, когда энергия частицы $E < 0$. Используя результаты задач 7.18 и 7.20, для особой точки $x = a$ запишем граничные условия для волновой функции:

$$\begin{aligned} \psi(a + \varepsilon) &= \psi(x - \varepsilon), \quad \varepsilon \rightarrow 0 \\ \psi'(x + \varepsilon) - \psi'(x - \varepsilon) &= 2k_0\psi(a), \quad k_0 = \sqrt{|k_0|} \end{aligned} \tag{1}$$

Граничные условия (1) и теорема Блоха позволяют составить уравнение, определяющее границы разрешенных и запрещенных энергетических зон:

$$\cos(Ka) = \cosh(ka) - \frac{k_0}{k} \sinh(ka), \quad |\cos(Ka)| \leq 1.$$

Графическое решение задачи для случая $k_0 a = 4$ представлено на рис. 7, где штриховкой показана энергетическая зона, в которую превращается единственный уровень в дельта-образной потенциальной яме.

7.22. Поскольку в одномерной прямоугольной бесконечно глубокой потенциальной яме $E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2ma^2}$, то в интервале энергий $(E, E + dE)$

находится $\Delta N = \frac{n \Delta E}{2E_n}$, откуда для плотности состояний (dN/dE) (с учетом принципа Паули в каждом из состояний может находиться по два электрона) находим

$$(dN/dE) = \frac{n}{E_n} = \frac{a}{\pi\hbar} \sqrt{\frac{2m}{E}}.$$

Например, для $a=1$ см и $E=1$ эВ имеем $(dN/dE) \sim 10^{19}$ эВ $^{-1}$.

$$7.23. \quad \Phi_{kn}(x, y) = \psi_k(x)\psi_n(y) = \frac{2}{\sqrt{ab}} \cdot \sin \frac{k\pi x}{a} \cdot \sin \frac{n\pi y}{b},$$

$$E_{kn} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m} \left(\frac{k^2}{a^2} + \frac{n^2}{b^2} \right), \quad k, n = 1, 2, 3, \dots$$

Координаты ямы определяются условием $0 \leq x \leq a \cup 0 \leq y \leq b$.

$$7.24. \quad E_{knl} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m} \left(\frac{k^2}{a^2} + \frac{n^2}{b^2} + \frac{l^2}{c^2} \right), \quad k, n, l = 1, 2, 3, \dots$$

$$\Phi_{knl}(x, y, z) = \psi_k(x)\psi_n(y)\psi_l(z) = \sqrt{\frac{8}{abc}} \cdot \sin \frac{k\pi x}{a} \cdot \sin \frac{n\pi y}{b} \cdot \sin \frac{l\pi z}{c},$$

Координаты ямы определяются условием $0 \leq x \leq a \cup 0 \leq y \leq b \cup 0 \leq z \leq c$.

7.25. Поскольку $E = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} n^2$, $n^2 = n_1^2 + n_2^2$, $n_1, n_2 \gg 1$, число состояний в интервале $(n, n+dn)$ с учетом принципа Паули есть

$$dN = 2 \cdot \frac{1}{4} \cdot 2\pi n dn = \pi n dn. \text{ Учитывая, что } dE = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} 2n dn, \text{ имеем}$$

$$dN = \frac{ma^2}{\pi \hbar^2} dE.$$

7.26. Поскольку $E = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} n^2$, $n^2 = n_1^2 + n_2^2 + n_3^2$, $n_1, n_2, n_3 \gg 1$, число состояний в интервале $(n, n+dn)$ с учетом принципа Паули есть

$$dN = 2 \cdot \frac{1}{8} \cdot 4\pi n^2 dn = \pi n^2 dn. \text{ Учитывая, что } dE = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} 2n dn, \text{ имеем}$$

$$dN = \frac{a^3 \sqrt{2m^3 E}}{\pi^2 \hbar^3} dE.$$

$$7.27. \quad E = \frac{4}{9} \cdot \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}.$$

7.28. Указание. Вычисление средних $\langle T \rangle$ и $\langle V \rangle$ удобно провести, воспользовавшись рекуррентными соотношениями для полиномов Эрмита (см. Приложение).

7.29. Нижнее состояние с нечетной волновой функцией – это состояние осциллятора $\psi_1(x)$. Проводя вычисление средних, находим

$$\langle T \rangle = \langle V \rangle = 3\hbar\omega/4.$$

7.30. Импульсное распределение следует искать так:

$$W(p) = |C_p|^2, \quad \text{где } C_p = \int \psi_0(x) \frac{\exp(-ipx/\hbar)}{\sqrt{2\pi\hbar}} dx,$$

$\psi_0(x)$ - волновая функция основного стационарного состояния осциллятора. Вычисляя интеграл, для $W(p)$ найдем:

$$W(p) = \frac{a}{\hbar\sqrt{\pi}} \exp\left(-\frac{p^2 a^2}{\hbar^2}\right).$$

Как и в случае координатного распределения, имеем гауссов волновой пакет.

7.31. Например, в случае а) заданное состояние есть суперпозиция стационарных состояний $\psi_0(x)$ и $\psi_2(x)$. Поэтому могут быть измерены значения энергии $\hbar\omega/2$ и $5\hbar\omega/2$.

7.32. Для частицы в потенциале $V(x) = m\omega^2 x^2/2$ имеем $\langle x \rangle = 0$. Поэтому $D_x = \langle x^2 \rangle = \frac{\hbar}{m\omega} (n+1/2)$.

7.33. Состояния осциллятора с такой средней энергией есть суперпозиция стационарных состояний, имеющих энергию $E_n = \hbar\omega(n+1/2)$, $n = 0, 1, 2, \dots$. Например, состояние с величиной $\langle E \rangle = 2/3 \hbar\omega$ можно получить, как суперпозицию основного и первого возбужденного состояний $\psi(x) = \alpha\psi_0(x) + \beta\psi_1(x)$. В этом случае

$$\langle E \rangle = |\alpha|^2 \frac{\hbar\omega}{2} + |\beta|^2 \frac{3\hbar\omega}{2} = \frac{2\hbar\omega}{3}.$$

Учитывая, что $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$, находим $|\beta|^2 = 1/6$, $|\alpha|^2 = 5/6$. Следовательно, искомое состояние имеет, например, вид

$$\psi(x) = \sqrt{5/6}\psi_0(x) + \sqrt{1/6}\psi_1(x).$$

7.34. Считаем, что начало координат выбрано посередине ямы. Поэтому

$$\begin{aligned} \langle x \rangle &= \int_{-a/2}^{a/2} x |\alpha \psi_n(x) + \beta \psi_m(x)|^2 dx = (\alpha^* \beta + \alpha \beta^*) \int_{-a/2}^{a/2} x \psi_n(x) \psi_m(x) dx = \\ &= 2 \operatorname{Re}(\alpha \beta) x_{mn}. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \langle x^2 \rangle &= \int_{-a/2}^{a/2} x^2 |\alpha \psi_n(x) + \beta \psi_m(x)|^2 dx = \\ &= |\alpha|^2 (x^2)_{nn} + |\beta|^2 (x^2)_{mm} + 2 \operatorname{Re}(\alpha \beta) (x^2)_{mn}. \end{aligned}$$

Здесь $x_{mn} = \int x \psi_m(x) \psi_n(x) dx$, $(x^2)_{mn} = \int x^2 \psi_m(x) \psi_n(x) dx$. Заметим, что $x_{mn} \neq 0$ только если четности состояний ψ_m и ψ_n различны, наоборот, $(x^2)_{mn} \neq 0$ если четности состояний совпадают.

$$\langle E \rangle = |\alpha|^2 E_n + |\beta|^2 E_m$$

8. Туннельный эффект.

8.1. $\vec{j} = \frac{\hbar}{2mi} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) = |A|^2 \frac{\hbar \vec{k}}{m} = |A|^2 \vec{v}$. Состояние описывает

поток частиц, двигающихся в направлении вектора \vec{k} со скоростью \vec{v} , $|A|^2$ - плотность частиц в потоке.

8.2. $j = (|A|^2 - |B|^2) \frac{\hbar k}{m}$.

8.3. а)-в) $j = 0$; г)-д) $j = 0.75|A|^2 \frac{\hbar k}{m}$

Распределения $|\psi(x)|^2$ для случаев а) и г) приведены на рис.

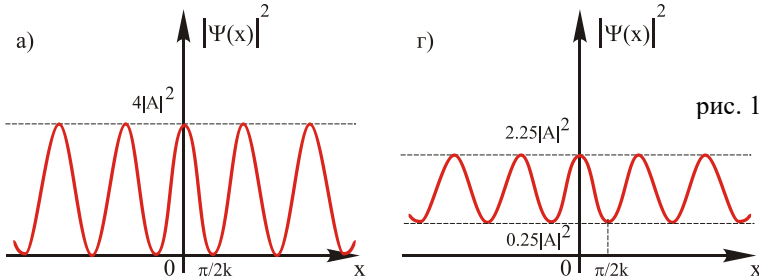


рис. 1

8.4. Рассмотрим сначала случай $E > V_0$. Введем $k_1^2 = 2mE/\hbar^2$ и $k_2^2 = 2m(E - V_0)/\hbar^2$. Обе введенные величины являются положительными. Тогда в каждой из областей непрерывности потенциала уравнение Шредингера имеет вид

область I ($x < 0$) $\psi'' + k_1^2 \psi = 0$,

область II ($x > 0$) $\psi'' + k_2^2 \psi = 0$.

Полагая, что поток частиц падает на потенциальную ступеньку слева, запишем решения уравнения Шредингера в областях I и II в виде

область I $\psi_I(x) = A_I \exp(ik_1 x) + B_I \exp(-ik_1 x)$,

область II $\psi_{II}(x) = A_{II} \exp(ik_2 x)$.

Мы учли, что в области II существует только прошедшая волна, а в области I – как падающая (ее амплитуда полагается известной), так и отражен-

ная. Из условия непрерывности волновой функции и ее первой производной в точке разрыва потенциала $x = 0$ получаем

$$\begin{aligned} A_I + B_I &= A_{II}, \\ ik_1(A_I - B_I) &= ik_2 A_{II}, \end{aligned}$$

откуда находим $2A_I = (1 + k_2/k_1)A_{II}$ или

$$A_{II} = \frac{2k_1}{k_1 + k_2} A_I, \quad B_I = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} A_I.$$

Для коэффициентов прохождения и отражения соответственно получаем

$$T = \frac{k_2}{k_1} \frac{|A_{II}|^2}{|A_I|^2} = \frac{4k_1 k_2}{(k_1 + k_2)^2}, \quad R = \frac{|B_I|^2}{|A_I|^2} = \frac{(k_1 - k_2)^2}{(k_1 + k_2)^2},$$

при этом естественно выполнено $T + R = 1$.

Случай $E < V_0$ рассматривается аналогично. Результаты расчетов дают $R = 1, T = 0$.

Графики зависимости $|\psi(x)|^2$ для случаев «подбарьерного» $E < V_0$ и «надбарьерного» $E > V_0$ движения имеют вид (см. рис.)

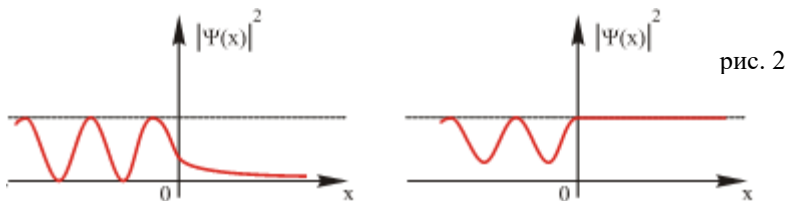


рис. 2

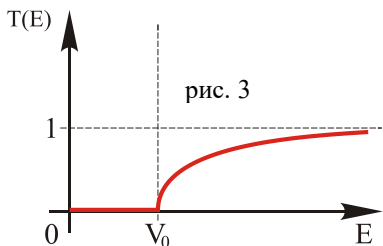


рис. 3

8.5. Искомая зависимость для коэффициента прохождения имеет вид, представленный на рис.

8.6. Вводя $k^2 = 2mE/\hbar^2$, запишем решения уравнения Шредингера в каждой из областей непрерывности потенциала (см. рис.):

$$\begin{aligned} \text{область I} \quad \psi_I(x) &= A_I \exp(ik_1 x) + B_I \exp(-ik_1 x), \\ \text{область II} \quad \psi_{II}(x) &= A_{II} x + B_{II} \\ \text{область III} \quad \psi_{III}(x) &= A_{III} \exp(ikx). \end{aligned}$$

«Сшивая» функции и их первые производные в точках разрыва потенциала $x = 0, a$, получим

$$\begin{aligned} A_I + B_I &= B_{II}, \\ ik(A_I - B_I) &= A_{II}, \\ A_{II}a + B_{II} &= B_{III} \exp(ika), \\ A_{II} &= ikB_{III} \exp(ika). \end{aligned}$$

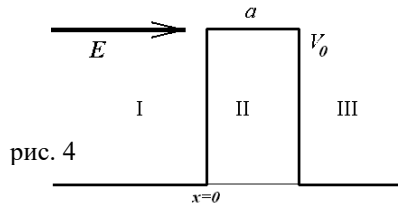


рис. 4

Выражая отсюда B_{III} через A_I , найдем

$$B_{III} = \frac{\exp(-ika)}{1 - ika/2} A_I, \text{ откуда для коэффициента прохождения через барьер}$$

получим

$$T = \frac{|B_{III}|^2}{|A_I|^2} = \frac{1}{1 + (ka/2)^2}.$$

График функции $T(a)$ и пространственного распределения плотности вероятности $|\psi(x)|^2$ приведены на рис. 5.

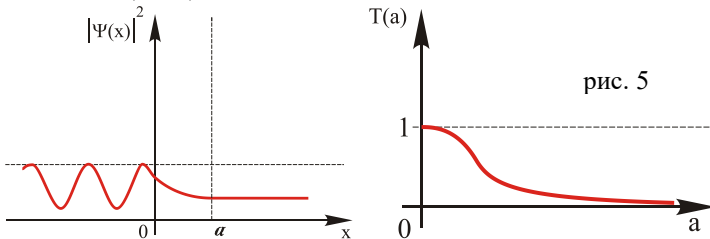


рис. 5

8.7. Волновая функция после прохождения потенциального барьера есть (см. задачу 8.6)

$$\psi(x) = \frac{\exp(-ika)}{1 - ika/2} \exp(ikx).$$

В отсутствие барьера мы бы имели $\psi(x) = \exp(ikx)$. Поэтому при прохождении барьера набирается дополнительная разность фаз Φ , которую можно определить из следующего соотношения

$$\frac{|B_{III}|}{|A_I|} \exp(i\Phi) = \frac{\exp(-\xi)}{1 - i\xi/2} = \exp\left(i \left[\arcsin \frac{\xi/2}{\sqrt{1 + \xi^2/4}} - \xi \right]\right), \quad \xi = ka.$$

Эта разность фаз может быть представлена в виде

$$\Phi = \arcsin \frac{\xi/2}{\sqrt{1 + \xi^2/4}} - \xi = (\Delta k)a = (\Delta p)a/\hbar,$$

где Δp - среднее изменение импульса частицы при прохождении через барьер по сравнению со случаем свободного движения. Тогда можно ввести время дополнительной задержки частицы в области существования

потенциального барьера $\tau = \frac{ma}{p + \Delta p} - \frac{ma}{p}$, где m, p - масса и импульс ча-

стицы.. В случае $\Delta p \ll p$ имеем $\tau \approx \frac{ma}{p} \cdot \frac{|\Delta p|}{p} \approx \frac{\hbar \Phi}{p^2/m}$.

$$8.8. j = \frac{\hbar \kappa}{mi} (B^* A - A^* B) = \frac{2\hbar \kappa}{m} \text{Im}(A^* B).$$

$$8.9. \text{Коэффициент прохождения есть } T = \frac{4}{2 + k_1/k_2 + k_2/k_1 + k_1 k_2 a^2},$$

где $k_1^2 = 2m(V_2 - V_1)/\hbar^2$, $k_2^2 = 2mV_2/\hbar^2$.

8.10.

8.11. Значение коэффициента прохождения оценим по формуле

$$D \approx \exp\left(-\frac{2}{\hbar} \int \sqrt{2m(V(x) - E)} dx\right),$$

где интеграл берется по области классически запрещенного движения. Для потенциала, изображенного на рисунке, имеем

$$D_1 \approx \exp\left(-\frac{2}{\hbar} \int_0^{a^*} \sqrt{2m(V_0 - E - V_0 x/a)} dx\right),$$

где $a^* = a \cdot (V_0 - E)/V_0$. Вычисление интеграла дает

$$D_1 \approx \exp\left(-\frac{4}{3\hbar} \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)^3} a}{V_0}\right).$$

Для симметричного потенциала, изображенного в тексте задачи, $D_2 \approx D_1^2$.

8.12. Используя результат, полученный в предыдущей задаче, выражение для прозрачности барьера запишем в виде

$$D = D_1 D_2,$$

где $D_1 \approx \exp\left(-\frac{4}{3\hbar} \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)^3} b}{V_0}\right)$,

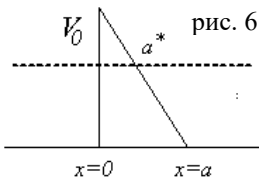


рис. 6

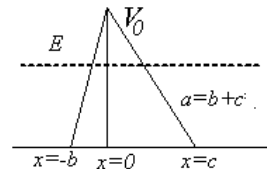


рис. 7

$$D_2 \approx \exp\left(-\frac{4}{3\hbar} \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)^3} c}{V_0}\right). \text{ Поэтому } D \approx \exp\left(-\frac{4}{3\hbar} \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)^3} a}{V_0}\right),$$

$$a = b + c.$$

8.13. Коэффициент прозрачности от положения вершины барьера не зависит.

8.14. Решение уравнения Шредингера слева и справа от барьера запишем в виде ($k^2 = 2mE/\hbar^2$):

$$\text{область } x < 0 \quad \psi_I(x) = A_I \exp(ik_1 x) + B_I \exp(-ik_1 x),$$

$$\text{область } x > 0 \quad \psi_{II}(x) = A_{II} \exp(ikx).$$

Условие непрерывности волновой функции в точке $x = 0$ дает

$$A_I + B_I = A_{II}.$$

Из условия скачка производной в точке $x = 0$ (см. решение задачи 7.20) $-\psi'(x = -0) + \psi'(x = +0) + 2V_0\psi(0) = 0$ имеем

$$A_I - B_I = A_{II} (1 - 2V_0/ik).$$

Из полученных соотношений находим

$$D = |A_{II}|^2 / |A_I|^2 = \frac{1}{1 + (V_0/k)^2}.$$

$$\mathbf{8.15.} \quad D = \frac{1}{1 + \left(\frac{k_0^2}{2kK}\right)^2 \sin^2 Ka},$$

где $k^2 = 2mE/\hbar^2$, $k_0^2 = 2mV_0/\hbar^2$, $K^2 = 2m(E - V_0)/\hbar^2$. Резонанс прозрачности возникает при выполнении условия $Ka = n\pi$, ($n = 1, 2, 3, \dots$) или

$$E = V_0 + \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} n^2.$$

8.16. Вероятность α - распада пропорциональна прозрачности кулоновского барьера, созданного ядром - остатком (см. рис.):

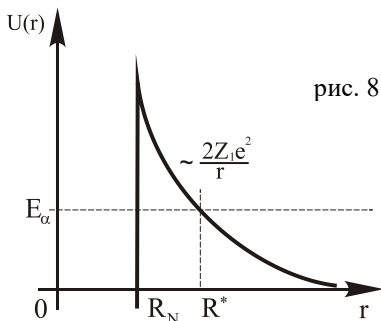


рис. 8

$$D \sim \exp \left(-\frac{2}{\hbar} \int_{R_N}^{R^*} \sqrt{2M_\alpha \left(\frac{2Z_1 e^2}{r} - E_\alpha \right)} dr \right), \quad (1)$$

где R_N - радиус атомного ядра, а R^* определяется из условия $2Z_1 e^2 / R^* = E_\alpha$. Делая замену переменных $\xi = r E_\alpha / 2Z_1 e^2$, перепишем выражение (1) в виде

$$D \sim \exp \left(-\frac{8Z_1 e^2}{\hbar \sqrt{2E_\alpha / M_\alpha}} \int_{\xi_N}^1 \sqrt{\frac{1}{\xi} - 1} d\xi \right),$$

где нижний предел интегрирования $\xi_N = R_N E_\alpha / 2Z_1 e^2 \ll 1$. Вычисляя интеграл с помощью подстановки $\xi = \sin^2 t$, получим

$$D \sim \exp \left(-\frac{4\pi Z_1 e^2}{\hbar \sqrt{2E_\alpha / M_\alpha}} \left(1 - \frac{4}{\pi} \sqrt{\xi_N} \right) \right), \text{ т.е. } \ln D \sim -E_\alpha^{-1/2}.$$

8.17. Указание. Оценить период полураспада, считая, что α -частица совершает внутри ядра колебательное движение и сталкивается с ограничивающим ядро потенциальным барьером с частотой $\nu \approx \nu_\alpha / R_N$, где $\nu_\alpha = \sqrt{2E_\alpha / M_\alpha}$ - скорость α -частицы, $R_N = 1.2 \cdot 10^{-13} \cdot \sqrt[3]{A}$ (см) - размер ядра, A - массовое число.

8.18. $j \sim \exp(-\varepsilon/E)$, $\varepsilon = \frac{4}{3} \cdot \frac{\sqrt{2mA^3}}{e\hbar}$, A - работа выхода.

8.19. Запишем решение уравнения Шредингера в каждой из областей непрерывности потенциала в виде

$$\begin{aligned}\psi_I &= A_I \sin kx, \\ \psi_{II} &= A_{II} \exp(-\kappa(x-a)) + B_{II} \exp(\kappa(x-a)), \\ \psi_{III} &= A_{III} \exp(ik(x-a-b)),\end{aligned}$$

где $k^2 = 2mE/\hbar^2$, $\kappa^2 = 2m(E-V_0)/\hbar^2$. «Сшивая» функцию и ее первую производную в точках разрыва потенциала $x = a$, $x = a+b$, получим

$$\begin{aligned}A_I \sin ka &= A_{II} + B_{II}, \\ A_I \cos ka &= \frac{\kappa}{k} (B_{II} - A_{II}), \\ A_{II} \exp(-\kappa b) + B_{II} \exp(\kappa b) &= A_{III}, \\ A_{II} \exp(-\kappa b) - B_{II} \exp(\kappa b) &= -\frac{ik}{\kappa} A_{III}.\end{aligned}\tag{1}$$

Из системы (1) получаем уравнение для определения уровня энергии

$$\frac{1 + ik/\kappa}{1 - ik/\kappa} \exp(-2\kappa b) = \frac{\operatorname{tg}(ka) + k/\kappa}{\operatorname{tg}(ka) - k/\kappa}.\tag{2}$$

Заметим, что при $b \rightarrow \infty$ прозрачность барьера стремится к нулю и уравнение (2) сводится к уравнению

$$\operatorname{tg}(ka) = -k/\kappa\tag{3}$$

для определения энергетических уровней в яме с одной бесконечно высокой потенциальной стенкой.

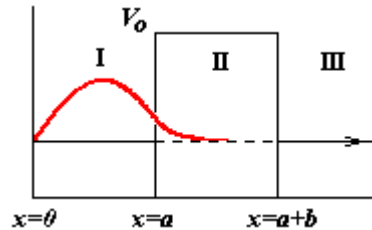
Приближенное решение уравнения (2) может быть представлено в виде $k = k_0 - ik'$, $k' \ll k_0$, k_0 - решение уравнения (3). Решение имеет вид

$$k'a \approx \frac{4(k_0/\kappa_0)^2}{(1 + (k_0/\kappa_0)^2)^2} \exp(-2\kappa b), \text{ где } \kappa_0^2 = 2mV_0/\hbar^2 - k_0^2.$$

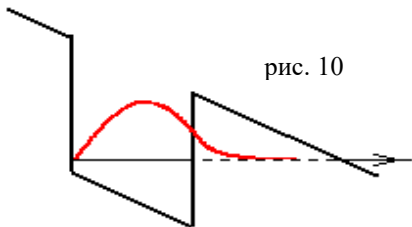
Для энергии получаем $E = E_0 - \frac{i}{2}\hbar\gamma$, $E_0 = \hbar^2 k_0^2/2m$ - энергия уровня в яме при нулевой прозрачности барьера. Для вероятности обнаружить частицу в яме имеем $W(t) \sim |\psi(x,t)|^2 \sim \exp(-\gamma t)$, т.е. в результате туннелирования происходит экспоненциальный распад связанного состояния. Величина γ есть

$$\gamma = \frac{\hbar k_0 / m}{2a} \frac{16k_0^2 \kappa_0^2}{(k_0^2 - \kappa_0^2)^2} \exp\left(-\frac{2}{\hbar} \sqrt{2m(V_0 - E)}b\right).$$

рис. 9



Полученное выражение можно переписать в виде $\gamma = \frac{v}{2a} D$, где $v = \hbar k_0/m$ - скорость частицы в яме, $v = v/2a$ - частота соударения со стенкой, D - коэффициент прозрачности барьера.



8.20. При наличии электрического поля потенциальная яма имеет вид, представленный на рис. Если электрическое поле является слабым, то в первом порядке теории возмущений положение энергетического уровня не меняется, и приближенно потенциал ионизации

$$\text{равен } I \approx V_0 - \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}.$$

На пути электрона из ямы имеем потенциальный барьер треугольной формы. Оценивая его прозрачность как

$$D \approx \exp\left(-\frac{2}{\hbar} \int_0^{x^*} \sqrt{2m(I - eEx)} dx\right), \quad x^* = I/eE,$$

получим $D \approx \exp(-\varepsilon/E)$, $\varepsilon = \frac{4}{3} \cdot \frac{\sqrt{2mI^3}}{e\hbar}$. Считая, что частота столкнове-

ния электрона со стенкой есть $\nu \approx v/2a$, $\nu = \sqrt{2 \frac{\pi^2 \hbar^2 / 2ma^2}{m}} = \frac{\pi\hbar}{ma}$, для

скорости туннелирования получим $W_0 \approx \frac{\pi\hbar}{2ma^2} \exp(-\varepsilon/E)$.

8.21. В переменном низкочастотном поле вероятность туннельной ионизации как функция времени есть (см. задачу 8.20)

$$W(t) \approx \frac{\pi\hbar}{2ma^2} \exp(-\varepsilon/|E_0 \sin \omega t|)$$

и достигает максимума дважды за период, когда $E = E_0$. Средняя по периоду колебаний поля скорость ионизации определяется как

$$\langle W \rangle = \frac{\omega}{\pi} \int_0^{\pi/\omega} W(t) dt = \frac{\hbar}{2ma^2} \int_0^{\pi} \exp\left(-\frac{\varepsilon}{E_0 \sin \xi}\right) d\xi. \quad (1)$$

Полагая, что поле является слабым, т.е. $E_0 \ll \varepsilon$, находим, что ионизация происходит лишь в узком временном интервале вблизи момента времени, когда электрическое поле достигает максимума ($\xi = \pi/2$). Поэтому вычис-

лим интеграл (1) методом перевала. Разлагая подинтегральную функцию в ряд вблизи точки максимума $\xi = \pi/2$, получим

$$\langle W \rangle \approx \frac{\hbar}{2ma^2} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{\varepsilon(1+\zeta^2/2)}{E_0}\right) d\zeta \approx$$

$$\frac{\hbar}{2ma^2} \exp(-\varepsilon/E_0) \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{\varepsilon}{2E_0} \zeta^2\right) d\zeta \approx \frac{\sqrt{2\pi\hbar}}{2ma^2} \sqrt{\frac{E_0}{\varepsilon}} \exp(-\varepsilon/E_0).$$

Как видно, $\frac{\langle W \rangle}{W_0} \approx \sqrt{E_0/\varepsilon} \ll 1$.

9. Движение в центрально симметричном потенциальном поле.

Задача Кеплера. Атом водорода.

9.1. Указание: представить волновую функцию системы в виде $\psi(\vec{r}) = R(r)Y_{\ell m}(\theta, \varphi)$ и получить уравнение для радиальной части волновой функции. Кратность вырождения уровня с заданным значением орбитального момента ℓ (без учета спина) - $2\ell + 1$.

9.2. $\psi_{n\ell m}(r, \theta, \varphi) = R_{n\ell}(r)Y_{\ell m}(\theta, \varphi)$.

9.3. $\psi(r, \theta, \varphi) = \Phi(r, \theta) \exp(im\varphi)$, $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ Такое состояние будет стационарным, если функция $\Phi(r, \theta)$ удовлетворяет стационарному уравнению Шредингера

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial r^2} \right) - \frac{\hbar^2}{2\mu r^2} \left(\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \frac{\partial \Phi}{\partial \theta} - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} \Phi \right) + V(|\vec{r}|)\Phi = E\Phi,$$

μ - масса частицы.

9.4. $\psi(r, \theta, \varphi) = R(r) \sum_m C_m Y_{\ell m}(\theta, \varphi)$; орбитальное квантовое число ℓ

задано. Такое состояние будет стационарным если функция $R(r)$ удовлетворяет радиальному уравнению Шредингера.

9.5. $E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mR^2} n^2$, $n = 1, 2, 3, \dots$, R - радиус ямы.

9.6. Поскольку нас интересуют только сферически симметричные состояния, запишем уравнение Шредингера в виде

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} (r\psi(r)) + V(r)\psi(r) = E\psi(r),$$

или, вводя новую функцию $u(r) = r\psi(r)$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u}{dr^2} + V(r)u = Eu. \quad (1)$$

Здесь $V(r) = \begin{cases} 0, & r < R, \\ V_0, & r \geq R. \end{cases}$

В качестве граничных условий выбираем $u(r=0) = 0$ и $u(r \rightarrow \infty) \rightarrow 0$. Записывая решение уравнения (1) в областях $r < R$ и $r > R$, из условия непрерывности волновой функции и ее первой производной получим уравнение для определения энергетического спектра системы

$$-k \cdot \text{ctg}(kR) = \sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2} - k^2}. \quad (2)$$

Здесь $k = \sqrt{2mE/\hbar^2}$. Уравнение (2) аналогично уравнению для определения уровней энергии нечетных состояний в одномерной яме ширины $2a$ (см. задачу 7.4).

9.7. Из решения предыдущей задачи получаем, что первое связанное состояние в яме появляется при выполнении условия

$$\frac{2mV_0R^2}{\hbar^2} \geq \pi^2/4.$$

Оценка из соотношения неопределенностей дает

$$\frac{2mV_0R^2}{\hbar^2} \geq 1,$$

что с точностью множителя порядка единицы совпадает с точным решением.

9.8. Указание. В уравнении Шредингера

$$-\frac{\hbar^2}{2m_1} \nabla_1^2 \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) - \frac{\hbar^2}{2m_2} \nabla_2^2 \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) + V(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|) \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = E \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$$

сделать замену переменных

$$\vec{R} = \frac{m_1 \vec{r}_1 + m_2 \vec{r}_2}{m_1 + m_2}, \quad \vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2.$$

9.9. Уравнение для волновой функции дейтрона $\psi(r) = u(r)/r$ запишем в виде

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2 u}{dr^2} + V(r)u = Eu,$$

$\mu \approx m_p/2$, m_p - масса протона. Аналогично задаче 9.6 получаем уравнение, связывающее положение энергетических уровней с параметрами потенциала в следующем виде:

$$-kR \cdot \text{ctg}(kR) = \sqrt{\frac{2\mu V_0 R^2}{\hbar^2} - (kR)^2}. \quad (1)$$

Учитывая, что энергия состояния $E = V_0 - E_b = \hbar^2 k^2 / 2\mu$, из уравнения (1) определяем глубину потенциальной ямы $V_0 \approx 40$ МэВ. Полученное значение хорошо совпадает с оценкой глубины ямы в 35 МэВ, обычно используемой в ядерной физике. Как видно, $E_b \ll V_0$, т.е. состояние дейтрона является слабосвязанным. Поэтому приближенно волновая функция дейтрона может быть записана в виде

$$\psi(r) \approx A \exp(-\kappa r)/r, \quad \kappa = \sqrt{2\mu E_b / \hbar^2} \approx 1.8 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-1}.$$

Вычисление среднего удаления дает

$$\langle r \rangle = \int_0^{\infty} r \exp(-2\kappa r) dr \bigg/ \int_0^{\infty} \exp(-2\kappa r) dr = 1/2\kappa \approx 2.7 \cdot 10^{-13} \text{ см.}$$

9.10. Уравнения Шредингера для s – состояний запишем в виде

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} (r\psi(r)) + \frac{m\omega^2 r^2}{2} \psi(r) = E\psi(r),$$

которое после замены $u(r) = r\psi(r)$ совпадает с одномерным уравнением для функции $u(r)$. Учитывая, что $u(r=0) = 0$, получаем, что наши решения – это нечетные состояния одномерного осцилляторного потенциала. Поэтому

$$E_n = \hbar\omega(2n+3/2), \quad \psi_n(r) = \frac{1}{r} N_{2n+1} H_{2n+1}(r/a) \exp(-r^2/2a^2).$$

Здесь $n = 0, 1, 2, \dots$, $a = \sqrt{\hbar/m\omega}$, N_{2n+1} – нормировочный коэффициент.

9.11. В декартовой системе координат проводим разделение переменных и получаем

$$\Psi_{n_x n_y n_z}(x, y, z) =$$

$$N_{n_x} N_{n_y} N_{n_z} H_{n_x}(x/a) H_{n_y}(y/a) H_{n_z}(z/a) \exp\left(-(x^2 + y^2 + z^2)/2a^2\right),$$

$$E_{n_x n_y n_z} = \hbar\omega(n_x + n_y + n_z + 3/2), \quad a = \sqrt{\hbar/m\omega}.$$

Квантовые числа $n_x, n_y, n_z = 0, 1, 2, \dots$ и имеют смысл числа квантов колебаний по различным осям.

9.12. Рассмотрим, например, случай а). Из общего решения задачи (см. решение задачи 9.11) видим, что в данном случае $n_x = n_y = 1$, $n_z = 0$. Поэтому имеем стационарное состояние с энергией $E = 7\hbar\omega/2$. Далее перепишем функцию в сферической системе координат

$$\psi(r, \theta, \varphi) = AR(r) \sin^2(\theta) \sin(\varphi) \cos(\varphi),$$

где $R(r) = r^2 \exp(-r^2/2a^2)$ – радиальная волновая функция. Угловую часть можно представить в виде суперпозиции сферических функция $Y_{2,2}(\theta, \varphi)$ и $Y_{2,-2}(\theta, \varphi)$. Поэтому для данного состояния $L^2 = 6\hbar^2$, $L_z = \pm 2\hbar$.

9.13. Квадрат момента $L^2 = 2\hbar^2$, проекция момента на ось z $L_z = \pm \hbar$. Вероятность обнаружить каждое из этих значений равна $1/2$.

9.14. Энергия состояния $E = -Ry/9$, квадрат орбитального момента $L^2 = 6\hbar^2$, z - проекция орбитального момента $L_z = -2\hbar$.

9.15. Искомая функция есть волновая функция $2p$ - состояния с магнитным квантовым числом равным $m=1$ или $m=-1$. Например, для $m=1$ имеем

$$\psi_{2,1,1}(\vec{r}) = A r \exp(-r/2a_0) \sin(\theta) \exp(i\varphi).$$

Здесь A - нормировочная константа, a_0 - боровский радиус. В этом состоянии среднее потенциальной энергии (по абсолютной величине) в четыре раза меньше, чем в основном состоянии

9.16. В заданном состоянии $\psi_{3,2,2}$ среднее значение кинетической энергии есть $\langle E_k \rangle = Ry/9$.

9.17. $E = -Ry/4$.

9.18. Максимальное значение орбитального квантового числа $\ell = 3$.

9.19. Возможные значения орбитального квантового числа $\ell = 0,1$.

9.20. $E = -Ry/9$.

9.21. Вероятность захвата пропорциональна вероятности обнаружить электрон внутри атомного ядра, т.е. величине $\int |\psi|^2 d^3r$, где интеграл берется по объему атомного ядра. Поскольку размер ядра много меньше области локализации атомных электронов вероятность захвата оказывается пропорциональна $|\psi(r=0)|^2$. При $r=0$ отличны от нуля значения волновых функций только s - электронов. Поэтому искомое отношение вероятностей есть $W = |\psi_{1s}(0)|^2 / |\psi_{2s}(0)|^2$. Пренебрегая экранирующим действием внутренних атомных электронов и, учитывая что

$$\psi_{ns}(0) = \sqrt{Z^3/n^3 \pi a^3},$$

Получим $W = |\psi_{1s}(0)|^2 / |\psi_{2s}(0)|^2 \approx 8$.

9.22. Среднее удаление электрона от ядра определяется как

$$\langle r \rangle = \int_0^\infty r^3 R_{1s}^2(r) dr,$$

Где радиальная волновая функция нормирована согласно условию $\int_0^\infty r^2 R_{1s}^2(r) dr = 1$. Вычисление интеграла дает $\langle r \rangle = \frac{3}{2} a_0$, a_0 - боровский радиус.

Наиболее вероятное удаление электрона от ядра определяем как условие максимума функции $r^2 R_{1s}^2(r)$, определяющей радиальное распределение плотности вероятности: $r^* = a_0$.

9.23. $\langle r \rangle = 3a_0/2Z$, $r^* = a_0/Z$.

9.24. Действуя, как и в задаче 9.22, находим

$$2s: \langle r \rangle = 6a_0, \quad r^* = (3 + \sqrt{5})a_0,$$

$$2p: \langle r \rangle = 5a_0, \quad r^* = 4a_0.$$

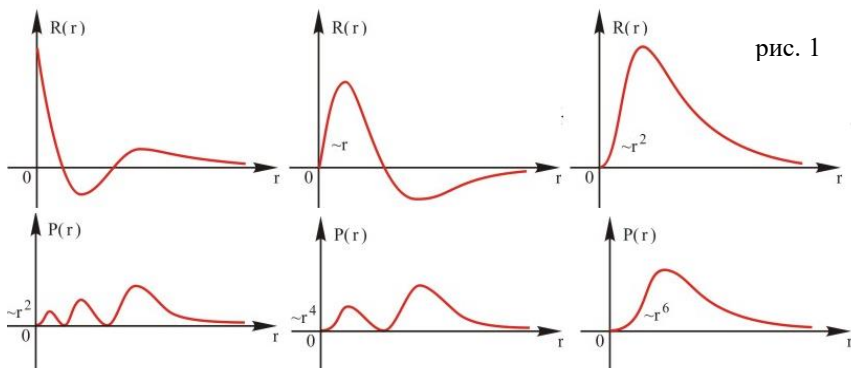
9.25. Вычисляя дисперсию как $D_r = \langle r \rangle^2 - \langle r^2 \rangle$ и используя решение предыдущей задачи, найдем

$$2s: \langle D_r \rangle = 6a_0^2, \quad 2p: \langle D_r \rangle = 5a_0^2.$$

9.26. $\langle E_k \rangle = Ry/9$, $\langle V \rangle = -2Ry/9$.

9.27. $\langle r \rangle = 21a_0/2$, $\langle 1/r \rangle = 1/9a_0$, $\langle r^2 \rangle = 126a_0^2$.

9.28. Для случая в), например, радиальные волновые функции $R_{nl}(r)$ и плотность вероятности ρ_{nl} представлены на рисунке.



9.29. $\langle r \rangle = a_0 n^2 (1 + 1/(2n))$, $r^* = n^2 a_0$.

9.30. Например, для случая а) $E = -Ry/4$ с вероятностью единица, а $L_z = \pm \hbar$ с вероятностью $1/2$.

9.31. Например, для состояния $1s$ все указанные величины равны нулю.

9.32. Указание. Искомая величина определяется как

$$P(r) = 4\pi \int_{a_0/Z}^{\infty} r^2 R_{1s}^2(r) dr, \text{ где радиальная волновая функция удовлетворяет}$$

$$\text{условию нормировки } \int_0^{\infty} r^2 R_{1s}^2(r) dr = 1.$$

9.33. Искомая величина определяется как $P(r) = 4\pi \int_0^{a_0/Z} r^2 R_{1s}^2(r) dr$. См.

также задачу 9.32.

9.34. $L_{\min}^2 = 20\hbar^2$, $\psi(r, \theta, \varphi) = \Phi(r, \theta) \exp(4i\varphi)$.

9.35. Соответствующие состояния есть $3p, 3s, 4s, 2p, 3d, 2s$.

9.36. Состояние $3d$.

9.37. Считая, что электрон создает в пространстве плотность заряда $\rho_{el}(r) = -e|\psi_{1s}|^2$, определим электростатический потенциал как решение уравнения Пуассона

$$\nabla^2 \varphi = 4\pi e(\delta(\vec{r}) - \rho_{el}(r)).$$

Решение имеет вид

$$\varphi(r) = \frac{e}{r} - \frac{e}{a_0} \exp(-2r/a_0)$$

9.38. Поскольку в рассматриваемом случае сохраняется аксиальная симметрия задачи, ищем решение уравнения

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi - \frac{e^2}{r} \psi + H \frac{e}{2mc} \hat{L}_z \psi = E\psi \quad (1)$$

(ось z направлена вдоль магнитного поля H) в виде

$$\psi(\vec{r}) = \Phi(r, \theta) \exp(im_\ell \varphi).$$

Подставляя это представление в (1), получим

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial^2 r\Phi}{\partial r^2} \right) - \frac{\hbar^2}{2mr^2} \left(\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \frac{\partial \Phi}{\partial \theta} - \frac{m_\ell^2}{\sin^2 \theta} \Phi \right) - \frac{e^2}{r} \Phi \\ = (E - \mu_B H m_\ell) \Phi. \end{aligned}$$

Здесь $\mu_B = e\hbar/2mc$ - магнетон Бора. Полученное уравнение эквивалентно уравнению Шредингера для функции $\Phi(r, \theta)$ в задаче Кеплера. Для энергий стационарных состояний имеем

$$E = -\frac{Ry}{n^2} + \mu_B H m_\ell.$$

Магнитное поле расщепляет уровень с заданным ℓ на $2\ell + 1$ подуровней.

10. Основы стационарной теории возмущений. Системы из многих частиц.

10.1. Точное решение задачи легко найти, если заметить, что **после** включения электрического поля потенциал будет определяться как

$$U(x) = m\omega^2 x^2/2 - eE_0 x = \frac{1}{2} m\omega^2 \left(x - eE_0/m\omega^2\right)^2 - \frac{e^2 E_0^2}{2m\omega^2}$$

и соответствовать осцилляторному потенциалу с той же частотой, но со смещенными точкой равновесия и уровнем отсчета энергии. Поэтому

$$E_n = \hbar\omega(n+1/2) - \frac{e^2 E_0^2}{2m\omega^2}, \quad n=0,1,2,\dots$$

Если решать задачу приближенно, рассматривая воздействие внешнего электрического поля как возмущение, т.е. $\hat{V} = -eE_0 x$, то поскольку $V_{nn} = eE_0 x_{nn} = 0$, проводим расчет во втором порядке теории возмущений:

$$\begin{aligned} \Delta E_n &= \sum_{k \neq n} \frac{|V_{kn}|^2}{E_n - E_k} = \frac{|V_{n-1n}|^2}{\hbar\omega} - \frac{|V_{n+1n}|^2}{\hbar\omega} = \frac{e^2 E_0^2}{\hbar\omega} (x_{n-1}^2 - x_{n+1}^2) = \\ &= \frac{e^2 E_0^2}{\hbar\omega} \frac{\hbar}{2m\omega} (n - (n+1)) = -\frac{e^2 E_0^2}{2m\omega^2}. \end{aligned}$$

10.2. Точное решение. Для разницы в энергии n -го уровня имеем

$$\Delta E_n = \hbar(\delta\omega)(n+1/2),$$

$$\text{где } \delta\omega = \omega - \omega_0 = \sqrt{(k + \delta k)/m} - \sqrt{k/m} \approx \frac{\delta k}{2m} = \omega_0 \frac{\delta k}{2k}.$$

$$\text{Окончательно } \Delta E_n = \hbar(\delta\omega)(n+1/2) = \hbar\omega_0 \frac{\delta k}{2k} (n+1/2).$$

При приближенном решении величину

$$V = \frac{m(\omega^2 - \omega_0^2)x^2}{2} = \frac{m\omega_0^2 x^2}{2} \frac{\delta k}{k}$$

следует рассматривать как малое возмущение. Вычисляя в первом порядке, найдем

$$\Delta E_n \approx V_{nn} = \frac{\delta k}{2k} \hbar\omega_0 (n+1/2).$$

10.3. $\Delta E_n = \alpha(x^4)_{nn} / 4$. Явное вычисление интегралов для случаев

$$n=0 \text{ и } n=1 \text{ дает } \Delta E_0 = \frac{3}{4} \alpha a^4, \quad \Delta E_1 = \frac{15}{4} \alpha a^4. \text{ Здесь } a^2 = \hbar/m\omega.$$

10.4. В первом порядке теории возмущений поправка к уровню энергии $\Delta E = V_{11} = \int_{-a/2}^{a/2} V(x)\psi_1^2(x)dx = -eE_0 \cdot \frac{2}{a} \int_{-a/2}^{a/2} x \cos^2 \frac{\pi x}{a} dx = 0$. Ненулевую

поправку можно получить во втором порядке теории возмущений:

$$\Delta E = \sum_{n=2}^{\infty} \frac{|V_{1n}|^2}{\varepsilon_1 - \varepsilon_n} \approx -\frac{|V_{12}|^2}{\varepsilon_2 - \varepsilon_1} = \frac{e^2 E_0^2 x_{12}^2}{\varepsilon_2 - \varepsilon_1}, \quad \varepsilon_2 - \varepsilon_1 = \frac{3\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}.$$

Поскольку

$$x_{12} = \frac{4}{a} \int_0^{a/2} x \cos \frac{\pi x}{a} \sin \frac{2\pi x}{a} dx = \frac{4a}{\pi^2} \int_0^{\pi/2} \xi \cos(\xi) \sin(2\xi) d\xi = \frac{16a}{9\pi^2},$$

$$\Delta E = -\frac{e^2 x_{12}^2}{\varepsilon_2 - \varepsilon_1} E_0^2 = -\frac{1}{2} \alpha E_0^2, \quad \alpha = \frac{2e^2 x_{12}^2}{\varepsilon_2 - \varepsilon_1} = \frac{2^{10}}{3^5} \frac{ma^4 e^2}{\hbar^2 \pi^6} \text{ - поляризуемость.}$$

С другой стороны, поправка первого порядка к волновой функции частицы есть

$$\Delta\psi_1(x) = \sum_{n=2}^{\infty} \frac{V_{1n}}{\varepsilon_1 - \varepsilon_n} \psi_n(x) \approx -\frac{V_{12}}{\varepsilon_2 - \varepsilon_1} \psi_2(x) = \frac{eE_0}{\varepsilon_2 - \varepsilon_1} x_{12} \psi_2(x).$$

Вычисление среднего значения дипольного момента дает

$$\langle d \rangle = e \langle x \rangle = e \int |\psi_1 + \Delta\psi_1|^2 x dx \approx 2e \int_{-a/2}^{a/2} \psi_1(x) \Delta\psi_1(x) x dx = 2x_{12}^2 \frac{e^2 E_0}{\varepsilon_2 - \varepsilon_1},$$

Как видно, $\langle d \rangle = \alpha E_0$, откуда для поляризуемости находим $\alpha = \frac{2e^2 x_{12}^2}{\varepsilon_2 - \varepsilon_1}$,

что совпадает с полученным выше выражением.

10.5. Потенциал, создаваемый ядром конечных размеров, есть:

$$U(r) = \begin{cases} -Ze^2/r, & r > R, \\ -Ze^2/2R \cdot (3 - r^2/R^2), & r \leq R \end{cases} \quad (\text{см. задачу 4.1})$$

и отличается от потенциала точечного заряда Ze только внутри атомного ядра. Поэтому поправка к энергии основного состояния $1s$ есть

$$\Delta E_{1s} = \int_{V_N} |\psi_{1s}(0)|^2 (U(r) + Ze^2/r) d^3r \approx |\psi_{1s}(0)|^2 4\pi \int_0^R (U(r) + Ze^2/r) r^2 dr. \quad (1)$$

Учитывая, что $|\psi_{1s}(0)|^2 = Z^3/\pi a_0^3$ (a_0 - боровский радиус), из (1) получим

$$\Delta E_{1s} \approx \frac{2}{5} \frac{Z^4 e^2}{a_0^3} R^2 = \frac{4}{5} Z^4 Ry (R/a_0)^2.$$

В сделанном нами приближении сдвигаются только s состояния.

10.6. Величина поправки к уровню $2s$ определяется аналогично задаче 10.5 и равна $\Delta E_{2s} \approx \Delta E_{1s}/8 = \frac{1}{10} Z^4 Ry (R/a_0)^2$. Для вычисления поправки к энергии $2p$ состояния необходимо учесть степень изменения электронной волновой функции в пределах атомного ядра

$$R_{2p}(r \ll R) \approx \sqrt{\frac{Z^3}{2a_0^3}} Zr / (\sqrt{3}a_0).$$

Вычисление поправки дает $\Delta E_{2p} \sim \frac{1}{100} Z^6 Ry (R/a_0)^4$. Имеем

$$\frac{\Delta E_{2p}}{\Delta E_{2s}} \sim \frac{1}{10} Z^2 (R/a_0)^2, \text{ т.е. поправка к энергии состояния с ненулевым}$$

моментом для $Z \sim 1$ крайне мала.

10.7. Поскольку $1s$ состояние водородного атома характеризуется определенной четностью, расчет необходимо проводить во втором порядке теории возмущений (ось z направим вдоль вектора электрического поля):

$$\Delta E_{1s} = e^2 E_0^2 \sum_n \frac{|z_{1s,np}|^2}{E_{1s} - E_{np}}.$$

Полагая, что основной вклад в сумму вносит слагаемое с уровнем $2p$, получим

$$\Delta E_{1s} = -e^2 E_0^2 \frac{4|z_{1s,2p}|^2}{3Ry} = -\frac{2^{18}}{3^{11}} a_0^3 E_0^2 = -\frac{1}{2} \alpha E_0^2,$$

откуда для поляризуемости приближенно находим $\alpha = \frac{2^{19}}{3^{11}} a_0^3 \approx 3a_0^3$. Точ-

ный расчет дает $\alpha = 4.5a_0^3$.

10.8. Волновая функция основного состояния атома гелия в нулевом приближении (без учета межэлектронного взаимодействия) есть $\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \psi_{1s}(\vec{r}_1)\psi_{1s}(\vec{r}_2)$, где

$$\psi_{1s}(r) = \sqrt{Z^3/\pi a_0^3} \exp(-Zr/a_0).$$

Поправка к энергии основного состояния, обусловленная кулоновским взаимодействием электронов, вычисляется как

$$\Delta E_{1s} = \int \frac{e^2 |\psi_{1s}(\vec{r}_1)|^2 |\psi_{1s}(\vec{r}_2)|^2 d^3 r_1 d^3 r_2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}.$$

Вычисление этого интеграла проводится следующим образом. При вычислении интеграла по углам (θ_2, φ_2) второго электрона направим ось z вдоль вектора \vec{r}_1 . Поэтому

$$I_2 = \int \frac{d\Omega_2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} = 2\pi \int \frac{\sin \theta_2 d\theta_2}{\sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1 r_2 \cos \theta_2}} = 2\pi \int_{-1}^1 \frac{dx}{\sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1 r_2 x}}$$

$$= -\frac{2\pi}{r_1 r_2} \left(|r_1 - r_2| - (r_1 + r_2) \right) = \begin{cases} 4\pi/r_1, & r_1 > r_2, \\ 4\pi/r_2, & r_2 > r_1. \end{cases}$$

Интегрирование по углам первого электрона (θ_1, φ_1) сводится теперь к умножению на 4π . Наконец, вычисление радиального интеграла

$$\Delta E = \frac{Z^6 e^2}{\pi^2 a_0^6} \int r_1^2 dr_1 r_2^2 dr_2 \exp\left(\frac{-2Z(r_1 + r_2)}{a_0}\right) \cdot 16\pi^2 \begin{cases} 1/r_1, & r_1 > r_2 \\ 1/r_2, & r_2 > r_1 \end{cases}$$

даст
$$\Delta E_{1s} = \frac{5}{4} ZRy,$$

поэтому энергия основного состояния гелиеподобного иона есть

$$E = -2Z^2 Ry + \frac{5}{4} ZRy = -2Z^2 \left(1 - \frac{5}{8Z}\right) Ry.$$

Для энергии удаления первого электрона (потенциала ионизации) имеем

$$I = -E + Z^2 Ry = Z^2 Ry - \frac{5}{4} ZRy = Z^2 \left(1 - \frac{5}{4Z}\right) Ry.$$

В частности, при $Z = 2$ (атом He) $I = 1.5Ry \approx 20.4$ эВ,

$$Z = 3 \text{ (ион Li}^+) \quad I = \frac{63}{12} Ry \approx 71.4 \text{ эВ.}$$

Экспериментально измеренные значения есть 24.59 и 75.64 эВ соответственно. Заметим, что для $Z = 1$, получаем $I < 0$, т.е. в рамках рассматриваемого подхода отрицательный ион водорода существовать не должен.

10.9. Считем, что электростатический потенциал, создаваемый каждым из электронов в атоме гелия, есть

$$\varphi_e(\vec{r}) = \int \frac{\rho(\vec{r}_1)}{|\vec{r} - \vec{r}_1|} d^3 r_1,$$

где $\rho(r) = -e|\psi_{1s}(\vec{r})|^2$ - плотность заряда, создаваемая в пространстве каждым из электронов. Поэтому самосогласованный потенциал, в котором движется каждый их электронов, имеет вид

$$V_{eff}(r) = -\frac{Ze^2}{r} + e\varphi_e(\vec{r})$$

а уравнения самосопряженного поля записываются в виде

$$(\hat{T} + V_{\text{eff}}(\vec{r}))\psi_{1s} = E_{1s}\psi_{1s}.$$

10.10.

10.11. Из формулы тонкой структуры для величины расщепления уровней с различными значениями j , соответствующими одним и тем же значениям n, ℓ , получим:

$$\Delta E_{n\ell}(j+1/2, j+1/2) = \frac{\alpha^2 Ry}{n^3 \ell(\ell+1)},$$

где $\alpha = e^2/\hbar c$ - постоянная тонкой структуры. Поэтому для отношения расщеплений $4p$ и $4f$ уровней имеем

$$\frac{\Delta E(4p)}{\Delta E(4f)} = 6.$$

10.12. $\frac{\Delta E(2p)}{\Delta E(3p)} = 27/8.$

10.13. В шкале длин волн $\Delta\lambda = hc \frac{\Delta E}{E^2}$; $E = \frac{3}{4} Z^2 \cdot Ry$ - энергия

$2p \rightarrow 1s$ перехода, $\Delta E = Ry \frac{\alpha^2 Z^4}{16}$ - тонкое расщепление $2p$ -уровня. Та-

ким образом получаем: $\Delta\lambda = \alpha^2/9R = 0.74 \text{ \AA}$ - не зависит от заряда ядра Z , R - постоянная Ридберга, α - постоянная тонкой структуры.

10.14. Боровский радиус мюонного атома водорода есть $a_\mu = \hbar^2/m_\mu e^2 \cong a_0/207 \approx 2.5 \cdot 10^{-11}$ см. Поэтому в тяжелой ($Z \gg 1$) системе мюон оказывается локализован преимущественно внутри атомного ядра. В приближении равномерного распределения плотности заряда по атомному ядру имеем внутри ядра осцилляторный потенциал (см. задачу 10.5)

$$U(r) = \begin{cases} -Ze^2/r, & r > R, \\ -Ze^2/2R \cdot (3 - r^2/R^2), & r \leq R. \end{cases}$$

Приближенно считая волновую функцию соответствующей основному состоянию в осцилляторном потенциале с частотой $\Omega^2 = Ze^2/(m_\mu R^3)$, для потенциала ионизации получим

$$I = \frac{3Ze^2}{2R} - \frac{3}{2} \hbar \Omega = \frac{3Ze^2}{2R} \left(1 - \sqrt{\frac{a_\mu}{ZR}} \right).$$

Подставляя численные значения, получим $I \approx 10$ МэВ.

10.15. Рассуждая также как в задаче 10.14, получим

$$I = \frac{3Ze^2}{2R_0} - \frac{3}{2} \hbar\Omega = \frac{3Ze^2}{2R_0} \left(1 - \sqrt{\frac{a_0}{ZR_0}} \right) \approx \frac{3}{2} ZRy \left(1 - 1/\sqrt{2Z} \right) \approx \frac{3}{2} ZRy.$$

При $Z \gg 1$ эта величина существенно меньше, чем $Z^2 Ry$ - потенциал ионизации водородоподобного иона.

10.16. Переходя в систему отсчета, связанную с центром масс, введем

$$X = (x_1 + x_2)/2, \quad x = x_1 - x_2.$$

Тогда гамильтониан системы имеет вид

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{\partial^2}{\partial X^2} - \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{M\omega^2 X^2}{2} + \frac{\mu\omega^2 x^2}{2} + \alpha x^2,$$

где $\mu = m/2$, $M = 2m$ - приведенная и полная масса системы соответственно. В новой системе координат имеем два независимых осциллятора, частоты которых есть

$$\Omega_{1,2} = \begin{cases} \omega, \\ \omega\sqrt{1+2\alpha/\mu\omega^2}. \end{cases}$$

Уровни энергии и волновые функции стационарных состояний есть

$$E_{N,n} = \hbar\Omega_1(N+1/2) + \hbar\Omega_2(n+1/2) = \hbar\omega(N+1/2) + \hbar\omega\sqrt{1+2\alpha/\mu\omega^2}(n+1/2),$$

$$\psi_{N,n}(X, x) = N_N N_n H_N(X/A) H_n(x/a) \exp\left(-\frac{X^2}{2A^2} - \frac{x^2}{2a^2}\right),$$

Здесь $A = \sqrt{\hbar/M\Omega_1}$, $a = \sqrt{\hbar/\mu\Omega_2}$, $n, N = 0, 1, 2, \dots$

В частности, для основного состояния при $\alpha/\mu\omega^2 \ll 1$ получим

$$E_{0,0} = (\hbar\Omega_1 + \hbar\Omega_2)/2 = \hbar\omega(1 + \sqrt{1+2\alpha/m\omega^2})/2 \approx \hbar\omega(1 + \alpha/2\mu\omega^2). \quad (1)$$

10.17. Функцию нулевого приближения основного состояния запишем в виде $\Phi_{0,0}(x_1, x_2) = \frac{1}{b\sqrt{\pi}} \exp\left(-\frac{x_1^2 + x_2^2}{2b^2}\right)$, $b^2 = \hbar/m\omega$. Поправку к

энергии основного состояния найдем так

$$\begin{aligned} \Delta E &= \int \Phi_{0,0}^2(x_1, x_2) \alpha(x_1 - x_2)^2 dx_1 dx_2 = \\ &= \frac{\alpha b^2}{\pi} \int \exp\left(-\xi_1^2 - \xi_2^2\right) (\xi_1 - \xi_2)^2 d\xi_1 d\xi_2 = \frac{\alpha b^2}{4}, \end{aligned}$$

что совпадает с (1) при $\alpha/m\omega^2 \ll 1$. Для функции основного состояния получим

$$\Phi_{0,0}(x_1, x_2) = \frac{1}{b\sqrt{\pi}} \exp\left(-\frac{x_1^2 + x_2^2}{2b^2}\right) \cdot \left(1 - \frac{\alpha}{\hbar\omega}(x_1 - x_2)^2 + \frac{\alpha b^2}{\hbar\omega}\right).$$

10.18. В приближении самосогласованного поля уравнение для волновой функции основного состояния каждой из частиц имеет вид

$$\left[\hat{H}_1(x_1) + \int V(x_1, x_2) |\psi_0(x_2)|^2 dx_2 \right] \psi_0(x_1) = E \psi_0(x_1).$$

Нетрудно видеть, что этому уравнению удовлетворяет функция в виде гауссова волнового пакета, а потенциал остается гармоническим с частотой $\omega_H = \omega\sqrt{1 + \alpha/m\omega^2}$

$$\psi_0(x) = \frac{1}{\sqrt{a_H} \sqrt{\pi}} \exp\left(-x^2/2a_H^2\right), \quad \text{где } a_H^2 = \frac{\hbar}{m\omega_H}.$$

Поэтому в приближении Хартри $\Phi_{0,0}(x_1, x_2) = \frac{1}{a_H \sqrt{\pi}} \exp\left(-\frac{x_1^2 + x_2^2}{2a_H^2}\right)$,

энергия этого состояния $E_{0,0} = \hbar\omega\sqrt{1 + \alpha/m\omega^2}$.

10.19. Поскольку полагается, что β -распад происходит мгновенно, волновая функция электрона ($1s$ состояние атома водорода) не успевает измениться и является в начальный момент времени состоянием электрона в водородоподобном ионе гелия. Это состояние уже не является стационарным и может быть представлено в виде суперпозиции стационарных состояний системы He^+ :

$$\psi_{1s}^{(H)}(\vec{r}) = \sum C_{n\ell} \psi_{n\ell}^{(He)}(\vec{r}),$$

здесь коэффициенты $C_{n\ell}$ определяют амплитуды вероятностей обнаружить систему в состоянии $n\ell$ и определяются как

$$C_{n\ell} = \int \left(\psi_{n\ell}^{(He)}(\vec{r}) \right)^* \psi_{1s}^{(H)}(\vec{r}) d^3r.$$

В частности для вероятности обнаружить ион He^+ в основном состоянии получим

$$W_{1s} = |C_{1s}|^2 = \left| \int \psi_{1s}^{(He)}(r) \psi_{1s}^{(H)}(r) d^3r \right| \approx 0.7.$$

10.20. Начальное состояние частицы в осцилляторе характеризуется

функцией $\psi_0(x) = \frac{1}{\sqrt{a}\sqrt{\pi}} \exp\left(-\frac{x^2}{2a^2}\right)$, $a^2 = \hbar/m\omega$. После внешнего воз-

действия состояние частицы есть $\psi(x) = \exp(ip_0x/\hbar)\psi_0(x)$. Это состояние

является нестационарным и может быть представлено в виде суперпозиции стационарных состояний осциллятора $\psi_n(x)$:

$$\psi(x) = \sum C_n \psi_n(x).$$

Вычисление коэффициентов разложения C_n дает

$$C_n = \int \psi_n^*(x) \psi(x) dx = \frac{1}{\sqrt{2^n n! \pi}} \int H_n(\xi) \exp(-\xi^2) \exp\left(i \frac{p_0 a}{\hbar} \xi\right) d\xi.$$

Используя $H_n(\xi) = (-1)^n \exp(\xi^2) \frac{d^n}{d\xi^n} \exp(-\xi^2)$, получим

$$C_n = \frac{(-1)^n}{\sqrt{2^n n! \pi}} \int \exp\left(i \frac{p_0 a}{\hbar} \xi\right) \frac{d^n}{d\xi^n} \exp(-\xi^2) d\xi.$$

После n - кратного интегрирования по частям получаем:

$$C_n = \frac{(-i)^n \sqrt{(p_0 a / 2\hbar)^n}}{\sqrt{n! \pi}} \int \exp\left(-\xi^2 + i \frac{p_0 a}{\hbar} \xi\right) d\xi,$$

откуда

$$C_n = \frac{(-i)^n \sqrt{(p_0 a / 2\hbar)^n}}{\sqrt{n!}} \exp\left(- (p_0 a / 2\hbar)^2\right),$$

или $W_n = |C_n|^2 = \frac{\bar{n}^n}{n!} \exp(-\bar{n})$ - распределение Пуассона с параметром

$\bar{n} = \frac{p_0^2 a^2}{2\hbar^2}$. Этот параметр имеет смысл среднего числа квантов в заданном состоянии. В частном случае $n = 0$ имеем

$$W_0 = |C_0|^2 = \exp(-p_0^2 a^2 / 2\hbar^2).$$

Рассмотренное состояние представляет собой так называемое когерентное состояние осциллятора.

10.21. На все, кроме заданного.

10.22. Двухэлектронные волновые функции, обладающие определенной симметрией относительно перестановки электронов, имеют вид (начало координат в центре потенциальной ямы):

$$\psi_{\pm}(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_1(x_1)\psi_2(x_2) \pm \psi_1(x_2)\psi_2(x_1)],$$

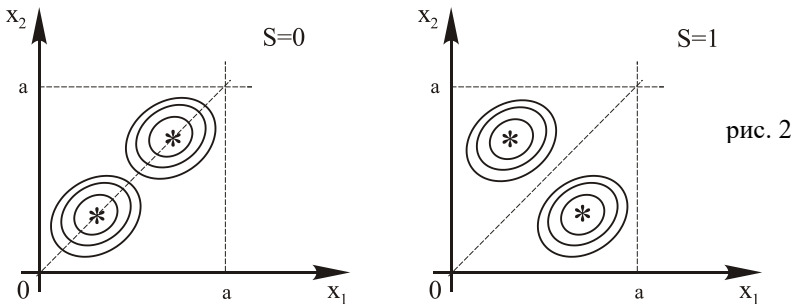
где $\psi_1(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \cos \frac{\pi x}{a}$, $\psi_2(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{2\pi x}{a}$, знак «+» соответствует синглетному состоянию ($S = 0$), а знак «-» - триплетному ($S = 1$). Места

наиболее вероятного расположения электронов определяются максимумом функции $|\Psi_{\pm}(x_1, x_2)|^2$. Эти максимумы находятся вблизи точек:

$$x_1 = x_2 \approx \pm a/4 \text{ для случая } S = 0 \text{ и}$$

$$x_1 = a/4, x_2 \approx -a/4 \text{ и } x_1 = a/4, x_2 \approx a/4 \text{ для случая } S = 1.$$

Линии равной плотности вероятности $|\Psi_{\pm}(x_1, x_2)|^2$ приведены на рис. 2.



Пространственное распределение плотности заряда определяется так

$$\rho(x) = e \int |\Psi_{\pm}(x_1, x_2)|^2 dx_2 = \frac{e}{2} (|\Psi_1(x)|^2 + |\Psi_2(x)|^2).$$

Распределение плотности заряда в синглетном и триплетном состояниях одинаковы.

10.23. Средний квадрат расстояния между электронами определим как

$$\langle (x_1 - x_2)^2 \rangle = \int |\Psi_{\pm}(x_1, x_2)|^2 (x_1 - x_2)^2 dx_1 dx_2 = \langle x^2 \rangle_1 + \langle x^2 \rangle_2 \mp 2 \langle x \rangle_{12}^2,$$

где

$$\langle x^2 \rangle_1 = \int \Psi_1^2(x) x^2 dx = \frac{a^2}{12} (1 - 6/\pi^2), \quad \langle x^2 \rangle_2 = \int \Psi_2^2(x) x^2 dx = \frac{a^2}{12} (1 - 3/2\pi^2),$$

$$\langle x \rangle_{12} = \int \Psi_1(x) \Psi_2(x) x dx = \frac{16a}{9\pi^2}.$$

$$\text{В результате } \langle (x_1 - x_2)^2 \rangle = \frac{a^2}{6} \left(1 - \frac{15}{4\pi^2} \mp \frac{1024}{27\pi^4} \right) \approx \begin{cases} 0.038a^2, & S = 0, \\ 0.168a^2, & S = 1. \end{cases}$$

В синглетном состоянии электроны находятся ближе друг к другу.

10.24. Указание. Двухэлектронную волновую функцию запишем в виде

$$\begin{aligned} \Psi_{\pm}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) &= \frac{1}{\sqrt{2}} [\Psi_{1s}(\vec{r}_1)\Psi_{2p}(\vec{r}_2) \pm \Psi_{1s}(\vec{r}_2)\Psi_{2p}(\vec{r}_1)] = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} [R_{10}(r_1)\Psi_{R_{21}}(r_2)Y_{10}(\theta_2, \varphi_2) \pm R_{10}(r_2)R_{21}(r_1)Y_{10}(\theta_1, \varphi_1)], \end{aligned}$$

причем знак «+» соответствует синглетному, а знак «-» - триплетному состояниям. При вычислении величины $\langle 1/|\vec{r}_1 - \vec{r}_2| \rangle$ получим

$$\langle 1/|\vec{r}_1 - \vec{r}_2| \rangle = C \pm A,$$

$$\text{где } C = \int \frac{|\Psi_{1s}(\vec{r}_1)|^2 |\Psi_{2p}(\vec{r}_2)|^2 d^3r_1 d^2r_2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|},$$

$$A = \int \frac{\Psi_{1s}(\vec{r}_1)\Psi_{1s}(\vec{r}_2)\Psi_{2p}(\vec{r}_1)\Psi_{2p}(\vec{r}_2)d^3r_1 d^2r_2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} - \text{кулоновский и обменный}$$

интегралы соответственно. Используя разложение $\langle 1/|\vec{r}_1 - \vec{r}_2| \rangle$ по сферическим функциям (см. Приложение), интегралы по угловым переменным легко вычислить. В результате для интегралов C и A получим

$$C = \int R_{10}^2(r_1)R_{21}^2(r_2)r_1^2 dr_1 r_2^2 dr_2 \begin{cases} (4\pi)^{3/2}/r_1, & r_1 > r_2, \\ (4\pi)^{3/2}/r_2, & r_2 > r_1, \end{cases}$$

$$A = \int R_{10}(r_1)R_{10}(r_2)R_{21}(r_1)R_{21}(r_2)r_1^2 dr_1 r_2^2 dr_2 \begin{cases} 4\pi r_2 / (3r_1^2), & r_1 > r_2, \\ 4\pi r_1 / (3r_2^2), & r_2 > r_1. \end{cases}$$

Как видно, в триплетном состоянии величина $\langle 1/|\vec{r}_1 - \vec{r}_2| \rangle$ оказывается меньше, т.е. в триплетном состоянии электроны находятся дальше друг от друга, чем в синглетном.

10.25. Энергия основного состояния $E = 18\hbar\omega$. При добавлении девятой частиц энергия увеличится на $7\hbar\omega/2$.

10.26. Рассмотрим прямоугольную потенциальную яму размерами $L \times L \times L$ (макроскопических размеров), так что спектр состояний электронов можно приближенно считать сплошным. Поскольку электроны являются фермионами, они заполняют состояния в яме с энергией вплоть до некоторого максимального значения. В соответствии с решением задачи (7.26) число электронов dN в интервале энергий от E до $E + dE$ есть

$$dN = \frac{L^3 \sqrt{2m^3 E}}{\pi^2 \hbar^3} dE. \quad (1)$$

Интегрируя (1), получим, что максимальная энергия электронов (энергия Ферми) есть

$$E_F = \frac{\hbar^2}{2m} (3\pi^2 N/V)^{2/3},$$

$V = L^3$ - объем, занимаемый электронным газом, $n_e = N/V$ - плотность электронного газа. Численная оценка дает $E_F \approx 7$ эВ.

Среднюю по распределению энергию вычисляем так

$$\bar{E}_k = \int_0^{E_F} E(dN/dE)dE = \frac{3}{5} E_F.$$

Качественно задачу можно решить так. Полагая, что на каждый электрон приходится объем L^3/N , из соотношения неопределенностей $\Delta p \Delta x \sim \Delta p L/N^{1/3} \sim \hbar$ найдем характерное значения импульса электронов

$$p \sim \Delta p \sim \frac{\hbar}{L} N^{1/3},$$

откуда $\bar{E} \sim \frac{p^2}{2m} \sim \frac{\hbar^2}{2m} (N/V)^{2/3}$.

10.27. Давление $p_e = \frac{2}{3} \bar{E}_k n_e$, где \bar{E}_k - средняя кинетическая энергия

электронов. Поэтому $p_e = \frac{2}{5} \bar{E}_k n_e = \frac{\hbar^2}{2m} (3\pi^2)^{2/3} n_e^{5/3} \sim 10^5$ атм.

10.28. Газ является идеальным, если средняя кинетическая энергия его частиц много больше их потенциальной энергии взаимодействия. Поскольку $\bar{E}_k \sim n_e^{2/3}$, а потенциальная энергия кулоновского взаимодействия $\bar{U} \approx e^2 n_e^{1/3}$, с ростом концентрации величина $\bar{E}_k/\bar{U} \sim n_e^{1/3}$ возрастает, то есть газ становится все более идеальным.

10.29. Условие равновесия системы заключается в том, что градиент давления вырожденного электронного газа уравнивается кулоновской силой, действующей на единицу атомного объема со стороны ядра:

$$\nabla p_e = (en_e)E,$$

здесь en_e - плотность электрического заряда в атоме, E - электрическое поле, создаваемое ядром. Оценивая $\nabla p_e \sim p_e/R$, $n_e \sim Z/R^3$, $E \sim Ze/R^2$ (R - атомный размер) и используя результат решения задачи (10.27), получим

$$R \sim \frac{\hbar^2}{me^2} Z^{-1/3}.$$

С увеличением заряда ядра и числа атомных электронов атом становится меньше.

10.30. Градиент электронного давления оценим также как в задаче 10.29. Плотность объемной гравитационной силы, обеспечивающей сжатие звезды, есть $G \frac{M}{R^2} \rho$ (G - гравитационная постоянная, M, R - масса звезды и ее радиус, $\rho \sim M/R^3$ - плотность). Учитывая также, что концентрация электронов есть $n_e = \rho/m_p$ (m_p - масса протона), для радиуса белого карлика получим $R \sim \frac{\hbar^2}{Gmm_p^{5/3}} \cdot M^{-1/3} \sim 10^9$ см.

$$10.31. R \sim \frac{\hbar^2}{Gm_p^{8/3}} \cdot M^{-1/3} \sim 10^6 \text{ см. } 2$$

10.32. Равновесие в белом карлике и нейтронной звезде достигается, в конечном счете, в результате того, что по мере гравитационного сжатия давление вырожденного ферми газа возрастает быстрее, чем сжимающая сила. По мере увеличения массы объекта его плотность возрастает, что приведет к тому, что ферми-газ нуклонов станет релятивистским. В этом случае энергию Ферми можно оценить так $E_F \sim pc \sim \hbar cn^{1/3}$ (n - концентрация частиц), а давление релятивистского ферми газа $p \sim \hbar cn^{4/3}$. Условие гравитационного коллапса запишем в виде:

$$\frac{\hbar cn^{4/3}}{R} < G \frac{M}{R^2} \rho,$$

откуда $M > M^* \sim (\hbar c/G)^{3/2} / m_p^2 \sim 3 \cdot 10^{33}$ г.

11. Нестационарное уравнение Шредингера.

$$11.1. \psi(x, t) = \psi_1(x) \exp(-iE_1 t/\hbar), \text{ где } E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}, \psi_1(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \cos \frac{\pi x}{a}$$

(точка $x = 0$ находится посередине ямы).

$$11.2. \psi(x, t) = \psi_1(x) \exp(-iE_1 t/\hbar), \text{ где } E_1 \text{ определяется как первый корень уравнения } ka \times \text{tg}(ka/2) = \sqrt{\frac{2mV_0 a^2}{\hbar^2} - (ka)^2} \text{ (см. задачу 7.4).}$$

$$11.3. \psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{a\sqrt{\pi}}} \exp\left(-x^2/2a^2\right) \exp(-i\omega t/2), \quad a = \sqrt{\hbar/m\omega}.$$

11.4. Указание. Для доказательства утверждения продифференцировать по времени

$$\langle p_x(t) \rangle = \int \psi^*(x, t) \hat{p}_x \psi(x, t) dx$$

и воспользоваться тем, что функция $\psi(x, t)$ удовлетворяет нестационарному уравнению Шредингера.

11.5. Указание. Продифференцировать по времени

$$\langle x(t) \rangle = \int \psi^*(x, t) x \psi(x, t) dx$$

и воспользоваться тем, что функция $\psi(x, t)$ удовлетворяет нестационарному уравнению Шредингера.

$$11.6. \text{ На основании теоремы Эренфеста } \langle p(t) \rangle = p_0 + \frac{F_0}{m} t. \text{ Поэтому,}$$

$$\text{используя результат задачи (11.5), получим } \langle x(t) \rangle = x_0 + \frac{p_0}{m} t + \frac{1}{2} \frac{F_0}{m} t^2.$$

11.7. Указание. Воспользоваться теоремой Эренфеста.

11.8. После включения электрического поля потенциал будет определяться как

$$U(x) = m\omega^2 x^2/2 - eE_0 x = \frac{1}{2} m\omega^2 \left(x - eE_0/m\omega^2\right)^2 - \frac{e^2 E_0^2}{2m\omega^2}.$$

и соответствовать осцилляторному потенциалу с той же частотой, но со смещенными точкой равновесия и уровнем отсчета энергии (см. задачу 10.1). Поэтому после включения электрического поля частица оказалась смещенной на величину $a_e = eE_0/m\omega^2$ от положения равновесия. Используя решение предыдущей задачи, имеем

$$\langle x(t) \rangle = -\frac{eE_0}{m\omega^2} (1 - \cos \omega t).$$

11.9. $\langle x(t) \rangle = x_0 + \frac{\hbar k_0}{m} t + \frac{eE_0 t^2}{2m} .$

11.10. $\rho(x, t) = \frac{1}{2} (\varphi_0^2(x) + \varphi_1^2(x)) + \varphi_0(x)\varphi_1(x) \cos(\omega t) ,$

$$\langle x(t) \rangle = \frac{a}{\sqrt{2}} \cos(\omega t), \quad D_x = a^2 \left(1 - \frac{1}{2} \cos^2 \omega t \right), \quad a = \sqrt{\hbar/m\omega} .$$

11.11. $\rho(x, t) = \frac{1}{2} (\varphi_0^2(x) + \varphi_2^2(x)) + \varphi_0(x)\varphi_2(x) \cos(2\omega t) ,$

$$\langle x(t) \rangle = 0, \quad D_x = a^2 \left(\frac{3}{2} - \frac{1}{\sqrt{2}} \cos(2\omega t) \right), \quad a = \sqrt{\hbar/m\omega} .$$

11.12. Заданное состояние является суперпозицией основного и нижнего возбужденного состояний осциллятора. Поэтому решение задачи аналогично случаю, рассмотренному в задаче 11.10.

11.13. Указание. Заданную волновую функцию можно представить в виде

$$\Phi(x) = \sqrt{\frac{4}{5}} \Psi_1(x) + \sqrt{\frac{1}{5}} \Psi_2(x) ,$$

где $\Psi_1(x)$ и $\Psi_2(x)$ - волновые функции двух нижних стационарных состояний частицы в яме. Вычисление среднего значения координаты $\langle x \rangle$ следует провести для состояния

$$\Phi(x, t) = \sqrt{\frac{4}{5}} \Psi_1(x) \exp(-iE_1 t/\hbar) + \sqrt{\frac{1}{5}} \Psi_2(x) \exp(-iE_2 t/\hbar) ,$$

где E_1 и E_2 - энергии соответствующих состояний.

11.14. $\langle x(t) \rangle = 0, \quad \langle E(t) \rangle = \frac{41}{18} \hbar\omega$ - от времени не зависит.

11.15.

11.16.

11.17.

11.18. $\omega = (E_2 - E_1)/\hbar, (E_3 - E_2)/\hbar .$

Например, волновая функция имеет вид

$$\Psi(x, t) = \alpha \Psi_1(x) \exp(-iE_1 t/\hbar) + \beta \Psi_2(x) \exp(-iE_2 t/\hbar), \quad |\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1 .$$

11.19.

11.20.

11.21.

11.22. Общее решение нестационарного уравнения Шредингера может быть записано в виде

$$\psi(x, t) = \sum_n C_n \psi_n(x) \exp(-i\omega(n+1/2)t),$$

где коэффициенты разложения C_n определяются по волновой функции начального состояния $\varphi(x)$:

$$C_n = \int \varphi(x) \psi_n^*(x) dx.$$

При вычислении средних $\langle x(t) \rangle$ и $\langle x^2(t) \rangle$ получим

$$\begin{aligned} \langle x(t) \rangle &= \sum_n \sum_m C_n^* C_m \int x \psi_n^*(x) \psi_m(x) dx \cdot \exp(i\omega(m-n)t), \\ \langle x^2(t) \rangle &= \sum_n \sum_m C_n^* C_m \int x^2 \psi_n^*(x) \psi_m(x) dx \cdot \exp(i\omega(m-n)t). \end{aligned} \quad (1)$$

Используя рекуррентные соотношения для полиномов Эрмита

$$\xi H_n(\xi) = n H_{n-1}(\xi) + (1/2) H_{n+1}(\xi)$$

и свойство их ортогональности, замечаем, что интегралы отличны от нуля лишь в случаях $m = n \pm 1$ и $m = n, n \pm 2$ соответственно. Поэтому из (1) получим

$$\begin{aligned} \langle x(t) \rangle &= \sum_n \left(C_n^* C_{n-1} x_{nn-1} \exp(i\omega t) + C_{n-1}^* C_n x_{n-1n} \exp(-i\omega t) \right), \\ \langle x^2(t) \rangle &= \sum_n \left(C_n^* C_{n-2} (x^2)_{nn-2} \exp(i2\omega t) + C_{n-2}^* C_n (x^2)_{n-2n} \exp(-i2\omega t) + C_n^* C_n (x^2)_{nn} \right) \end{aligned}$$

Здесь $x_{mn} = \int x \psi_m^*(x) \psi_n(x) dx$, $(x^2)_{mn} = \int x^2 \psi_m^*(x) \psi_n(x) dx$.

Как видно, для средних получаем

$$\langle x(t) \rangle = A \cos(\omega t), \quad \langle x^2(t) \rangle = B + D \cos(2\omega t),$$

A, B, D - некоторые константы.

11.23. Указание. Такое состояние, безусловно, является нестационарным и может быть «сконструировано» как суперпозиция стационарных состояний, например $1s$ и $2s$.

11.24.

11.25.

11.26.

11.27.

12. Нестационарная теория возмущений. Взаимодействие квантовой системы с электромагнитным полем.

12.1. В условиях почти резонансного воздействия ($\omega_0\tau \gg 1$, $|\omega_{21} - \omega_0|/\omega_0 \ll 1$) возможен переход лишь в нижнее возбужденное состояние. Для амплитуды вероятности имеем

$$C_{21}(\tau) = i \frac{d_{21}E_0}{\hbar} \int_0^\tau \cos(\omega_0 t) \exp(i\omega_{21}t) dt \approx i \frac{d_{21}E_0}{2\hbar} \exp(i\Delta\omega\tau/2) \frac{\sin(\Delta\omega\tau/2)}{\Delta\omega/2},$$

где $\Delta\omega = \omega_{21} - \omega_0$ - отстройка от резонанса. Вероятность перехода за импульс есть

$$W_{21} = |C_{21}(\tau)|^2 = \frac{|d_{21}|^2 E_0^2}{4\hbar^2} \frac{\sin^2(\Delta\omega\tau/2)}{(\Delta\omega/2)^2}.$$

12.2. Амплитуда вероятности перехода есть

$$C_{21}(\infty) \approx i \frac{d_{21}E_0}{2\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-t^2/2\tau^2) \exp(i(\omega_{21} - \omega_0)t) dt = i \frac{d_{21}E_0}{2\hbar} \sqrt{2\pi}\tau \exp(-(\omega_{21} - \omega_0)^2 \tau^2 / 2)$$

Поэтому $W_{21} = |C_{21}|^2 \approx \frac{|d_{21}|^2 E_0^2}{4\hbar^2} 2\pi\tau^2 \exp(-(\omega_{21} - \omega_0)^2 \tau^2)$ Максимум вероятности достигается при $\Delta\omega\tau = 1$ (здесь $\Delta\omega = \omega_{21} - \omega_0$ - отстройка).

12.3. Расписывая амплитуду перехода во втором порядке теории возмущений выделяя резонансное слагаемое, получим

$$C_{31} \approx -\sum_n \frac{d_{3n}d_{n1}E_0^2}{4\hbar^2} \left(\frac{1}{\omega_{n1} - \omega} \right) \exp(i\Delta\omega\tau/2) \frac{\sin \Delta\omega\tau/2}{\Delta\omega/2},$$

здесь $\Delta\omega = \omega_{31} - 2\omega_0$, $\omega_{n1} = (E_n - E_1)/\hbar$ - частота перехода в некоторое промежуточное состояние. Для вероятности перехода получим

$$W = |C_{31}|^2 \approx \left| \sum_n \frac{d_{3n}d_{n1}}{4\hbar^2} \left(\frac{1}{\omega_{n1} - \omega} \right) \right|^2 \frac{\sin^2 \Delta\omega\tau/2}{(\Delta\omega/2)^2} \cdot E_0^4.$$

Как видно, в рассматриваемом случае энергии начального и конечного состояний связаны соотношением $E_3 - E_1 = 2\hbar\omega$, то есть можно говорить о процессе двухфотонного поглощения. В полученном выражении основной вклад в сумму вносит слагаемое $n = 2$, в этом смысле говорят, что двухфотонный переход идет через конкретное возбужденное состояние.

12.4. Для амплитуды вероятности перехода в состояние континуума с волновым вектором \vec{k} и энергией $\varepsilon = \hbar^2 k^2 / 2m$ запишем (предполагая, что ось z направлена вдоль вектора поляризации)

$$C_{\vec{k}1} \approx \frac{id_{\vec{k}1} E_0}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-t^2/2\tau^2) \cos(\omega_0 t) \exp(i(\varepsilon + I)t/\hbar) dt.$$

Здесь $I = -E_{1s}$ - потенциал ионизации атома водорода,

$$d_{\vec{k}1} = e \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int \exp(i\vec{k}\vec{r}) z \psi_{1s}(r) d^3 r$$

- матричный элемент оператора дипольного момента, связывающий начальное $1s$ состояние и состояние континуума. Вычисляя интеграл по угловым переменным с учетом разложения плоской волны по сферическим функциям, получим

$$d_{\vec{k}1} = e \frac{4\pi i \cos\theta_k}{(2\pi)^{3/2}} \cdot I(k),$$

где $I(k) = \int j_1(kr) \psi_{1s}(r) r^3 dr$, θ_k - угол вылета по отношению к направлению вектора поляризации электрического поля волны (ось z). Полная вероятность ионизации может быть вычислена как $W = \int |C_{\vec{k}1}|^2 d^3 k$, то есть как интеграл по всем состояниям континуума, куда произошел переход. Интегрируя по углу вылета электрона, получим

$$W = \frac{8}{3} \frac{e^2 E_0^2}{4\hbar^2} \int I^2(k) k^2 dk \int_{-\infty}^{\infty} dt' dt'' \exp\left(-\frac{(t'^2 + t''^2)}{2\tau^2}\right) \exp(i(\varepsilon + I)/\hbar - \omega)(t' - t'')$$

. Проинтегрируем полученное выражение по энергии с учетом того, что $k^2 dk = \frac{\sqrt{2m^3\varepsilon}}{\hbar^3} d\varepsilon$. Принимая во внимание, что в длинном импульсе ($\omega_0\tau \gg 1$) переход будет идти в узкий набор состояний вблизи энергии

$\varepsilon^* = \hbar^2 (k^*)^2 / 2m = \hbar\omega - I \approx \hbar\omega$, в выражении для W можно пренебречь зависимостью предэкспоненциального члена от энергии. Учитывая, что

$$\int \exp(i(\varepsilon + I)/\hbar - \omega)(t' - t'') d\varepsilon = \hbar \int \exp(i\xi(t' - t'')) d\xi = 2\pi\hbar\delta(t' - t''),$$

получим

$$W \approx \frac{4\pi}{3} \frac{e^2 E_0^2}{\hbar^2} I^2(k^*) \tau \sqrt{2\pi m^3 \varepsilon^*}.$$

Поскольку $I(k) \sim 1/k^4$, то $W \sim \omega^{-7/2}$.

12.5. Будем считать, что волновые функции ψ_1, ψ_2 и энергии $\varepsilon_1, \varepsilon_2$ ($\varepsilon_2 > \varepsilon_1$) двух атомных стационарных состояний известны и в начальный

момент система находится в нижнем стационарном состоянии. Рассмотрим сначала случай мгновенного включения поля. Тогда в момент времени t амплитуда вероятности обнаружить атом в возбужденном состоянии есть

$$C_2(t) = \frac{id_{21}E_0}{\hbar} \int_0^t \cos(\omega_0 t) \exp(i\omega_{21}t) dt ,$$

где ω_{21} - частота перехода. Вычисляя интеграл по времени, получим

$$C_2(t) = \frac{id_{21}E_0}{2\hbar} \left(\frac{\exp(i(\omega_{21} - \omega_0)t) - 1}{i(\omega_{21} - \omega_0)} + \frac{\exp(i(\omega_{21} + \omega_0)t) - 1}{i(\omega_{21} + \omega_0)} \right) .$$

Тогда волновая функция атома в произвольный момент времени записывается в виде:

$$\psi(t) = \psi_1 \exp(-i\varepsilon_1 t/\hbar) + C_2(t) \psi_2 \exp(-i\varepsilon_2 t/\hbar) .$$

Вычисление среднего по квантовому состоянию дипольного момента дает

$$\begin{aligned} \langle d \rangle &= e \langle z \rangle = \int z |\psi_1 \exp(-i\varepsilon_1 t/\hbar) + C_2(t) \psi_2 \exp(-i\varepsilon_2 t/\hbar)|^2 d^3 r = \\ 2 \operatorname{Re} \left(C_2(t) d_{21}^* \exp(-i\omega_{21}t) \right) &= \frac{|d_{21}|^2}{\hbar} \frac{2\omega_{21}}{\omega_{21}^2 - \omega_0^2} E_0 (\cos \omega_0 t - \cos \omega_{21}t) . \end{aligned}$$

При адиабатически плавном включении поля для амплитуды $C_2(t)$ получим:

$$\begin{aligned} C_2(t) &= \lim_{\lambda \rightarrow 0} \frac{id_{21}E_0}{\hbar} \int_{-\infty}^t \cos(\omega_0 t) \exp(i(\omega_{21} - i\lambda)t) dt = \\ &= \frac{d_{21}E_0}{\hbar} \left(\frac{\exp(i(\omega_{21} - \omega)t)}{\omega_{21} - \omega} + \frac{\exp(i(\omega_{21} + \omega)t)}{\omega_{21} + \omega} \right) . \end{aligned}$$

Поэтому $\langle d \rangle = e \langle z \rangle = \frac{|d_{21}|^2}{\hbar} \frac{2\omega_{21}}{\omega_{21}^2 - \omega_0^2} E_0 \cos \omega_0 t .$

При адиабатическом включении поля возникают колебания дипольного момента на частоте вынуждающей силы. В случае мгновенного включения поля колебания возникают также на собственной частоте.

12.6. На основании теоремы Эренфеста можно утверждать, что в рассматриваемом случае решение квантовомеханической задачи для определения средней по квантовому состоянию координаты (и дипольного момента) совпадает с решением классической задачи.

$$\ddot{x} + \omega_0^2 x = eE(t)/m$$

при условии, что в начальный момент времени электрон имеет нулевую скорость и находится в положении равновесия.

Для случая мгновенного включения поля в момент времени $t = 0$ по закону $E(t) = E_0 \cos \omega t$ поэтому имеем

$$\langle d \rangle = e \langle x \rangle = \frac{e^2 E_0}{m(\omega_0^2 - \omega^2)} (\cos \omega t - \cos \omega_0 t).$$

Мгновенное включение поля вызывает колебания дипольного момента, как на частоте возбуждающего поля, так и на собственной частоте.

При адиабатическом включении поля $E(t) = E_0 \exp(\lambda t) \cos \omega t$ ($\lambda \xrightarrow{t < 0} 0$) получаем $\langle d \rangle = e \langle x \rangle = \frac{e^2 E_0}{m(\omega_0^2 - \omega^2)} \cos \omega t$, то есть возникают лишь вынужденные колебания (см. также задачу 12.5).

12.7. Используя решение задачи 12.6, получим для дипольного момента единицы объема

$$\langle P \rangle = Ne \langle x \rangle = \frac{Ne^2 E_0}{m(\omega_0^2 - \omega^2)} \cos \omega t = \chi E_0 \cos \omega t,$$

где $\chi = \frac{e^2 N}{m(\omega_0^2 - \omega^2)}$ - поляризуемость. Классическое и квантовомеханическое решения задачи совпадают.

12.8. В низкочастотном поле можно считать, что энергетические уровни и соответствующие им волновые функции отслеживают мгновенные значения электрического поля волны. Используя стационарную теорию возмущений для определения поправки первого порядка к волновой функции основного состояния атома водорода, в предположении, что ось z направлена вдоль электрического поля волны, получим

$$\Delta \psi_{1s}(\vec{r}, t) = \sum_{n=2}^{\infty} \frac{V_{1s,np}}{\varepsilon_{1s} - \varepsilon_{np}} \psi_{np}(\vec{r}) = -e E_0 \cos(\omega t) \sum_{n=2}^{\infty} \frac{\langle np | z | 1s \rangle}{\varepsilon_{1s} - \varepsilon_{np}} \psi_{np}(\vec{r}).$$

Вычисление среднего значения дипольного момента дает

$$\langle d \rangle = e \langle z \rangle = e \int |\psi_{1s} + \Delta \psi_{1s}|^2 z d^3 r \approx 2e \int \psi_{1s}(r) \Delta \psi_{1s}(\vec{r}, t) r d^3 r.$$

Вычисляя интеграл, получим

$$\langle d \rangle = -2e^2 \sum_{n=2}^{\infty} \frac{|\langle np | z | 1s \rangle|^2}{\varepsilon_{1s} - \varepsilon_{np}} E_0 \cos(\omega t)$$

Поскольку дипольный момент единицы объема $P_z = N \langle d \rangle$, для поляризу-

емости находим $\chi = -2e^2 N \sum_{n=2}^{\infty} \frac{|\langle np | z | 1s \rangle|^2}{\varepsilon_{1s} - \varepsilon_{np}}$ или после вычисления угловой

части интегралов $\chi = -\frac{2e^2}{3} N \sum_{n=2}^{\infty} \frac{\left| \langle R_{np} | r | R_{1s} \rangle \right|^2}{\varepsilon_{1s} - \varepsilon_{np}}$. Считая, что основной вклад в сумму по np состояниям дает состояние $2p$, получим

$$\chi \approx \frac{8e^2}{9Ry} N \left| \langle R_{2p} | r | R_{1s} \rangle \right|^2$$

Поскольку $R_{1s,2p} = \frac{a_0}{Z} \frac{2^8}{3^4 \sqrt{6}}$ (см. задачу 12.15), $\chi \approx \frac{2^{19} a_0^3}{3^{11}} N \approx 3a_0^3 N$.

Точные вычисления дают $\chi = 4.5a_0^3 N$.

12.9. Вычисление квадратичной поляризуемости следует проводить во втором порядке нестационарной теории возмущений. Например, для начального состояния $|i\rangle$ (i задает совокупность квантовых чисел состояния) в произвольном центрально-симметричном потенциале имеем

$$\langle d \rangle = e \langle z \rangle = e \int \left| \psi_i + \Delta \psi_i^{(1)} + \Delta \psi_i^{(2)} \right|^2 z d^3 r.$$

Здесь $\Delta \psi_i^{(1)}$ и $\Delta \psi_i^{(2)}$ - поправки к функциям состояния первого и второго порядков теории возмущений. При вычислении вклада в дипольный момент членов второго порядка малости получим

$$\langle d^{(2)} \rangle = 2e \operatorname{Re} \int \psi_i \Delta \psi_i^{(2)} \cdot r d^3 r + e \int \Delta \psi_i^{(1)*} \Delta \psi_i^{(1)} \cdot r d^3 r.$$

При этом $\Delta \psi_i^{(1)} \sim E_0 \sum_n \frac{\langle n | z | i \rangle \exp(i(\omega_{ni} - \omega)t)}{\varepsilon_n - \varepsilon_i - \hbar\omega} \psi_n$,

$$\Delta \psi_i^{(2)} \sim E_0^2 \sum_{n,f} \frac{\langle f | z | n \rangle \langle n | z | i \rangle \exp(i(\omega_{fi} - 2\omega)t)}{(\varepsilon_n - \varepsilon_i - \hbar\omega)(\varepsilon_f - \varepsilon_n - 2\hbar\omega)} \psi_f.$$

Здесь $\omega_{ni} = (\varepsilon_n - \varepsilon_i)/\hbar$ - частота перехода между стационарными состояниями, E_0, ω - напряженность и частота электрического поля волны.

При вычислении дипольного момента получаем слагаемые ($z_{ni} = \langle n | z | i \rangle$)

$$\langle d^{(2)} \rangle \sim \sum_{n,f} z_{fi} z_{fn} z_{ni} \text{ и } \langle d^{(2)} \rangle \sim \sum_{n,m} z_{mn} z_{mi} z_{ni}.$$

С учетом правила отбора по орбитальному квантовому числу $\Delta \ell = \pm 1$ каждое слагаемое в этих суммах тождественно равно нулю, т.е. в разложении по степеням поля квадратичное по полю слагаемое отсутствует.

12.10. Выбирая ось квантования момента вдоль направления вектора электрического поля волны, получим, что переходы разрешены в состоянии $|np, m=0\rangle$.

12.11. Выбирая ось квантования момента вдоль направления волнового вектора \vec{k} , запишем оператор взаимодействия атома с полем электромагнитной волны в виде $\hat{V} = -eE_0(x \cos \omega t \pm y \sin \omega t)$, где знак « \pm » соответствует направлению вращения вектора электрического поля волны против и по часовой стрелке. Переходя к сферической системе координат, имеем

$$\hat{V} = -eE_0 r \sin \theta \cdot (\cos \omega t \cos \varphi \pm \sin \omega t \sin \varphi) = -eE_0 r \sin \theta \cdot \cos(\omega t \mp \varphi).$$

Анализируя матричный элемент $\langle n\ell m | \sin \theta \cos(\omega t \mp \varphi) | 1s \rangle$, получим, что переходы возможны лишь в p -состояния с $m = \pm 1$. При этом, если частота поля удовлетворяет условию резонанса $\omega \approx (E_{np} - E_{1s})/\hbar$, будут преимущественно заселяться лишь состояния с $m = -1$ при вращении поля волны против часовой стрелки и с $m = 1$ при вращении поля волны по часовой стрелке.

12.12. Выбирая ось квантования момента вдоль направления вектора электрического поля волны, получим, что вероятность перехода определяется только z -компонентой оператора дипольного момента, то есть правила отбора определяются матричными элементами вида $\langle \ell'' m'' | \cos \theta | \ell' m' \rangle \times \langle \ell' m' | \cos \theta | \ell m \rangle$, где ℓ, m, ℓ'', m'' - квантовые числа начального и конечного состояний, ℓ', m' - квантовые числа некоторого «промежуточного» состояния, а угол θ отсчитывается от направления электрического поля волны. В результате имеем $\Delta \ell = 0, \pm 2$, $\Delta m = 0$.

12.13. Вычисляя матричный элемент дипольного оператора для состояния гармонического осциллятора $d_{n+1,n} = ea\sqrt{(n+1)/2}$ ($a = \sqrt{\hbar/m\omega}$),

для вероятности спонтанного перехода получаем $A_{n,n+1} = \frac{2e^2\omega^2}{3mc^3}(n+1)$. В

частности, для перехода $n=1 \rightarrow n=0$ имеем $A_{0,1} = \frac{2e^2\omega^2}{3mc^3} = \gamma$ (γ - клас-

сическая постоянная затухания). Тот факт, что в полученные выражения не входит постоянная Планка, свидетельствует о том, что фактически излучение гармонического осциллятора может быть рассмотрено в рамках классической электродинамики.

12.14. В рассматриваемом случае каждое из состояний характеризуется набором квантовых чисел $|n_x, n_y, n_z\rangle$ ($n_{x,y,z} = 1, 2, 3, \dots$). Рассмотрим, например, переход $|1, 1, 2\rangle \rightarrow |1, 1, 1\rangle$. Для этой пары состояний отлична от нуля лишь z -компонента оператора дипольного момента

$$d_z = e \frac{4}{a} \int z \cos \frac{\pi z}{a} \sin \frac{2\pi z}{a} dz = \frac{16ea}{9\pi^2};$$

поскольку $\omega = 3\pi^2 \hbar / 2ma^2$, получим

$$A = \frac{4\omega^3}{3\hbar c^3} |d_z|^2 = \frac{2^9}{9\pi^2} \frac{1}{\hbar} \alpha \frac{(\pi^2 \hbar^2 / 2ma^2)^2}{mc^2}.$$

12.15. Рассмотрим, например, переход $2p, m=0 \rightarrow 1s$. Для этого перехода отлична от нуля только z -компонента оператора дипольного момента. Поскольку $\langle Y_{10} | \cos \theta | Y_{00} \rangle = 1/\sqrt{3}$, для вероятности перехода получаем

$$A_{1s,2p} = \frac{4\omega^3}{3\hbar c^3} |d|^2, \quad d = \frac{eR_{1s,2p}}{\sqrt{3}}, \quad R_{1s,2p} = \int_0^\infty R_{2p}(r)R_{1s}(r)r^3 dr.$$

Вычисление радиального интеграла дает

$$R_{1s,2p} = 2(Z/a_0)^{3/2} (Z/2a_0)^{3/2} \frac{1}{\sqrt{3}} (Z/a_0) \int_0^\infty \exp(-3Zr/2a_0) r^4 dr = \\ \frac{a_0}{Z} \frac{2^5}{3^5 \sqrt{6}} \int \xi^4 \exp(-\xi) d\xi = \frac{a_0}{Z} \frac{2^8}{3^4 \sqrt{6}}.$$

Учитывая, что $\omega = 3Z^2 Ry / 4\hbar$, получим $A_{1s,2p} = \frac{2^9}{3^8} \frac{\alpha^3 Ry}{\hbar} Z^4$.

12.16. Естественная ширина линии есть $\gamma \sim \frac{\omega^3}{\hbar c^3} |d_{21}|^2$. Оценивая величину матричного элемента как $d_{21} \approx ea_0$, найдем $\gamma \sim \alpha^3 \omega_{at}$, где α - постоянная тонкой структуры, $\omega_{at} = Ry/\hbar$ - атомной значение частоты. Подставляя численные значения, находим $\gamma \sim 10^{10} \text{ с}^{-1}$. Точный расчет (см. задачу 12.15) дает $\gamma = 6.28 \cdot 10^8 \text{ с}^{-1}$.

12.17. Время спонтанного перехода можно оценить как $\tau^{-1} \sim \frac{\omega^3}{\hbar c^3} |\mu_{21}|^2$, $\omega = 2\pi c/\lambda$ - частота перехода между компонентами сверхтонкой структуры $1s$ атома водорода, μ_{21} - матричный элемент перехода магнитного дипольного момента системы. Полагая, что $\mu_{21} \approx \mu_B$ - магнетон Бора, для времени перехода получим $\tau \sim 3 \cdot 10^{14} \text{ с}$.

12.18. $\tau \sim 10^{-7} - 10^{-8} \text{ с}$.

12.19. Считая, что матричный элемент электрического дипольного момента есть $d_{fi} \sim eR_N$, $R_N \sim 10^{-13} - 10^{-12}$ см, получим $\tau \sim 10^{-14} - 10^{-16}$ с.

12.20. В электрическом дипольном приближении оператор взаимодействия с полем электромагнитной волны не зависит от спина. Поэтому запрет интеркомбинаций есть следствие ортогональности спиновых волновых функций многоэлектронного атома, соответствующих различному значению спина.

12.21. Для неподвижного атома имеет место естественное уширение линии. Поэтому $\sigma_{21} = \lambda^2/2\pi \cong 5.5 \cdot 10^{-10}$ см². Следовательно, для отношения сечений имеем $\sigma_{21}/\sigma \sim 10^6$.

12.22. Интенсивность излучения после одного обхода резонатора есть

$$I(x+2L) = I(x) \exp(kx)r_1 \exp(kL)r_2 \exp(\kappa(L-x)) \geq I(x),$$

где x - координата стартовой точки, отсчитываемая от зеркала 1, $I(x)$ - стартовая интенсивность излучения. Находим $k \geq -\frac{1}{2L} \ln(r_1 r_2) \approx 3.6 \cdot 10^{-4}$ см⁻¹.

12.23. Пороговая инверсная населенность ΔN равна

$$\Delta N = -\frac{1}{2L\sigma} \ln(r_1 r_2),$$

где $\sigma = \lambda^2/2\pi \frac{1}{\tau \Delta \nu}$, $\Delta \nu = \frac{c \Delta k}{2\pi}$. Для лазера на рубине получаем $\Delta N \approx 7 \cdot 10^{15}$ см⁻³.

12.24. Изменение интенсивности излучения dJ при прохождении слоя газа толщиной dx определяется уравнением

$$dJ = -J(N_1 - N_2)\sigma dx = -J\kappa dx,$$

$\kappa = \sigma(N_1 - N_2)$ - коэффициент поглощения, σ - сечение фотопоглощения и индуцированного излучения, N_1 и N_2 - населенности уровней 1 и 2 соответственно. Из условий

$$N_2/N_1 = \exp(-\hbar\omega/kT), \quad N_1 + N_2 = N, \quad \hbar\omega = E_2 - E_1$$

Получим

$$\kappa = \sigma N \frac{1 - \exp(-\hbar\omega/kT)}{1 + \exp(-\hbar\omega/kT)}.$$

Излучение будет поглощаться, если $N_1 > N_2$. Если же $N_2 > N_1$, то в системе будет наблюдаться усиления сигнала. Этому случаю формально соответствует отрицательная температура.

12.25. Нельзя.

12.26. Размер «зайчика» r_0 определяется расходимостью излучения.

Угол расходимости есть $\varphi \approx \lambda/d$. Поэтому находим

$$W \cong P/r_0^2 \sim 10^{12} \text{ Вт/см}^2, \quad r_0 \cong \varphi \cdot f.$$

12.27. До остановки атом должен поглотить $N = \frac{Mv_0}{\hbar\omega/c} \approx 34000$ кван-

тов. Излучение возбужденных атомов должно быть именно спонтанным, ненаправленным, для этого интенсивность излучения (квантов/см²с) не должна превышать интенсивность насыщения $I < I_s = 1/\sigma\tau_2$; в противном случае индуцированное излучение будет происходить чаще, нежели спонтанное излучение, ослабляя замедление за счет вынужденного излучения квантов в направлении излучения лазера. Мощность излучения лазера, следовательно не должна превышать $\hbar\omega I_s \approx 20 \text{ мВт/см}^2$. Сила, тормозящая атомы, равна

$$F = \frac{\hbar\omega}{c(\tau_1 + \tau_2)},$$

где $\tau_1 = 1/I\sigma$ - время, проводимое атомом в невозбужденном состоянии;

$\tau_2 = 2 \cdot 10^{-8}$ с – время жизни возбужденного состояния. Соотношение τ_1 и

τ_2 должно быть выбрано оптимальным образом; для оценки примем

$\tau_1 + \tau_2 = 2\tau_2$. Тогда для ускорения получим $a = F/M \approx 75000 g$, $g = 981$

см/см². При такой величине ускорения атомы натрия будут останавливаться

на расстоянии $S = v_0^2/2a \approx 68$ см за время $t = \sqrt{2S/a} \approx 1.1$ мс. В остано-

вившемся сгустке «температура» атомов определится импульсом квантов

$$T \approx \frac{p_{atom}^2}{2M} = \frac{p_{фот}^2}{2M} = \hbar\omega \frac{\hbar\omega}{Mc^2} = 10^{-5} \text{ К.}$$

III. Структура электронной оболочки атома

13. Многоэлектронные атомы. Атомные оболочки и подоболочки. Электронная конфигурация. Сложение угловых моментов. Терм атома. Правила Хунда.

13.1. В соответствии с общим правилом сложения моментов имеем
 $nsn's: L=0$; $sp: L=1$; $sd: L=2$; $npn'p: L=0,1,2$;
 $pd: L=1,2,3$; $pf: L=2,3,4$; $df: L=1,2,3,4,5$.

13.2. Например, для случая $pd(L')f$ имеем

$$pd(L'=1)f \quad L=2,3,4$$

$$pd(L'=2)f \quad L=1,2,3,4,5$$

$$pd(L'=3)f \quad L=0,1,2,3,4,5,6$$

Полный набор квантовых чисел суммарного момента импульса оказывается независимым от порядка сложения моментов.

13.3. Имеем следующие термы $^{1,3}PDF$. Все термы нечетные.

13.4. В конфигурации pdf имеются следующие термы $^{2,4}SPDFGHI$, все термы четные.

13.5. Имеются следующие термы $^{1,3}SPD$, все – четные.

13.6. В оболочках с $n \geq 2$ может быть 6 p -электронов; с $n \geq 3$ - 10 d -электронов и с $n \geq 4$ - 14 f -электронов.

13.7. Единственные возможные значения суммарных проекций орбитального и спинового моментов на выделенную ось в полностью заполненной подоболочке равны нулю. Поэтому терм полностью заполненной подоболочки - 1S . Заполненная оболочка состоит из заполненных подоболочек. Поэтому ее терм также 1S .

13.8. С учетом решения предыдущей задачи имеем s^2p^2P , $d^{10}s^2S$, s^2f^2F .

13.9. Например, для p -подоболочки с одной вакансией имеем p^5^2P . Такую конфигурацию и терм имеют галогены.

13.10. Термы конфигурации двух эквивалентных электронов p^2 есть 1S , 1D , 3P . Другие термы, имеющие место в конфигурации двух неэквивалентных p электронов, не реализуются, т.к. для них не удастся построить двухэлектронную волновую функцию с правильными свойствами симметрии относительно перестановки координат электронов местами. Заметим, что в конфигурации двух эквивалентных электронов реализуют-

ся лишь термы, для которых $L+S$ - четное. Поэтому, для конфигурации двух эквивалентных d электронов имеем синглеты 1SDG и триплеты 3PF .

13.11. Термы двухэлектронных и «двухдырочных» конфигураций совпадают.

13.12. По правилам Хунда имеем p^2 3P и d^2 3F .

13.13. Аналогично задаче 13.13 найдем p^4 3P и d^8 3F .

13.14. Атом азота имеет конфигурацию $1s^2 2s^2 2p^3$, наибольшее значение спина трех электронов $S = 3/2$; при этом проекции орбитальных моментов всех трех электронов должны быть различными $m_\ell = 1, 0, -1$. Единственное значение проекции суммарного орбитального момента есть ноль $M_L = 0$. Следовательно, $L = 0$ и терм 4S .

13.15. Максимальный спин трех электронов $S = 3/2$. Проекция орбитальных моментов всех трех электронов должны быть различны и обеспечивать максимально возможные значения проекции суммарного орбитального момента; наибольшая возможная величина $M_L = 3$ обеспечивается набором $m_\ell = 2, 1, 0$. Следовательно, терм есть 4F .

13.16. Конфигурации возбужденного атома углерода будут соответственно $2pns$, $2pnp$, $2pnd$. Поэтому имеем следующие термы:

$2pns$: ${}^{1,3}P^o$ - нечетные,

$2pnp$: ${}^{1,3}SPD$ - четные,

$2pnd$: ${}^{1,3}PDF^o$ - нечетные.

13.17. Конфигурации возбужденного атома азота будут, соответственно, $2p^2ns$, $2p^2np$, $2p^2nd$; конфигурация иона во всех случаях - $2p^2$, она дает термы 1S , 1D , 3P , идентичные термам невозбужденного атома углерода, они и будут родительскими термами невозбужденного атома азота. Добавляя моменты возбужденного электрона к моментам родительского терма, получим:

1S	$+ns \rightarrow {}^2S$,	терм четный,
1S	$+np \rightarrow {}^2P$,	нечетный,
1S	$+nd \rightarrow {}^2D$,	четный,
1D	$+ns \rightarrow {}^2D$,	четный,
1D	$+np \rightarrow {}^2PDF$,	нечетные,

$\left[\begin{array}{l} 1D \\ 3P \\ 3P \\ 3P \end{array} \right] + nd \rightarrow {}^2SPDFG,$	четные,
$\left[\begin{array}{l} 3P \\ 3P \\ 3P \end{array} \right] + ns \rightarrow {}^{2,4}P,$	четные,
$\left[\begin{array}{l} 3P \\ 3P \\ 3P \end{array} \right] + np \rightarrow {}^{2,4}SPD,$	нечетные,
$\left[\begin{array}{l} 3P \\ 3P \\ 3P \end{array} \right] + nd \rightarrow {}^{2,4}PDF$	четные.

13.18. Число электронов замкнутой подоболочки определяется принципом Паули. Для заданного числа ℓ существует $2\ell + 1$ состояний с проекциями $m_\ell = -\ell, \dots, 0, \dots, \ell$; значение $M_L = \sum m_\ell = 0$ в замкнутой подоболочке единственно, так что $L = 0$. В замкнутой подоболочке $M_S = \sum m_s = 0$, так что $S = 0$. Поскольку $L = S = 0$, то $J = 0$.

13.19. В рассматриваемом случае имеем следующие конфигурации и термы $1s2s \ ^1S$ и $1s2p \ ^1P$.

13.20. В конфигурации $1s^2$ единственно возможный терм есть 1S .

13.21. По правилам Хунда для атома Mn и иона Mn^{++} основное состояние есть ${}^6S_{5/2}$.

13.22. $Ar^{2+} \ 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^4$, $Ca \ 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2$.

13.23. Цинк ($Z = 30$) $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2$, основное состояние 1S_0 ; стронций ($Z = 38$) $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 5s^2$, основное состояние 1S_0 .

13.24. В атоме хрома не полностью заполненными являются две подоболочки - $3d$ и $4s$. Поэтому при определении основного терма по правилам Хунда достаточно рассмотреть электроны, находящиеся только на этих подоболочках. Все пять спиновых моментов электронов $3d$ - подоболочки могут быть ориентированы в одну сторону, поэтому их суммарный спиновый момент $-5/2$, все проекции орбитального момента у этих электронов должны быть различны. Поэтому единственное значение суммарной проекции момента есть $M_L = 0$, а, следовательно, $L = 0$. Добавление еще одного s - электрона не изменяет суммарный орбитальный момент. По правилам Хунда его спин должен быть параллелен суммарному спину пяти d электронов. Поэтому имеем $S = 3$, а основное состояние есть 7S_3 .

13.25. В обоих случаях 4F .

13.26. ${}^6S, \ ^8S$.

13.27.

13.28. 7F .

13.29. 9D .

13.30.

13.31.

13.32.

13.33.

13.34.

13.35.

13.36. ${}^2PD, {}^4S$. Основным по правилам Хунда является терм 4S .

13.37. В двухэлектронной pd конфигурации в приближении LS связи имеем следующий набор термов: 1,3PDF . Эти термам принадлежит 12 состояний: ${}^1P_1, {}^1D_2, {}^1F_3, {}^3P_{0,1,2}, {}^3D_{1,2,3}, {}^3F_{2,3,4}$.

В случае jj -связи имеем термы $\{1/2, 3/2\}, \{1/2, 5/2\}, \{3/2, 3/2\}, \{3/2, 5/2\}$. Этим термам также принадлежит 12 состояний:

$$\{1/2, 3/2\}_{1,2}, \{1/2, 5/2\}_{2,3}, \{3/2, 3/2\}_{0,1,2,3}, \{3/2, 5/2\}_{1,2,3,4}.$$

13.38. Нормальная LS связь сменяется jj связью, когда энергия спин-орбитального взаимодействия в атоме превышает энергию электростатического взаимодействия электронов. Оценивая энергию спин-орбитального взаимодействия как $E_{LS} \sim \alpha^2 Z^4 Ry$, а энергию электростатического взаимодействия как $E_{ee} \sim Ze^2/a_0 \sim ZRy$, найдем, в двухэлектронной системе будет реализовываться сложение моментов по схеме jj связи, если выполнено условие $\alpha^2 Z^3 \gg 1$, откуда находим $Z \gg 27$.

13.39. В конфигурации $np, n'p$ имеем термы и состояния:

$$LS \text{ -связь: } {}^1S_0, {}^1P_1, {}^1D_2, {}^3S_1, {}^3P_{0,1,2}, {}^3D_{1,2,3}$$

$$jj \text{ -связь: } \{1/2, 1/2\}_{0,1}, \{1/2, 3/2\}_{1,2}, \{3/2, 1/2\}_{1,2}, \{3/2, 3/2\}_{0,1,2,3}.$$

Случай эквивалентных p - электронов:

$$LS \text{ -связь } {}^1S_0, {}^1D_2, {}^3P_{0,1,2}.$$

$$jj \text{ -связь: } \{1/2, 1/2\}_0, \{1/2, 3/2\}_{1,2}, \{3/2, 3/2\}_{0,2}$$

13.40. В рассматриваемом случае значения квантового числа K есть $K = 1/2, 3/2, 5/2$. Для этих значений K квантовое число полного электронного момента атома принимает соответственно следующий набор значений $J = 0, 1, J = 1, 2, J = 2, 3$. Состояния в приближении $j\ell$ -связи обозначаются так: $jn\ell[K]_J$. Поэтому в рассматриваемом случае имеем:

$$\frac{3}{2}np[1/2]_{0,1}, \quad \frac{3}{2}np[3/2]_{1,2}, \quad \frac{3}{2}np[5/2]_{2,3}.$$

13.41. Первый способ.

Волновая функция системы из N электронов для каждой рассматриваемой конфигурации строится на основе антисимметричной суперпозиции произведений одноэлектронных волновых функций, каждая из которых задается четверкой квантовых чисел (n, l, m_l, m_s) .

Для заданных электронных конфигураций первую одноэлектронную функцию произведения можно выбрать $2(2l + 1)$ способами, вторую $2(2l + 1) - 1$ способами, N -ую $2(2l + 1) - N + 1$ способами. Поскольку электроны являются тождественными частицами, полное число различных произведений и, следовательно, N -электронных волновых функций составляет

$$N_{\Psi} = C_{2(2l+1)}^N = \frac{2(2l+1)!}{N! (2(2l+1) - N)!}$$

Второй способ.

Полное число различных квантовых состояний для рассматриваемой электронной конфигурации определяется суммой чисел различных квантовых состояний на каждом электронном терме. В приближении LS-связи число состояний на каждом терме можно определить как

$$\sum_{j=|L-S|}^{L+S} 2J + 1.$$

Полное число различных (линейно независимых) многоэлектронных волновых функций для рассматриваемой электронной конфигурации

$$N_{\Psi} = \sum_{\{2S+1_L\}} \sum_{j=|L-S|}^{L+S} 2J + 1.$$

В частности, для конфигурации p^2 оба решения дают 15 возможных волновых функций.

14. Тонкая и сверхтонкая структура атомных спектров.

14.1. Рассмотрим случай а). В конфигурации d^2 возможные родительские термы есть синглеты 1SDG и триплеты 3PF (см. задачу 13.10). Добавляя моменты возбужденного электрона к моментам родительского терма, получим

$$\begin{aligned} & [{}^1S]_{+ns} \rightarrow {}^2S, \quad [{}^1D]_{+ns} \rightarrow {}^2D, \quad [{}^1G]_{+ns} \rightarrow {}^2G, \\ & [{}^3P]_{+ns} \rightarrow {}^{2,4}P, \quad [{}^3F]_{+ns} \rightarrow {}^{2,4}F. \end{aligned}$$

По правилам Хунда среди найденных термов основным является 4F , который состоит из 4 состояний ${}^4F_{3/2,5/2,7/2,9/2}$.

14.2. Рассмотрим случай а). Квартетный терм означает, что $S = 3/2$, то есть мы имеем три электрона, спины которых параллельны. Поэтому, например, можно рассмотреть ситуацию, когда имеется конфигурация nd^3 . Основное состояние в этой конфигурации есть ${}^4F_{3/2}$.

14.3. Например, конфигурация, в которой сверх полностью заполненных подоболочек находится один d - электрон. Основное состояние ${}^2D_{3/2}$.

14.4. Li: $1s^2 2s \quad {}^2S$ - четный, не расщеплен,

Be: $1s^2 2s^2 \quad {}^1S$ - четный, не расщеплен,

B: $1s^2 2s^2 2p \quad {}^2P$ - нечетный, нормальный дублет,

C: $1s^2 2s^2 2p^2 \quad {}^3P$ - четный, нормальный триплет,

N: $1s^2 2s^2 2p^3 \quad {}^4S$ - нечетный, не расщеплен,

O: $1s^2 2s^2 2p^4 \quad {}^3P$ - четный, обращенный триплет,

F: $1s^2 2s^2 2p^5 \quad {}^2P$ - нечетный, обращенный дублет,

Ne: $1s^2 2s^2 2p^6 \quad {}^1S$ - четный, не расщеплен.

14.5. По правилу интервалов Ланде для атомов углерода и кислорода имеем $\Delta E_2/\Delta E_1 = 2$ и $\Delta E_2/\Delta E_1 = 1/2$ соответственно.

14.6. Мультиплет основного терма атома серы ${}^3P_{2,1,0}$. Из правила интервалов Ланде $\Delta E = AJ$ следует соотношение расщеплений $\Delta E_{0,1}/\Delta E_{1,2} = 1/2$. Неточное выполнение правила интервалов обусловлено неучтенными при его выводе взаимодействиями. Приближенное значение константы связи моментов $A \approx 190 \text{ см}^{-1} \approx 0.024 \text{ эВ}$.

14.7.

14.8. Квантовое число J «пробегает» набор значений от $J_{\min} = |L - S|$ до $J_{\max} = L + S$. Поэтому возможны следующие ситуации:

а) $L = 2, S = 1$, т.е. имеем терм ${}^3D_{1,2,3}$;

б) $L = 1, S = 2$, т.е. имеем терм ${}^5P_{1,2,3}$.

14.9. Электронная конфигурация $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^3$. Основной терм - ${}^4F_{3/2,5/2,7/2,9/2}$ - нормальный квартет. По правилу интервалов Ланде имеем $\Delta E_{9/2} : \Delta E_{7/2} : \Delta E_{5/2} : \Delta E_{3/2} = 9 : 7 : 5$. Положение компонент мультиплета относительно несмещенного терма определяется выражением

$$\Delta E_J = \frac{A}{2} (J(J+1) - L(L+1) - S(S+1)).$$

Находим (картина расщепления приведена на рис.)

$$\Delta E_{3/2} = -6A, \quad \Delta E_{5/2} = -\frac{7}{2}A,$$

$$\Delta E_{7/2} = 0, \quad \Delta E_{9/2} = \frac{9}{2}A.$$

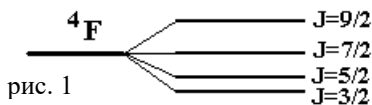


рис. 1

14.10.

14.11. Нерасщепленными будут синглетные термы (гелий, бериллий, неон), а также S -термы (водород, гелий, литий, бериллий, азот, неон).

14.12.

14.13. Терм не расщеплен.

14.14.

14.15. Нижний возбужденный терм атома неона есть 3P в конфигурации $2p^5 3s$ и состоит из трех компонент. Порядок величины расщепления - $\alpha^2 Ry$.

14.16. Нижний возбужденный терм атома гелия есть 3S в конфигурации $1s 2s$ и не имеет тонкой структуры.

14.17. Значения квантового числа J в рассматриваемом случае, очевидно, равны $J = 1, 2, 3$. Такие значения реализуются у терма 3D (поскольку мультиплет является обращенным, то основное состояние есть 3D_3), а также у терма 5P (тогда основное состояние 5P_3).

14.18. В случае $L \geq S$. Например, терм 3D состоит из трех компонент ($J = 1, 2, 3$), а терм 3S - из одной.

14.19.

14.20.

14.21. Возможны 3P_0 , $^2S_{1/2}$, остальные - нет.

14.22.

14.23. Двигаясь мимо ядра с зарядом Z , электрон испытывает действие магнитного поля $H \sim \frac{v}{c} E$, где $E \sim Ze/r^2$, $r \sim a_0/Z$. Для энергии спин-орбитального взаимодействия получаем оценку

$$W \sim \mu_B H \sim \alpha^2 Z^4 Ry \sim 10^{-3} Z^4 \text{ эВ.}$$

14.24. Энергия сверхтонкого расщепления по порядку величины равна энергии взаимодействия магнитных спиновых моментов электрона и протона. Учитывая, что по порядку величины магнитный момент протона в m/m_p (m_p - масса протона) раз меньше магнитного момента электрона,

получим $W \sim \frac{m}{m_p} \alpha^2 Ry \sim 10^{-6} \text{ эВ.}$ Длина волны перехода $\lambda = 2\pi\hbar c/W \sim 100 \text{ см.}$ Точное значение для основного состояния атома водорода $\lambda = 21 \text{ см.}$

14.25. Спины электрона и протона равны $1/2$. Поэтому квантовое число F , определяющее значение суммарного момента атома водорода принимает два значения $F = 0, 1$. Поэтому учет сверхтонкого взаимодействия приведет к расщеплению основного состояния атома водорода на две компоненты.

14.26. Две компоненты.

14.27. Две компоненты.

14.28. Из правила интервалов Ланде следует, что квантовое число F суммарного момента атома принимает значения $F = 1, 2, 3, 4$. Поскольку для основного состояния атома иода $J = 3/2$, находим, что спин ядра $I = 5/2$.

14.29. Возможны значения спина ядра $I = 3/2$ и $I = 5/2$.

14.30. Нижнее возбужденное состояние атома натрия есть $3p \ ^2P_{1/2}$. Поэтому квантовое число $F = 5/2, 7/2$, т.е. сверхтонкая структура состоит из двух компонент. По правилу интервалов Ланде находим положение подуровней сверхтонкой относительно несмещенного уровня: (см. рис.)

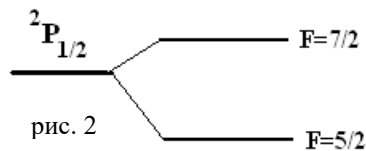


рис. 2

$$\Delta E_{5/2} = -2B, \quad \Delta E_{7/2} = \frac{3}{2} B, \quad B - \text{константа связи взаимодействия.}$$

14.31.

14.32.

14.33.

14.34.

14.35. Число компонент сверхтонкой структуры есть $\min(2J+1, 2I+1)$. Поэтому в случае $I \leq J$ по числу компонент сверхтонкой структуры можно определить спин ядра.

14.36. Да, если магнитный момент электронной оболочки атома равен нулю. Так бывает, если квантовое число $J=0$. Кроме того, возможен случай, когда механический момент у электронной оболочки атома отличен от нуля, а магнитный равен нулю, т.е. g -фактор равен нулю (более подробно см. раздел 18). Пример такого состояния ${}^4D_{1/2}$.

14.37. $I = 3/2$.

14.38. Основной терм атома алюминия – дублет ${}^2P_{1/2,3/2}$. Положение уровней относительно нерасщепленного терма есть $\Delta E_{J=1/2} = -A$, $\Delta E_{J=3/2} = A/2$. Сверхтонкая структура состояния ${}^2P_{1/2}$ состоит из двух компонент (их положение относительно несмещенного уровня $\Delta E_{F=2} = -\frac{7}{4}B$, $\Delta E_{F=3} = \frac{5}{4}B$), состояния ${}^2P_{3/2}$ – из четырех (их положение $\Delta E_{F=1} = -\frac{21}{4}B'$, $\Delta E_{F=2} = -\frac{13}{4}B'$, $\Delta E_{F=3} = -\frac{1}{4}B'$, $\Delta E_{F=4} = \frac{15}{4}B'$).

При этом константы связи $B \approx B' \ll A$. Картина расщепления представлена на рис. 3.

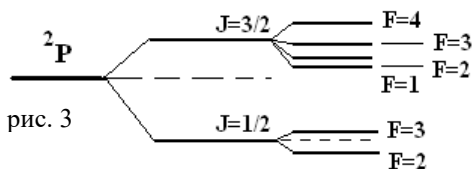


рис. 3

14.39.

14.40. $J = 3/2$.14.41. $I = 1$.

14.42. Эффективный магнитный момент системы, состоящей из двух подсистем – компонента суммарного магнитного момента, коллинеарная полному моменту импульса

$$\langle \vec{\mu} \rangle = \frac{(\vec{\mu} \cdot \vec{J}) \cdot \vec{J}}{|\vec{J}|^2} = \mu_o g \vec{J},$$

где $\vec{J} = \vec{j}_1 + \vec{j}_2$ (моменты, обезразмеренные на посто-

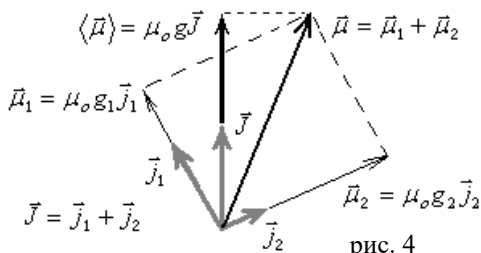


рис. 4

янную Планка \hbar), $\vec{\mu} = \vec{\mu}_1 + \vec{\mu}_2$, $\vec{\mu}_1 = \mu_0 g_1 \vec{J}_1$, $\vec{\mu}_2 = \mu_0 g_2 \vec{J}_2$,

$$g = g_1 + \frac{g_2 - g_1}{2J(J+1)}(J(J+1) - j_1(j_1+1) + j_2(j_2+1)) =$$

$$g_2 + \frac{g_1 - g_2}{2J(J+1)}(J(J+1) + j_1(j_1+1) - j_2(j_2+1)),$$

g_1, g_2 - гиромагнитные отношения подсистем.

14.43. Сверхтонкая структура основных состояний водорода и дейтерия состоит из двух компонент, причем квантовое число F полного механического момента атома принимает значения $F = 0, 1$ для атома водорода и $F = 1/2, 3/2$ для атома дейтерия. Величина расщепления может быть найдена из правила интервалов Ланде

$$\Delta E_H = B_H \text{ и } \Delta E_D = B_D \cdot 3/2,$$

B_H, B_D - константа связи для атомов водорода и дейтерия. Эти константы отличаются вследствие различной величины магнитных моментов протона и дейтрона. Учитывая, что магнитные моменты протона и дейтрона связаны с их безразмерными механическими моментами (спинами) соотношениями (см. задачу 14.42.)

$$\vec{\mu}_p = \mu_N g_p \vec{I}_p, \quad \vec{\mu}_D = \mu_N \frac{g_p + g_n}{2} \vec{I}_D$$

(μ_N - ядерный магнетон Бора), для отношения констант связи получим

$$B_D/B_H = \frac{g_p + g_n}{2g_p},$$

откуда

$$\Delta E_D/\Delta E_H = \frac{3}{4} \frac{g_p + g_n}{g_p} \approx 0.236.$$

Следовательно, $\lambda_D \approx 4.23 \cdot \lambda_H \approx 89.4$ см (экспериментально измеренное значение $\lambda_D \approx 92$ см).

15. Спектры атомов с одним оптическим электроном.

15.1. Указание. Данный ион является водородоподобным.

15.2. Указание. Спектр данного иона аналогичен спектру натрия.

15.3. Используя формулу (15.6), для разницы энергий квантов L_α - линии получим $\Delta(\hbar\omega) = \alpha^2 Ry/16$. Поскольку $\hbar\omega = \frac{3}{4} Ry$, то $\Delta(\hbar\omega) = \alpha^2 \hbar\omega/12$.

15.4. Полагая, что в атоме лития внешний электрон находится в поле ядра с $Z \approx 1$, получим $\Delta E_{3p}/\Delta E_{4p} \approx (4/3)^3 \approx 2.4$.

15.5. Аналогично задаче 15.4 найдем $\Delta E_{4p}/\Delta E_{4f} \approx 6$.

15.6. Спин-орбитальное (тонкое) и сверхтонкое расщепление в атоме позитрония имеют один порядок величины $\sim \alpha^2 Ry$.

15.7. Поскольку спектр состояний атомов щелочных металлов описывается формулой $E_{n\ell} = -Ry/(n - \Delta_\ell)^2$, для квантового дефекта основного состояния находим

$$\Delta_s = n - \sqrt{Ry/I},$$

где n - главное квантовое число основного состояния, I - потенциал ионизации. Для атома цезия $n = 6$ и $\Delta_s = 4.13$, для атома натрия $n = 3$ и $\Delta_s = 1.37$

15.8. Ион Be^+ является литиеподобным, причем, внешний электрон движется в поле атомного остова (ядро + электроны внутренних оболочек), причем суммарный заряд атомного остова $Z = 2$. Поэтому его спектр состояний описывается выражением $E_{n\ell} = -Z^2 Ry/(n - \Delta_\ell)^2$. Для квантового дефекта находим

$$\Delta_s = n - Z\sqrt{Ry/I} \approx 0.27$$

15.9. $\Delta_s \approx 0.2$

15.10. $\Delta_s \approx 1.86$

15.11. $\Delta_s \approx 1.1$

15.12. Атомы бора и алюминия также можно рассматривать в одно-электронном приближении, поскольку в них сверх полностью заполненных подоболочек имеются единственные электроны в $2p$ и $3p$ состояниях соответственно. Поэтому выражение для квантового дефекта основного состояния имеет вид $\Delta_p = n - \sqrt{Ry/I}$. Для атома В $\Delta_p \approx 0.72$, для атома Al $\Delta_p \approx 1.49$.

15.13. Спектр щелочных металлов может быть также описан в приближении эффективного заряда ядра

$$E_{n\ell} = -\frac{Z_{\text{eff}}^2 Ry}{n^2} = -\frac{(Z - \sigma_{n\ell})^2 Ry}{n^2},$$

где $\sigma_{n\ell}$ - постоянная экранирования. Сопоставляя это выражение с представлением энергетического спектра через квантовый дефект

$E_{n\ell} = -Ry/(n - \Delta_\ell)^2$, получим

$$\frac{(Z - \sigma_{n\ell})^2}{n^2} = \frac{1}{(n - \Delta_\ell)^2},$$

откуда $\sigma_{n\ell} = Z - n/(n - \Delta_\ell)$.

Например, для основного состояния атома лития получаем $\sigma_{2s} = 3 - 2/(2 - 0.41) \approx 1.74$

16. Электромагнитные переходы в атомах. Правила отбора.

16.1. Головная линия серии Лаймана – дублет $2p_{1/2,3/2} \rightarrow 1s_{1/2}$ (см рис.1).

16.2. Головную линию серии Бальмера образуют следующие 7 переходов (см. рис.2)

$$3p_{1/2,3/2} \rightarrow 2s_{1/2},$$

$$3s_{1/2} \rightarrow 2p_{1/2,3/2},$$

$$3d_{3/2} \rightarrow 2p_{1/2,3/2},$$

$$3d_{5/2} \rightarrow 2p_{3/2}.$$

Среди них есть совпадающие, если не учитывать лэмбовский сдвиг.

16.3. См. рис.1.

16.4. См. рис.2.

16.5. Соответствующие длины волн определяются по формуле

$$\hbar\omega = \frac{5}{36} Ry + \Delta(\hbar\omega),$$

где $\Delta(\hbar\omega)$ определяется как разница поправок к энергиям состояний с $n = 2$ и $n = 3$, вычисляемых по формуле тонкой структуры:

$$\Delta E_{2s_{1/2}(2p_{1/2})} = \frac{5}{64} \alpha^2 Ry, \quad \Delta E_{2p_{3/2}} = \frac{1}{64} \alpha^2 Ry,$$

$$\Delta E_{3s_{1/2}(3p_{1/2})} = \frac{1}{36} \alpha^2 Ry, \quad \Delta E_{3p_{3/2}(3d_{3/2})} = \frac{1}{108} \alpha^2 Ry, \quad \Delta E_{3d_{5/2}} = \frac{1}{324} \alpha^2 Ry.$$

16.6. Картина расщепления аналогична представленной на рис.2. Крайние линии мультиплета есть $3s_{1/2} \rightarrow 2p_{3/2}$ и $3p_{3/2} \rightarrow 2s_{1/2}$, $3d_{3/2} \rightarrow 2p_{1/2}$.

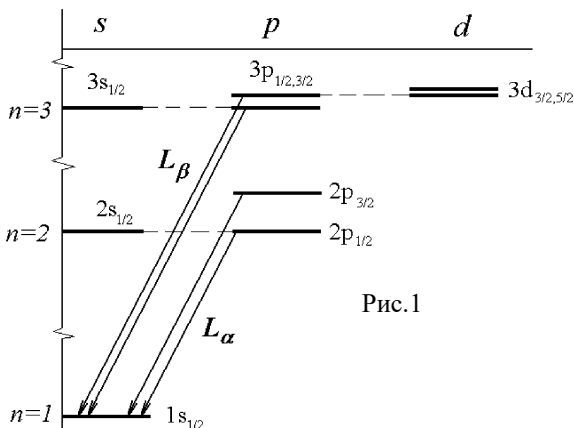


Рис.1

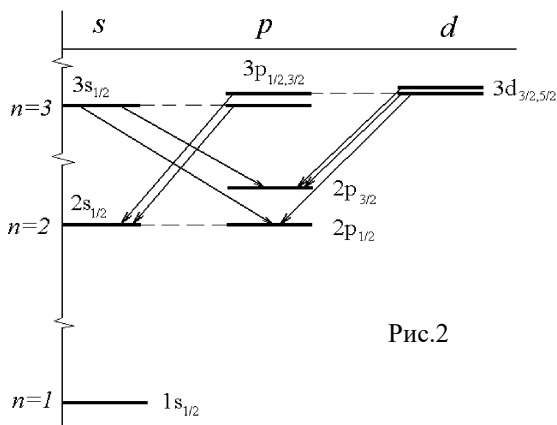


Рис.2

16.7. Прямой переход $4s \rightarrow 3s$ запрещен правилами отбора. Возможен каскадный переход $4s \rightarrow 3p \rightarrow 3s$. Соответствующие длины волн есть:

$$\lambda_{4s \rightarrow 3p} = \frac{1}{R} \cdot \frac{(3 - \Delta_p)^2 (4 - \Delta_s)^2}{(4 - \Delta_s)^2 - (3 - \Delta_p)^2} \approx 11700 \text{ \AA}, \quad \lambda_{3p \rightarrow 3s} \approx 5900 \text{ \AA}.$$

16.8. $\Delta_s = 3 - \sqrt{Ry/I} \approx 1.37$, $\Delta_p = 3 - \sqrt{Ry/(I - 2\pi\hbar c/\lambda)} \approx 0.88$, λ - средняя длина волны дублета.

16.9. $\Delta_s \approx 2.23$, $\Delta_p \approx 1.76$, $I \approx 4.34$ эВ.

16.10.

16.11. $E_{n\ell} = -\frac{(Z-a)^2 Ry}{n^2}$. Поскольку $Z = 12$, $a = 8.85$, $n = 3$, получим $I = -E_{3s} \approx 15$ эВ. Для величины расщепления имеем $\Delta(\hbar\omega) = \frac{\alpha^2 (Z-a')^4 Ry}{n^3 \ell(\ell+1)} \approx 15\alpha^2 Ry$.

16.12. Расстояние между компонентами дублета определяется соотношением

$$2\pi\hbar c \left(\frac{1}{\lambda_1} - \frac{1}{\lambda_2} \right) = \frac{\alpha^2 (Z-a')^4 Ry}{n^3 \ell(\ell+1)}.$$

Поэтому $\lambda_2 = 5896$ \AA.

16.13. $1s^2 2s^2 2p^6 3s \left({}^2S \right) \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^6 np \left({}^2P \right)$ - главная серия.

16.14. Возникают переходы $3p \ {}^2P_{1/2,3/2} \rightarrow ns \ {}^2S_{1/2}$ - резкая серия (дублеты), и $3p \ {}^2P_{1/2,3/2} \rightarrow nd \ {}^2D_{3/2}$, $3p \ {}^2P_{3/2} \rightarrow nd \ {}^2D_{5/2}$ - диффузная серия (триплеты).

16.15. Спектр поглощения атомов алюминия образуют дублеты $3p \ {}^2P_{1/2,3/2} \rightarrow ns \ {}^2S_{1/2}$ ($n \geq 4$)

и триплеты $3p \ {}^2P_{1/2,3/2} \rightarrow nd \ {}^2D_{3/2}$, $3p \ {}^2P_{3/2} \rightarrow nd \ {}^2D_{5/2}$, $n \geq 3$.

16.16. В рассматриваемом случае речь идет о переходах между конфигурациями $1s^2 2s^2 2p^5 4s$ и $1s^2 2s^2 2p^6$. Возможны следующие переходы

$2p^5 4s \rightarrow 2p^6$ - прямой переход и

$2p^5 4s \rightarrow 2p^5 3p \rightarrow 2p^5 3s \rightarrow 2p^6$ - каскадный переход.

16.17.

16.18. Ион Mg^+ является натриеподобной системой. Возможные «пути» перехода в основное состояние $3s$:

$$4p \rightarrow 3s, 4p \rightarrow 4s \rightarrow 3p \rightarrow 3s, 4p \rightarrow 3d \rightarrow 3p \rightarrow 3s.$$

16.19. Например, в случае начального состояния $5s$ возможны следующие переходы:

$$5s \rightarrow 2p \rightarrow 1s; H_\gamma \text{ и } L_\alpha \text{ линии,}$$

$$5s \rightarrow 3p \rightarrow \begin{cases} 1s, \\ 2s; \end{cases} \text{ 2-ая линия серии Пашена, } L_\beta \text{ и } H_\alpha \text{ линии,}$$

$$5s \rightarrow 4p \rightarrow \begin{cases} 1s, 2s, \\ 3s \rightarrow 2p \rightarrow 1s, \text{ линии серии Брекета, Пашена, Бальмера и} \\ 3d \rightarrow 2p \rightarrow 1s; \end{cases}$$

Лаймана.

16.20. Например, в случае начального состояния $5s$ в атоме натрия возможны следующие переходы

$$5s \rightarrow 3p \rightarrow 3s, 5s \rightarrow 4p \rightarrow \begin{cases} 3s, \\ 4s \rightarrow 3p \rightarrow 3s, \\ 3d \rightarrow 3p \rightarrow 3s. \end{cases}$$

16.21.

16.22.

16.23. Разрешен только переход ${}^2S_{1/2} \rightarrow {}^2P_{3/2}$.

16.24. Переходы $pd \ {}^1D \leftrightarrow sp \ {}^1P$ и $np^2 \ {}^3D \leftrightarrow np, n'p \ {}^3D$ запрещены правилом Лапорта (оба терма одинаковой четности). Остальные переходы разрешены.

16.25. Низший терм основной конфигурации атома углерода $1s^2 2s^2 2p^2$ есть 3P , другие термы этой конфигурации 1D и 1S метастабильны (переходы запрещены правилом Лапорта, а также по спину). Также метастабильным будет терм $1s^2 2s 2p^3 \ {}^5S$.

$$16.26. \ 1s^2 2s^2 2p^2 \ {}^3P \rightarrow \begin{cases} 1s^2 2s^2 2p ns \ {}^3P^o, \\ 1s^2 2s^2 2p nd \ {}^3PD^o. \end{cases}$$

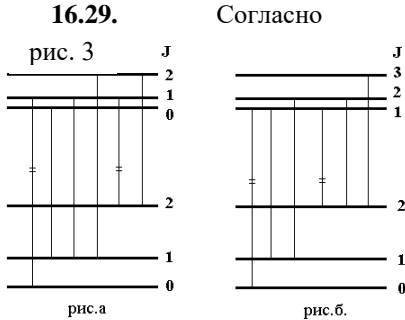
Возможны также переходы $1s^2 2s^2 2p^2 \ {}^3P \rightarrow 1s^2 2s 2p^3 \ {}^3S, {}^3PD$,

$$1s^2 2s^2 2p^2 \ {}^3P \rightarrow 1s^2 2s 2p^2 np \ {}^3S, {}^3PD, \ 1s^2 2s^2 2p^2 \ {}^3P \rightarrow 1s 2s^2 2p^3 \ {}^3S, {}^3PD.$$

16.27. В порядке возрастания энергии ${}^3P, {}^1D, {}^1S$. Переходы из ${}^1D, {}^1S$ запрещены правилом Лапорта и по спину.

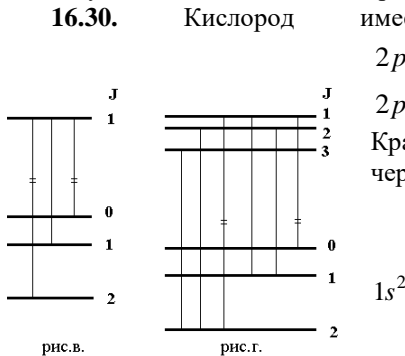
16.28. $1s^2 2s^2 2p^4 \ ^3P \rightarrow \begin{cases} 1s^2 2s^2 2p^3 \left[\begin{smallmatrix} 4S \\ 3S \end{smallmatrix} \right] ns \ ^3S^o, \\ 1s^2 2s^2 2p^3 \left[\begin{smallmatrix} 4S \\ 3D \end{smallmatrix} \right] nd \ ^3D^o. \end{cases}$ Отличие от переходов

в атоме углерода обусловлено различными родительскими термами возбужденного атома.



$1s^2 2s^2 2p^2 \ ^3P \rightarrow 1s^2 2s^2 2p ns \ ^3P^o$ и $1s^2 2s^2 2p^2 \ ^3P \rightarrow 1s^2 2s^2 2p nd \ ^3P^o$ имеют сходную тонкую структуру (см рис. а). Переход $J_1 = 0 \rightarrow J_2 = 0$ запрещен. Линии серии $1s^2 2s^2 2p^2 \ ^3P \rightarrow 1s^2 2s^2 2p nd \ ^3D^o$ также имеют шесть компонент и представлены на рис. б. Крайние

линии мультиплетов отмечены черточками.

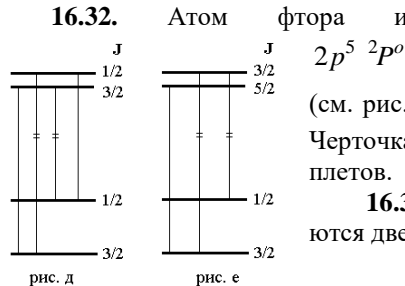


$2p^4 \ ^3P \rightarrow 2p^3 ns \ ^3S^o$ и $2p^4 \ ^3P \rightarrow 2p^3 nd \ ^3D^o$ (см. рис. в, г). Крайние линии мультиплетов отмечены черточками.

16.31. В атоме фтора имеем:

$$1s^2 2s^2 2p^5 \ ^2P \rightarrow \begin{cases} 1s^2 2s^2 2p^4 \left[\begin{smallmatrix} 3P \\ 3P \end{smallmatrix} \right] ns \ ^2P, \\ 1s^2 2s^2 2p^4 \left[\begin{smallmatrix} 3P \\ 3P \end{smallmatrix} \right] nd \ ^2P, \\ 1s^2 2s^2 2p^4 \left[\begin{smallmatrix} 3P \\ 3P \end{smallmatrix} \right] nd \ ^2D. \end{cases}$$

В скобках указан родительский терм. Хотя электроны испытывают те же переходы, что и в атоме алюминия, спектр оказывается более сложным из-за более сложного родительского терма.



$2p^5 \ ^2P^o \rightarrow 2p^4 ns \ ^2P$, $2p^5 \ ^2P^o \rightarrow 2p^4 nd \ ^2P$ (см. рис. д) и $2p^5 \ ^2P^o \rightarrow 2p^4 nd \ ^2D$ (см. рис. е). Черточками отмечены крайние линии мультиплетов.

16.33. В спектре поглощения азота имеются две серии:

$$1s^2 2s^2 2p^3 \ 4S^o \rightarrow \begin{cases} 1s^2 2s^2 2p^2 \left[\begin{smallmatrix} 3P \\ 3P \end{smallmatrix} \right] ns \ 4P, \\ 1s^2 2s^2 2p^2 \left[\begin{smallmatrix} 3P \\ 3P \end{smallmatrix} \right] nd \ 4P. \end{cases}$$

16.34. Обе серии (см. задачу 16.33) имеют тонкую структуру. Термы $4P$ с электроном nd лежат выше, нежели термы $4P$ с электроном ns .

16.35. В пределах одной конфигурации электромагнитные переходы запрещены правилом Лапорта. Поэтому рассмотрим только термы нижележащих конфигураций. Это $2p3d \ 1,3PDF^o$, $2p4s \ 1,3P^o$, $2p3p \ 1,3SPD$, $2p3s \ 1,3P^o$ и

$2p^2 \ 1SD, \ 3P$. По правилу Лапорта переходы возможны лишь в конфигурации противоположной четности. Учитывая правила отбора по спину и по орбитальному моменту, получим следующий набор разрешенных переходов:

$$2p4p \ 3D \rightarrow 2p3d \ 3PDF^o, \ 2p4p \ 3D \rightarrow 2p4s \ 3P^o, \ 2p4p \ 3D \rightarrow 2p3s \ 3P^o.$$

16.36. Возможны следующие переходы:

$$3p4d \ 1F^o \rightarrow 3p4p \ 1D, \ 3p4d \ 1F^o \rightarrow 3p^2 \ 1D.$$

16.37. Возможны следующие переходы:

$$2p^5 5d \ 3D^o \rightarrow 2p^5 5p \ 3PD, \ 2p^5 5d \ 3D^o \rightarrow 2p^5 4p \ 3PD,$$

$$2p^5 5d \ 3D^o \rightarrow 2p^5 3p \ 3PD, \ 2p^5 5d \ 3D^o \rightarrow 2p^5 4f \ 3DF.$$

16.38. Возможны следующие переходы:

$$2p^5 4s \ 3P^o \rightarrow 2p^5 3p \ 3S - \text{три компоненты тонкой структуры,}$$

$2p^5 4s \ 3P^o \rightarrow 2p^5 3p \ 3P, \ 2p^5 4s \ 3P^o \rightarrow 2p^5 3p \ 3D, -$ у всех переходов по 6 компонент тонкой структуры,

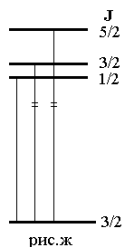
16.39.

16.40. Возможны переходы $2p^2 \ 3P \rightarrow 2p3s \ 3P^o$ - шесть компонент тонкой структуры, $2p^2 \ 1SD \rightarrow 2p3s \ 1P$ - одиночные линии.

16.41. Возможны переходы: $3s^2 3p \ 2P^o \rightarrow 3p^2 \left[\begin{smallmatrix} 3P \\ 3P \end{smallmatrix} \right] 3s \ 2P$ - четыре компоненты, $3s^2 3p \ 2P^o \rightarrow 3p^2 \left[\begin{smallmatrix} 1S \\ 3S \end{smallmatrix} \right] 3s \ 2S$ - две компоненты, $3s^2 3p \ 2P^o \rightarrow 3p^2 \left[\begin{smallmatrix} 1D \\ 3S \end{smallmatrix} \right] 3s \ 2D$ - три компоненты.

16.42.

16.43. Возможен только переход: $3p^3 \ 4S^o \rightarrow 3p^2 \left[\begin{smallmatrix} 3P \\ 4d \end{smallmatrix} \right] 4P$, 3 компоненты.



16.44. Возможны переходы $2p^3 4p^5 P \rightarrow 2p^3 [^4S] 4s^5 S$,
 $2p^3 4p^5 P \rightarrow 2p^3 [^4S] 3d^5 D$, $2p^3 4p^5 P \rightarrow 2p^3 [^4S] 3s^5 S$.

16.45.

16.46.

16.47.

16.48. Ортопозитроний. Основное состояние позитрония - S - состояние ($L = 0$), поэтому полный момент равен суммарному спину, равному нулю (пара-) и единице (ортопозитроний). По закону сохранения момента импульс парапозитроний может породить лишь четное число фотонов, ортопозитроний – нечетное.

16.49. Указание. Возможны переходы в состояния с противоположной четностью, т.е. в $n = 1, 3, 5, 7, 9$.

16.50.

16.51. Атом Томсона представляет собой гармонический осциллятор. В декартовой системе координат состояние электрона задается набором квантовых чисел n_x, n_y, n_z - числом квантов колебаний по каждой из осей. Правила отбора $\Delta n_{x,y,z} = \pm 1$. В спектре будет присутствовать единственная линия, соответствующая частоте колебаний электрона.

17. Рентгеновские спектры.

17.1. K – серию можно наблюдать начиная с лития, L – серию – начиная с натрия.

17.2 Нельзя, т.к. энергия связи K – электрона $\sim (Z-1)^2 Ry \approx 113$ кэВ.

$$\mathbf{17.3.} \quad \Delta E \approx \frac{\alpha^2 (Z-a')^4 Ry}{n^3 \ell(\ell+1)} \approx 100 \text{ эВ.}$$

17.4. Величина дублетного расщепления определяется как $\Delta\lambda = \frac{2\pi c}{\omega^2} \Delta\omega$. Поскольку энергия кванта $\hbar\omega \sim (Z-\sigma)^2 Ry$, а величина

расщепления $\Delta(\hbar\omega) \approx \frac{\alpha^2 (Z-a')^4 Ry}{n^3 \ell(\ell+1)}$, для $\Delta\lambda$ получим $\Delta\lambda \sim \frac{(Z-\sigma)^4}{(Z-a')^4} \approx 1$,

если $\sigma, a' \ll Z$.

$$\mathbf{17.5.} \quad E_K \approx (Z-1)^2 Ry \approx 72.5 \text{ кэВ.} \quad E(K_\alpha) = \frac{3}{4} E_K \approx 54.4 \text{ кэВ.}$$

$$\mathbf{17.6.} \quad Z = 1 + \sqrt{1/(3R\lambda/4)}. \text{ Кобальт } (Z = 27) \text{ и хром } (Z = 24).$$

$$\mathbf{17.7.} \quad W_K \approx 107.5 \text{ кэВ, } W_L \approx 119.7 \text{ кэВ.}$$

17.8. Для атомов урана ≈ 37 кэВ, для атомов свинца ≈ 61 кэВ.

$$\mathbf{17.9.} \quad R = \frac{36}{5} \frac{(\sqrt{1/\lambda_1 - 1/\lambda_2})^2}{(Z_1 - Z_2)^2} \approx 1.06 \cdot 10^5 \text{ см}^{-1}, \quad \sigma_L = \frac{Z_2 - Z_1 \sqrt{\lambda_1/\lambda_2}}{1 - \sqrt{\lambda_1/\lambda_2}} \approx 6.5.$$

17.10. p -электроны любой оболочки со спином, параллельным спину «дырки».

17.11. Поглощается за счет фотоэффекта с более высоких оболочек, на которых энергия связи электрона меньше энергии K_α - фотона.

17.12. Да, будет.

$$\mathbf{17.13.} \quad \Delta E \approx \frac{\alpha^2 (Z-a')^4 Ry}{n^3 \ell(\ell+1)} \approx \frac{\alpha^2 Z^4 Ry}{16}. \text{ Для урана } \Delta E = 3244 \text{ эВ, для}$$

свинца $\Delta E = 2047$ эВ, для ртути $\Delta E = 1854$ эВ.

$$\mathbf{17.14.} \quad \frac{1}{\lambda} \approx \frac{8}{9} (Z-1)^2 R, \quad \lambda \approx 0.164 \text{ \AA.}$$

17.15. Головная линия L - серии рентгеновского излучения имеет семь компонент.

18. Эффекты Зеемана и Пашена – Бака. Опыт Штерна и Герлаха.**18.1.**

состояние	3D_1	5F_1	${}^2D_{3/2}$	${}^4P_{1/2}$	${}^8F_{1/2}$	${}^4D_{1/2}$
Множитель Ланде	1/2	0	4/5	8/3	4	0

18.2. а) $g({}^3F_4) = 5/4, \bar{\mu}_J \downarrow \uparrow \vec{J}$,

б) $g({}^4D_{1/2}) = 0, \bar{\mu} \perp \vec{J}, \langle \mu_J \rangle = 0$,

в) $g({}^9H_1) = -1, \bar{\mu}_J \uparrow \uparrow \vec{J}$.

18.3. $\langle \mu_J \rangle = g\mu_B \sqrt{J(J+1)}$. $\langle \mu_J({}^3P_1) \rangle = \frac{3}{\sqrt{2}}\mu_B$, $\langle \mu_J({}^2D_{5/2}) \rangle = 3\sqrt{7/5}\mu_B$

18.4. $\langle \mu_J({}^3D_2) \rangle = \frac{7}{\sqrt{6}}\mu_B$, проекции $\mu_H = \mu_B g M_J$, $g = 7/6$,

$M_J = 0, \pm 1, \pm 2$.

18.5.**18.6.**

18.7. Да, может, если фактор Ланде $g = 0$.

18.8. Для состояния 3P_2 $|J| = \hbar\sqrt{6}$, проекция на некоторую выделенную ось z $J_z = 0, \pm \hbar, \pm 2\hbar$. Угол между \vec{J} и орбитальным моментом \vec{L} найдем исходя из соотношения: $\vec{S} = \vec{J} - \vec{L}$, или $S^2 = J^2 + L^2 - 2(\vec{J}\vec{L})$, откуда для косинуса угла между \vec{J} и \vec{L} получим:

$$\cos \alpha = \frac{J(J+1) + L(L+1) - S(S+1)}{2\sqrt{J(J+1)L(L+1)}} = \frac{\sqrt{3}}{2}, \alpha = \pi/6.$$

18.9.

18.10. $\Delta E_{\max} = g\mu_B H M_J = 2\mu_B H = 1.16 \cdot 10^{-4}$ эВ.

18.11. $|\mu_{\text{eff}}| = g\mu_B \sqrt{J(J+1)} = \mu_B 3\sqrt{6}/2$.

18.12. Состояние ${}^4D_{1/2}$ – не расщепится, ${}^2P_{1/2}$ – расщепится на два подуровня.

18.13. Атом, имевший скорость v_x (x – направление движения пучка), отклонится от оси на величину $\Delta z = \frac{F}{m} t^2 / 2$, где $t = L/v_x$ – время про-

лета магнита, $F = g\mu_B M_J \frac{dH}{dz}$ - сила, действующая на атом. Основное состояние атома $^2S_{1/2}$. Расщепление измеряется между точками экрана, соответствующими максимуму потока атомов, который согласно (одномерному) распределению Максвелла по скоростям вдоль оси x равен $j_x \sim v_x \exp(-Mv_x^2/2kT)$. Наибольший поток соответствует скорости $v_x^* = \sqrt{kT/M}$. Поэтому величина расщепления есть $2\Delta z = FL^2/kT \approx 2$ см.

$$18.14. \quad g_s = \frac{kT \cdot \Delta x}{\mu_B M_J l(l+2L) dH/dz} = 2.$$

18.15. Для вертикальной компоненты магнитного поля получим $\frac{dH}{dz} = \frac{g_{grav} M}{\mu_B g M_J} \approx 4$ Э/см; g_{grav} - ускорение свободного падения, M - масса атома. Остальные компоненты магнитного поля произвольны. Направление H_z и знак градиента также произвольны – в любом случае будет удерживаться половина атомов, имеющих соответствующее значение M_J .

18.16. На три компоненты.

18.17. Нет.

18.18. Максимальные значения проекций магнитных моментов равны $g\mu_B J$.

V	$^4F_{3/2}$	$3\mu_B/5$
Mn	$^6S_{5/2}$	$5\mu_B$
Fe	5D_4	$6\mu_B$

18.19. В слабом магнитном поле, если g -фактор отличен от нуля, число компонент определяется числом возможных значений проекции вектора \vec{J} на направление градиента магнитного поля. В сильном магнитном неоднородном поле число компонент расщепления определяется числом возможных значений суммы $M_L + 2M_S$. Например, для атома бора основное состояние есть $^2P_{1/2}$, поэтому в слабом магнитном поле пучок расщепится на две компоненты, а в сильном – на пять.

18.20.

18.21. Нижнее возбужденное состояние атома бериллия $1s^2 2s 2p \ ^3P_0$. Поэтому в слабом магнитном поле пучок не расщепится. В сильном поле

число компонент расщепления – 7, поскольку $M_L + 2M_S = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3$. Критическую величину магнитного поля можно оценить сопоставляя величину тонкого расщепления $\alpha^2 R_y$ с энергией взаимодействия атома с внешним магнитным полем $\mu_B H$.

18.22. В сильном поле пучок расщепится на пять компонент. В слабом магнитном поле пучок атомов в состоянии $2p_{1/2}$ расщепится на две компоненты, а пучок атомов в состоянии $2p_{3/2}$ – на четыре. Величина тонкого расщепления может быть найден по формуле Дирака $\Delta E = \alpha^2 R_y / 16$. Поэтому критическое поле есть $H^* = \Delta E / \mu_B \approx 10^4$ Э.

18.23. Расщепление не произойдет, если полный механический момент атома равен нулю. Такая ситуация реализуется для основных состояний атомов кремния (3P_0) и аргона (1S_0).

18.24.

18.25. В конфигурации pd нижний терм есть 3F , состоящий из трех состояний $J = 2, 3, 4$. Считая по правилу Ланде, что основное состояние есть 3F_2 , получим, что в слабом магнитном поле пучок расщепится на 5 компонент, в сильном поле – 11 компонент.

18.26. Пучок атомов в состоянии $^4D_{1/2}$ не расщепится. Такое состояние является основным, например, в трехэлектронной конфигурации $np^2 n'p$.

18.27. Расщепление пучка произойдет на 11 компонент. Такое состояние существует, например, в конфигурации $np^2 n'p$.

18.28.

18.29. В конфигурации $1s2s$ имеются состояния 1S_0 и 3S_1 . Расщепление произойдет на три компоненты, при этом несмещенный пучок дадут атомы в состоянии 1S_0 , а также атомы в состоянии 3S_1 с $M_J = 0$.

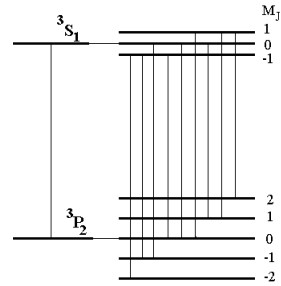
18.30. На две компоненты по числу возможных значений проекции полного механического момента на направление градиента магнитного поля.

18.31. В случаях а) и в) расщепление произойдет на 8 компонент (удвоение числа пучков при пролете через каждый прибор), в случае б) произойдет расщепление на 4 компоненты (при пролете через третий прибор, в котором градиент магнитного поля направлен также как во втором приборе, расщепления не будет).

18.32. Атом серебра имеет основное состояние $^2S_{1/2}$ и характеризуется чисто спиновым моментом количества движения $S = 1/2$, что и приводит к расщеплению пучка атомов серебра в основном состоянии при пролете через область неоднородного магнитного поля на две компоненты. В модели Бора в основном состоянии (на первой боровской орбите) электрон имеет магнитный момент, равный магнетону Бора, причем его проекция на ось квантования принимает два значения ($\pm\mu_B$) в зависимости от направления вращения по орбите. Поэтому с точки зрения модели Бора пучок атомов в низшем состоянии должен расщепиться в опыте Штерна-Герлаха на две компоненты.

18.33. Схема расщепления приведена на рисунке. Факторы Ланде верхнего и нижнего состояний равны $g_1 = 2$ и $g_2 = 3/2$ соответственно. Для величины расщепления имеем

$$\Delta\omega = \frac{\mu_B H}{\hbar} ((gM_J)_1 - (gM_J)_2) = \frac{eH}{2mc} \left\{ 0, \pm \frac{1}{2}, \pm 1, \pm \frac{3}{2}, 2 \right\}$$



18.34. Три и девять спектральных линий соответственно.

18.35.

18.36. Элементы с четным числом электронов ($Z = 2, 4, 6, 8$) имеют синглетные термы, при переходах между ними наблюдается нормальный эффект Зеемана. На тех же элементах можно наблюдать и аномальный эффект Зеемана при переходах между термами более высокой мультиплетности. Для элементов с нечетным числом электронов эффект Зеемана всегда аномальный.

18.37. На переходе 1 – нормальный, на остальных аномальный.

18.38. Крайними будут переходы $^3P_2(M_J = 0) \rightarrow ^3S_1(M_J = \pm 1)$, расщепленные на величину $\Delta\omega = 4\Delta\omega_L$. Поэтому $H^* = \frac{1}{4} \frac{2\pi\hbar c}{\mu_B} \frac{\Delta\lambda}{\lambda^2} \approx 1.2 \cdot 10^4$ Э.

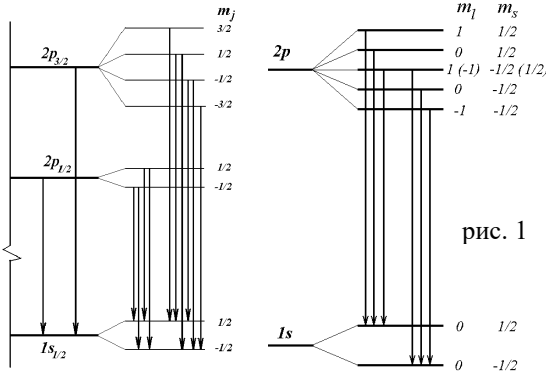
18.39. Критическое поле, при превышении которого будет наблюдаться эффект Пашена – Бака, есть $H = \frac{4\pi mc^2}{e} \frac{\Delta\lambda}{\lambda^2} \approx 10^7$ Э.

18.40. Головная линия серии натрия $^3P_{1/2,3/2} \rightarrow ^3S_{1/2}$ - дублет. В магнитном поле на низкочастотной компоненте дублета наблюдается 4 линии, на высокочастотной – шесть. Критическое поле $H^* \approx 3.7 \cdot 10^5$ Э.

18.41. На линиях, начинающихся с уровней с главным квантовым числом n , заметно превышающим величину

$$n^* \cong \left(\frac{\alpha^2 Z^4 R y}{\mu_B H} \right)^{1/3} \cong 20.$$

18.42. $n \cong 60$ (см. задачу 8.41).



18.44.

18.43. Такой переход, например, реализуется на L_{α} линии в атоме водорода. Переход от слабого поля (левый рисунок) к сильному (правый рисунок) реализуется когда величина зеемановского расщепления превышает мультиплетное.

рис. 1

$$g(^3F_2) = 2/3,$$

$g(^3D_1) = 1/2$. Смещение π -компонент равно $\Delta\omega_{\pi} = \Delta\omega_L(g_1 - g_2)M_J$, M_J - значения проекции меньшего из моментов. Спектральная линия $^3F_2 \rightarrow ^3D_1$ расщепляется на девять компонент с расстоянием между крайними π -компонентами равным $\Delta\omega_L/3$.

18.44.

18.45. $g(^4D_{1/2}) = 0$, $g(^4P_{1/2}) = 8/3$. Линия расщепится на две компоненты. Схема переходов изображена на рисунке 2.

18.46. На переходе между синглетами наблюдается нормальный эффект Зеемана.

18.47. Указание. Имеется в виду переход $3s^2 3p \ ^2P_{1/2,3/2} \leftrightarrow 3s^2 4s \ ^2S_{1/2}$.

18.48. Три линии, $\Delta\omega = \Delta\omega_L \{0, \pm 5/2\}$.

18.49. Будет наблюдаться три, девять и три линии соответственно.

18.50. Будет наблюдаться три, девять и три линии соответственно.

18.51. Нижние термы конфигураций есть $1s2p \ ^3P$ и $1s2s \ ^3S$. На переходах $^3P_0 \rightarrow ^3S_1$, $^3P_1 \rightarrow ^3S_1$, $^3P_2 \rightarrow ^3S_1$ будет наблюдаться три, шесть и де-

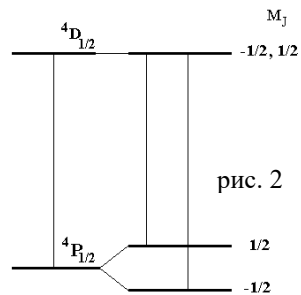


рис. 2

вать линий соответственно. Мы учли, что при $\Delta J = 0$ переход $M_J = 0 \rightarrow M_J = 0$ запрещен.

18.52. Указание. В конфигурации $4s^2$ единственный терм - 1S . Поэтому необходимо рассмотреть эффект Зеемана на переходе $4snp \ ^1P_1 \rightarrow 4s^2 \ ^1S_0$.

18.53.

18.54. Указание. Для рассматриваемой линии магнитное поле $H = 1$ кЭ является сильным.

18.55. Mg ($Z=12$), Ar ($Z=18$), Ca ($Z=20$).

18.56. $g(^5G_2) = 1/3$, $g(^5F_1) = 0$. В спектре будет наблюдаться пять компонент.

18.57. Резонансное поглощение СВЧ мощности наблюдается на частоте перехода между зеемановскими подуровнями $\omega = g \frac{eH}{2mc} = 2\Delta\omega_L$.

18.58.

18.59. Спектральная линия в слабом магнитном поле расщепляется на три компоненты если: а) переход происходит между синглетными термами (нормальный эффект Зеемана), б) факторы Ланде верхнего и нижнего состояний равны, в) квантовое число J одного из состояний равно нулю, г) фактор Ланде одного из состояний равен нулю, а квантовое число J другого состояния $J = 1$.

18.60. При $S \ll L$ имеем $J \approx L$ и $g \approx 1$.

18.61.

19. Основы физики молекул.

19.1. $\psi(r, \theta, \varphi) = \Phi(r, \theta) \exp(i\Lambda\varphi)$, где $\Lambda = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ - квантовое число, определяющее проекцию орбитального момента на ось z (ось системы): $L_z = \hbar\Lambda$. Такое состояние будет стационарным, если волновая функция $\Phi(r, \theta)$ удовлетворяет стационарному уравнению Шредингера:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial^2 r\Phi}{\partial r^2} \right) - \frac{\hbar^2}{2mr^2} \left(\frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \sin\theta \frac{\partial\Phi}{\partial\theta} - \frac{\Lambda^2}{\sin^2\theta} \Phi \right) + V(r, \theta)\Phi = E\Phi.$$

19.2. а) $1s\sigma$, ${}^2\Sigma$, б) $2p\sigma$, ${}^2\Sigma$, $2p\pi$, ${}^2\Pi$.

19.3. а) $(1s\sigma)^2$, ${}^1,3\Sigma$, б) $1s\sigma 2p\sigma$, ${}^1,3\Sigma$, $1s\sigma 2p\pi$, ${}^1,3\Pi$.

19.4. Рассмотрим случай а). Поскольку основные термы атомов есть 3P и 2S соответственно, то они могут образовать молекулярные термы ${}^2,4\Sigma$, ${}^2,4\Pi$.

19.5. Основной терм атома фтора - $2p^5 {}^2P$, нижний возбужденный терм атома натрия - $3p {}^2P$, поэтому молекулярные термы ${}^1,3\Sigma, \Pi, \Delta$.

19.6.

19.7.

19.8. ${}^1,3\Sigma, \Pi$.

19.9. Вблизи положения равновесия ($R = R_0$) потенциалы приближенно являются гармоническими. Частоты колебаний в гармоническом приближении для потенциалов Морзе и Кратцера равны $\Omega = \sqrt{2D\alpha^2/\mu}$ и $\Omega = \sqrt{2D/(\mu R_0^2)}$ соответственно, $\mu = M/2$ - приведенная масса молекулы. Энергия нулевых колебаний есть $\hbar\Omega/2$. Условия применимости полученных выражений (условие справедливости гармонического приближения) есть $\hbar\Omega \ll D$, откуда $\frac{\hbar^2\alpha^2}{\mu D} \ll 1$ для потенциала Морзе и $\frac{\hbar^2}{\mu R_0^2 D} \ll 1$ для потенциала Кратцера.

19.10. В условиях справедливости гармонического приближения характерная ширина ядерного волнового пакета есть $\Delta R \cong \sqrt{\hbar/\mu\Omega}$. Отсюда

для потенциала Морзе $\Delta R \cong \sqrt[4]{\frac{\hbar^2}{\mu D \alpha^2}}$, а для потенциала Кратцера

$\Delta R \cong \sqrt[4]{\frac{\hbar^2 R_0^2}{\mu D}}$. В условиях справедливости гармонического приближения выполнено условие $\Delta R \ll R_0$.

19.11. $\Delta R \cong \sqrt{\hbar/\mu\Omega} \approx 0.12 \text{ \AA}$. Как видно, $\Delta R \ll R$.

19.12. Указание. Для ядерной волновой функции имеем уравнение

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2\psi + D\left(\frac{R_0^2}{R^2} - 2\frac{R_0}{R}\right)\psi = E\psi.$$

Отделяя угловую часть волновой функции $\psi = \frac{\chi(R)}{R} Y_{JM}(\theta, \varphi)$, для радиальной функции $\chi(R)$ получим

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2\chi}{dR^2} + D\left(\frac{R_0^2}{R^2} - 2\frac{R_0}{R}\right)\chi + \frac{\hbar^2 J(J+1)}{2\mu R^2}\chi = E\chi. \quad (1)$$

Вводя эффективное квантовое число J^* с помощью соотношения $\frac{\hbar^2 J^*(J^*+1)}{2\mu} = DR_0^2 + \frac{\hbar^2 J(J+1)}{2\mu}$, уравнение (1) сведем к виду уравнения для радиальной волновой функции в задаче Кеплера, которое можно решить в приближении квантового дефекта. Для уровней энергии получим

$$E_{v,J} = -\frac{m}{2\hbar^2} (2DR_0)^2 \frac{1}{(v+\Delta_J)^2}, \text{ где } \Delta_J = \frac{1}{2} + \sqrt{\frac{2\mu DR_0^2}{\hbar^2} + (J+1/2)^2}. \quad (2)$$

Считая, что $v, J \ll 2\mu DR_0^2/\hbar^2$ (не слишком сильное колебательное и вращательное возбуждение), из (2) получим

$$E_{v,J} = -D + \hbar\Omega(v+1/2) + \frac{\hbar^2(J+1/2)^2}{2\mu R_0^2} - \frac{3\hbar^2(v+1/2)^2}{2\mu R_0^2} - \frac{3\hbar^3(J+1/2)(v+1/2)}{2\mu^2 R_0^4 \Omega},$$

где $\Omega = \sqrt{2D/\mu R_0^2}$ - частота молекулярных колебаний. В полученном выражении второе и третье слагаемые дают энергию колебательного и вращательного движения, четвертое - учитывает ангармонизм колебаний, пятое дает поправку к энергии, связанную с влиянием колебаний и вращения ядер друг на друга.

19.13. Эффективный потенциал, в котором происходит радиальное движение ядер (см. задачу 19.12), есть

$$V^{(eff)}(R) = D\left(\frac{R_0^2}{R^2} - 2\frac{R_0}{R}\right) + \frac{\hbar^2 J(J+1)}{2\mu R^2},$$

Положение равновесия есть $R^* = R_0\left(1 + \frac{E_r(J)}{D}\right)$, $E_r(J) = \frac{\hbar^2 J(J+1)}{2\mu R_0^2}$ и зависит, в том числе, от вращательного квантового числа. Разлагая потенциал

вблизи точки равновесия в ряд с точностью до квадратичных членов, получим

$$V^{(eff)}(R) = -2D \left(\frac{R_0}{R^*} - \frac{R_0^2}{(R^*)^2} \right) + E_r(J) \frac{R_0^2}{(R^*)^2} + \frac{D + E_r(J)}{(R^*)^4} R_0^2 (R - R^*)^2, \quad \text{или}$$

удерживая только члены первого порядка по $E_r(J)$:

$$V^{(eff)}(R) = -D + E_r(J) + \frac{D - 3E_r(J)}{R_0^2} (R - R^*)^2.$$

Уровни энергии в таком потенциале определяются как

$$E_{v,J} = -D + E_r(J) + \hbar\Omega^*(v + 1/2),$$

где $\Omega^* = \Omega \left(1 - \frac{3E_r(J)}{2D} \right)$, $\Omega = \sqrt{2D/\mu R_0^2}$. Окончательно получаем

$$E_{v,J} = -D + \hbar\Omega(v + 1/2) + \frac{\hbar^2 J(J+1)}{2\mu R_0^2} - \frac{3\hbar^3 J(J+1)(v + 1/2)}{2\mu^2 R_0^4 \Omega}.$$

Ангармонизм колебаний в решении этой задачи не учитывается.

19.14. Импульс ядра после поглощения (или излучения) γ - кванта $p \cong E_\gamma/c$, кинетическая энергия ядра $T \sim E_\gamma^2/Mc^2 \sim 10^2$ эВ, что значительно больше энергии диссоциации. Молекула диссоциирует.

19.15. С учетом анггармоничности колебаний молекулы

$$E_v = \hbar\Omega(v + 1/2) - \kappa\hbar\Omega(v + 1/2)^2.$$

«Расстояние» между соседними колебательными уровнями есть

$$\Delta E_v = E_v - E_{v-1} = \hbar\Omega(1 - 2\kappa(v + 1)),$$

т.е. ΔE_v линейно убывает с ростом колебательного квантового числа.

Условие $\Delta E_v = 0$ соответствует диссоциации, при этом $v_{\max} = 1/2\kappa - 1 \approx 16$

. Для энергии диссоциации получим $E_D = E_{v_{\max}} - E_{v=0} \approx \hbar\Omega/4\kappa \approx 4.5$ эВ.

19.16. Поскольку для всех трех молекул электронные термы молекулы практически совпадают, частоты их колебаний соотносятся с их приведенными массами как

$$\Omega_H : \Omega_D : \Omega_T = \frac{1}{\sqrt{\mu_H}} : \frac{1}{\sqrt{\mu_D}} : \frac{1}{\sqrt{\mu_T}} = 1 : \frac{1}{\sqrt{2}} : \frac{1}{\sqrt{3}}.$$

19.17. Величина приведенной массы в молекуле, состоящей из разных атомов, определяется в основном массой легкого атома. Поэтому в молекулах DCl^{35} и HCl^{35} отношение приведенных масс близко к отношению приведенных масс частот молекул D_2 и H_2 . Тяжелый атом Cl^{35} практически неподвижен.

19.18. Запишем энергию диссоциации молекул водорода и дейтерия в виде $D_H = U_0 - \hbar\Omega_H/2$, $D_D = U_0 - \hbar\Omega_D/2$, где U_0 - глубина ямы. Тогда

$D_D - D_H = (\hbar\Omega_H - \hbar\Omega_D)/2$. Учитывая, что $\Omega_D = \Omega_H/\sqrt{2}$, получим

$$\hbar\Omega_H = \frac{2\sqrt{2}}{\sqrt{2}-1}(D_D - D_H) \approx 0.55 \text{ эВ.}$$

19.19. Энергия диссоциации молекул водорода и дейтерия есть $D_H = U_0 - \hbar\Omega_H/2$, $D_D = U_0 - \hbar\Omega_D/2$, где U_0 - глубина ямы, а

$\hbar\Omega_H/2 = E_0$. Поскольку $\Omega_H/\Omega_D = \sqrt{2}$, для энергии диссоциации молекулы дейтерия получим $D_D = D_H + \frac{\hbar\Omega_H}{2}(1 - 1/\sqrt{2}) \approx 4.54 \text{ эВ.}$

19.20. Средняя энергия колебательной энергии молекул при температуре T есть $E_v = \hbar\Omega/2 + \frac{\hbar\Omega}{\exp(\hbar\Omega/kT) - 1}$. Поэтому колебательный вклад в

теплоемкость двухатомного газа в пересчете на одну молекулу есть

$$C_v = \frac{dE_v}{dT} = k \left(\frac{\hbar\Omega}{kT} \right)^2 \frac{\exp(\hbar\Omega/kT)}{(\exp(\hbar\Omega/kT) - 1)^2}.$$

К этой величине надо добавить еще вклад в теплоемкость, обусловленный поступательной и вращательной степенями свободы. Считая поступательное движение молекул и вращение классическими, получим

$$C = \frac{5}{2}k + C_v.$$

Отметим, что при комнатных температурах ($\hbar\Omega \gg kT$)

$C_v \approx k \left(\frac{\hbar\Omega}{kT} \right)^2 \exp(-\hbar\Omega/kT) \ll k$, т.е. колебательная степень свободы «за-

морожена», т.е. не вносит вклад в теплоемкость. Наоборот, в пределе высоких температур ($kT \gg \hbar\Omega$) $C_v \approx k$, что соответствует классической статистической теории. Отметим, однако, что в этом случае уже происходит диссоциация молекул.

19.21. Вклад колебательной степени свободы в величину теплоемкости, очевидно, равен $C_v^{(H)} = 0.2k$. Вводя обозначение $\zeta = \hbar\Omega_H/kT$, получим следующее трансцендентное уравнение для определения колебательной частоты молекулы водорода

$$\zeta^2 \frac{\exp(\zeta)}{(\exp(\zeta) - 1)^2} \approx \zeta^2 \exp(-\zeta) \approx 0.2.$$

Приближенное решение этого уравнения $\zeta^* \approx 4.71$, откуда $\hbar\Omega_H = 4.71kT$. Поскольку $\Omega_D = \Omega_H/\sqrt{2}$, величина $\zeta_D = \hbar\Omega_D/kT \approx 3.33$. Для колебательной теплоемкости дейтерия тогда получаем $C_v^{(D)} \approx 0.4k$, а полная теплоемкость дейтерия есть $C_D \approx 2.9k$.

19.22. Так как $\Omega_0 = \sqrt{k/\mu_0}$, где $\mu_0 = M_1M_2/(M_1 + M_2)$, то $\Omega = \sqrt{k/\mu}$, где $\mu = \frac{(M_1 + \Delta M_1)M_2}{M_1 + \Delta M_1 + M_2} \approx \mu_0 \left(1 + \frac{M_2\Delta M_1}{M_1(M_1 + M_2)}\right)$.

В результате получаем

$$\Omega = \Omega_0 \left(1 - \frac{1}{2} \cdot \frac{M_2\Delta M_1}{M_1(M_1 + M_2)}\right), \quad \Delta\Omega = \Omega - \Omega_0 = -\frac{1}{2}\Omega_0 \frac{M_2\Delta M_1}{M_1(M_1 + M_2)}.$$

19.23. Частоты фиолетового и красного спутников равны $\omega_a = \omega + \Omega$ и $\omega_c = \omega - \Omega$, где ω - частота возбуждающего спектр КР излучения. Отсюда находим $\omega = \pi c(1/\lambda_a - 1/\lambda_c) \approx 4.8 \cdot 10^{14} \text{ с}^{-1}$.

19.24. В состоянии термодинамического равновесия отношение заселенностей $N_{v=1}/N_{v=0}$ колебательных состояний с квантовыми числами $v=1$ и $v=0$ есть $N_{v=1}/N_{v=0} = \exp(-\hbar\Omega/kT)$. Поскольку отношение интенсивностей спутников пропорционально отношению населенностей, получаем $\exp(-\hbar\Omega/kT) = \eta$, откуда $\Omega = -kT \ln(\eta)/\hbar \approx 2.9 \cdot 10^{14} \text{ с}^{-1}$.

19.25. Длины волн λ , λ_a , λ_s и $\Lambda = 2\pi c/\Omega$ связаны между собой соотношениями

$$1/\lambda - 1/\Lambda = 1/\lambda_c \quad \text{и} \quad 1/\lambda + 1/\Lambda = 1/\lambda_a.$$

Отсюда $\lambda_c = \frac{\lambda}{1 - \lambda\Omega/2\pi c} \approx 3873 \text{ \AA}$, $\lambda_a = \frac{\lambda}{1 + \lambda\Omega/2\pi c} \approx 3451 \text{ \AA}$.

$$\mathbf{19.26.} \quad R_0 = \left(\frac{\hbar}{2\pi\mu c \Delta\nu}\right)^{1/2} \approx 1.4 \text{ \AA}.$$

19.27. Поскольку $E_r = \frac{\hbar^2}{2\mu R^2} J(J+1)$, то $E_r^{(1)}/E_r^{(2)} = \mu_2/\mu_1$, где μ_1, μ_2 - приведенные массы молекул.

19.28. Пусть \vec{R}_1 и \vec{R}_2 - координаты каждого из ядер. Тогда, вводя координаты центра масс $\vec{R} = (M_1\vec{R}_1 + M_2\vec{R}_2)/(M_1 + M_2)$ и относительного движения $\vec{R} = \vec{R}_1 - \vec{R}_2$, для \vec{R}_1 и \vec{R}_2 получим

$$\vec{R}_1 = \vec{\mathfrak{R}} + \frac{M_2}{M_1 + M_2} \vec{R}, \quad \vec{R}_2 = \vec{\mathfrak{R}} - \frac{M_1}{M_1 + M_2} \vec{R}.$$

Здесь для H_2^+ $M_1 = M_2 = m_p$, а для HD^+ $M_2 = 2M_1 = 2m_p$ (m_p - масса протона). Дипольный момент ядерной подсистемы молекулы равен $\vec{d} = e(\vec{R}_1 + \vec{R}_2)$, откуда находим

$$\vec{d}_{H_2^+} = 2e\vec{\mathfrak{R}}, \quad \vec{d}_{HD^+} = 2e\vec{\mathfrak{R}} + e\vec{R}/3,$$

или в системе отсчета связанной с центром масс $\vec{d}_{H_2^+} = 0$ и $\vec{d}_{HD^+} = e\vec{R}/3$.

Как видно, в гомоядерной молекуле дипольный момент ядерной подсистемы равен нулю, что делает невозможными колебательно-вращательные переходы в таких молекулах в пределах одного электронного терма.

19.29. Схема указанного перехода приведена на рисунке. Очевидно, вероятность перехода без изменения колебательного состояния молекулы можно определить как

$$W = \left| \int \psi_{v=0}(R) \phi_{v=0}(R) dR \right|^2, \quad (1)$$

где функции ψ_v и ϕ_v описывают колебательные состояния молекулы на верхнем и нижнем терме соответственно. В осцилляторном приближении интеграл (1) запишется в виде

$$W = \left| \frac{1}{\Delta R \sqrt{\pi}} \int \exp\left(-\frac{(R - R_g)^2}{2(\Delta R)^2}\right) \exp\left(-\frac{(R - 2R_g)^2}{2(\Delta R)^2}\right) dR \right|^2$$

(ΔR - ширина волнового пакета в основном состоянии) или

$$W = \left| \frac{1}{\Delta R \sqrt{\pi}} \int \exp\left(-\frac{\zeta^2}{2(\Delta R)^2}\right) \exp\left(-\frac{(\zeta - R_g)^2}{2(\Delta R)^2}\right) d\zeta \right|^2 \approx \exp(-\zeta_0^2/2),$$

где $\zeta_0 = R_g / \Delta R$. Если ширина пакета меньше межъядерного расстояния R_g , то при переходе будет происходить эффективное колебательное возбуждение.

19.30. Оценивая величину матричного элемента дипольного оператора, связывающего различные колебательные состояния молекулы как

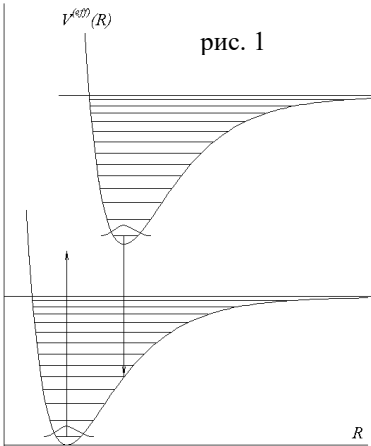


рис. 1

$d = e\sqrt{\hbar/\mu\Omega}$ (μ - приведенная масса молекулы, Ω - частота молекулярных колебаний), для времени жизни получим

$$\tau \sim \left(\frac{\Omega^3}{\hbar c^3} d^2 \right)^{-1} \sim \left(e^2 \Omega^2 / \mu c^3 \right)^{-1} \approx 0.5 \text{ с.}$$

19.31. В твердом теле эффект расширения при нагревании связан с увеличением среднего (равновесного) расстояния между атомами в процессе увеличения энергии колебательного возбуждения с увеличением температуры (см. рис.), обусловленный асимметрией формы потенциальной кривой. Считая колебания малыми, разложим потенциал взаимодействия в ряд по малому параметру $\xi = \alpha(R - R_0) \ll 1$ вблизи положения равновесия:

$$V(R) \cong D\alpha^2(R - R_0)^2(1 - \alpha(R - R_0)).$$

Считая, что энергия осциллятора равна kT , найдем диапазон изменений межатомного расстояния из соотношения: $V(R) = kT$ или

$$\xi^2(1 - \xi) = kT/D.$$

Приближенное решение этого уравнения имеет вид

$$\xi_{\max} = \alpha(R_{\max} - R_0) = \sqrt{\frac{kT}{D}} \left(1 + \frac{1}{2} \sqrt{\frac{kT}{D}} \right),$$

$$\xi_{\min} = \alpha(R_{\min} - R_0) = -\sqrt{\frac{kT}{D}} \left(1 - \frac{1}{2} \sqrt{\frac{kT}{D}} \right).$$

Для среднего значения межатомного расстояния получим

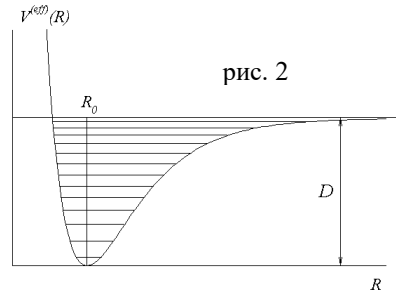
$$R^* = (R_{\min} + R_{\max})/2 = R_0 + \frac{kT}{2\alpha D}.$$

Получаем, что относительное увеличение межъядерного расстояния есть

$$\frac{\Delta R}{R_0} = \frac{R^* - R_0}{R_0} = \gamma T, \text{ где } \gamma = \frac{k}{2\alpha R D} \approx 10^{-4} \text{ град}^{-1} - \text{линейный коэффициент}$$

расширения.

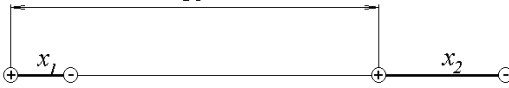
19.32. Рассмотрим следующую модель. Пусть имеются два атома (линейных осциллятора), удаленных друг от друга на расстояние R . Пусть колебания электронов происходят в направлении прямой, соединяющей атомы, а x_1 и x_2 — их смещения относительно положения равновесия,



причем $x_1, x_2 \ll R$. Пусть также ω_0 — частота колебаний атомных электронов. Запишем потенциальную энергию системы в виде

$$V = -\frac{e^2}{R-x_1} - \frac{e^2}{R+x_2} + \frac{e^2}{R} + \frac{e^2}{R-x_1+x_2} \cong -\frac{2e^2 x_1 x_2}{R^3} = -\frac{2d_1 d_2}{R^3}.$$

рис. 3



Таким образом, в рассматриваемом случае взаимодействие атомов представимо в виде взаимодействия двух диполей.

Для функции Гамильтона имеем:

$$H = \frac{1}{2} m \dot{x}_1^2 + \frac{m \omega_0^2 x_1^2}{2} + \frac{1}{2} m \dot{x}_2^2 + \frac{m \omega_0^2 x_2^2}{2} - 2 \frac{e^2 x_1 x_2}{R^3}.$$

Вводя новые координаты

$$\xi = \frac{x_1 + x_2}{\sqrt{2}}, \quad \eta = \frac{x_1 - x_2}{\sqrt{2}},$$

перепишем функцию Гамильтона в виде

$$H = \frac{1}{2} m \dot{\xi}^2 + \frac{m \omega_0^2}{2} \left(1 - \frac{2e^2}{m \omega_0^2 R^3} \right) \xi^2 + \frac{1}{2} m \dot{\eta}^2 + \frac{m \omega_0^2}{2} \left(1 + \frac{2e^2}{m \omega_0^2 R^3} \right) \eta^2.$$

Мы получили функцию Гамильтона двух независимых осцилляторов с частотами

$$\omega_{\pm} = \omega_0 \sqrt{1 \pm \frac{2e^2}{m \omega_0^2 R^3}}.$$

Разлагая корень в ряд до второго порядка малости, имеем

$$\omega_{\pm} \cong \omega_0 \left(1 \pm \frac{e^2}{m \omega_0^2 R^3} - \frac{e^4}{2 m^2 \omega_0^4 R^6} \right).$$

С точки зрения квантовой теории основное состояние систем двух осцилляторов характеризуется энергией

$$E = E_+ + E_- = \hbar \omega_+ / 2 + \hbar \omega_- / 2 = \hbar \omega_0 \left(1 - \frac{e^4}{2 m^2 \omega_0^4 R^6} \right).$$

Мы видим, что энергия системы зависит степенным образом от межъядерного расстояния, причем потенциал взаимодействия есть

$$U(R) = -C/R^6.$$

Справочные данные

Основные физические постоянные

Скорость света в вакууме	$c = 2.998 \cdot 10^{10}$ см/с
Гравитационная постоянная	$G = 6.67 \cdot 10^{-8}$ см ³ /г.с ²
Постоянная Больцмана	$k = 1.381 \cdot 10^{-16}$ эрг/град
Заряд электрона	$e = 4.803 \cdot 10^{-10}$ абс. ед.
Масса электрона	$m = 0.911 \cdot 10^{-27}$ г
Энергия покоя электрона	$m = 0.511$ МэВ
Масса протона	$M = 1.673 \cdot 10^{-24}$ г
Энергия покоя протона	$Mc^2 = 938.28$ МэВ
Отношение масс протона и электрона	$M/m = 1836.15$
Объемная постоянная Стефана-Больцмана	$\alpha = 7.57 \cdot 10^{-15}$ эрг/(см ³ град ⁴)
Поверхностная постоянная Стефана-Больцмана	$\sigma = 5.67 \cdot 10^{-5}$ эрг/(с.см ² .град ⁴)
Постоянная Планка	$\hbar = 1.0546 \cdot 10^{-27}$ эрг.с $h = 6.626 \cdot 10^{-27}$ эрг.с
Постоянная Ридберга (для бесконечной массы ядра)	$R_H = 109737$ см ⁻¹
Постоянная Ридберга (для атома водорода)	$R_H = 109677$ см ⁻¹
Ридберг	$Ry = me^4/2\hbar^2 = 13.606$ эВ
Боровский радиус	$a_0 = \hbar^2/me^2 = 0.529 \cdot 10^{-8}$ см
Классический радиус электрона	$r_e = e^2/mc^2 = 2.82 \cdot 10^{-13}$ см
Комптоновская длина волны электрона	$\Lambda_e = 2\pi\hbar/mc = 2.426 \cdot 10^{-10}$ см
Постоянная тонкой структуры	$\alpha = e^2/\hbar c = 1/137.036$
Магнетон Бора	$\mu_B = e\hbar/2mc = 0.927 \cdot 10^{-20}$ эрг/Гс
Ядерный магнетон	$\mu_N = e\hbar/2Mc = 5.051 \cdot 10^{-24}$

	эрг/Гс
--	--------

Соотношение между спектральными и энергетическими единицами

Единица измерения	$\tilde{\nu}$, см ⁻¹	λ , см	E , эрг	E , эВ
1 см ⁻¹	-	1	$1.9864 \cdot 10^{-16}$	$1.2398 \cdot 10^{-4}$
1 эрг	$5.0341 \cdot 10^{15}$	$1.9864 \cdot 10^{-16}$	-	$6.2415 \cdot 10^{11}$
1 эВ	8065.54	$1.2398 \cdot 10^{-4}$	$1.6022 \cdot 10^{-12}$	-

Приставки для обозначения кратных и дольных единиц измерения

приставка	Числовое значение	Обозначение (русское)	Обозначение (международное)
Зепто	10^{-21}	з	z
Атто	10^{-18}	а	a
Фемто	10^{-15}	ф	f
Пико	10^{-12}	п	p
Нано	10^{-9}	н	n
Микро	10^{-6}	мк	μ
Милли	10^{-3}	м	m
Санتي	10^{-2}	с	c
Деци	10^{-1}	д	d
Кило	10^3	К	K
Мега	10^6	М	M
Гига	10^9	Г	G
Тера	10^{12}	Т	T
пета	10^{15}	П	P

Некоторые интегралы

$$1. \quad \int_0^{\infty} \frac{x^n dx}{e^x - 1} = \begin{cases} \pi^2/6, & n = 1, \\ 2.404, & n = 2, \\ \pi^4/15, & n = 3, \\ 24.9, & n = 4. \end{cases}$$

$$2. \quad \int_0^{\infty} x^n \exp(-x) dx = n!, \quad n > 0 \text{ - целое.}$$

$$3. \quad \text{Интеграл Пуассона} \quad \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-x^2) dx = \sqrt{\pi}.$$

4. Γ -функция Эйлера $\Gamma(p) = \int_0^{\infty} x^{p-1} e^{-x} dx$.

$$\Gamma(p+1) = p\Gamma(p), \quad \Gamma(2) = \Gamma(1) = 1, \quad \Gamma(1/2) = \sqrt{\pi}.$$

Полиномы Эрмита.

Общее выражение для полиномов Эрмита:

$$H_n(\zeta) = (-1)^n e^{\zeta^2} \frac{d^n}{d\zeta^n} (e^{-\zeta^2}).$$

В частности, $H_0(\zeta) = 1$, $H_1(\zeta) = 2\zeta$, $H_2(\zeta) = 4\zeta^2 - 2$, $H_3(\zeta) = 8\zeta^3 - 12\zeta$.

Нормировка и ортогональность

$$\int_{-\infty}^{\infty} H_m(x) H_n(x) \exp(-x^2) dx = 2^n n! \sqrt{\pi} \delta_{mn}.$$

Рекуррентные соотношения для полиномов Эрмита

$$\zeta H_n(\zeta) = n H_{n-1}(\zeta) + \frac{1}{2} H_{n+1}(\zeta), \quad \frac{dH_n(\zeta)}{d\zeta} = 2n H_{n-1}(\zeta).$$

Сферические функции.

Общее представление $Y_{lm}(\theta, \varphi) = \Theta_{lm}(\theta) \Phi_m(\varphi)$,

$$\text{где } \Theta_{\ell m}(\theta) = (-1)^m \sqrt{\frac{2\ell+1}{2} \frac{(\ell-m)!}{(\ell+m)!}} \cdot P_{\ell}^{|m|}(\cos\theta),$$

$$P_{\ell}^m(x) = (1-x^2)^{m/2} \frac{d^{\ell+m}}{dx^{\ell+m}} (x^2-1)^{\ell} - \text{присоединенные полиномы}$$

Лежандра ($m \geq 0$),

$$\Phi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(im\varphi).$$

Нормировка и ортогональность

$$\int Y_{\ell m}^*(\theta, \varphi) Y_{\ell' m'}(\theta, \varphi) \sin\theta d\theta d\varphi = \delta_{\ell\ell'} \delta_{mm'}.$$

В частности,

$$Y_{00}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{1}{4\pi}}; \quad Y_{10}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos(\theta); \quad Y_{1,\pm 1}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin(\theta) e^{\pm i\varphi},$$

$$Y_{2,0}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{5}{4\pi}} \left(\frac{1}{2} (3\cos^2(\theta) - 1) \right), \quad Y_{2,\pm 1}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{5}{24\pi}} \sin(\theta) \cos(\theta) e^{\pm i\varphi},$$

$$Y_{2,\pm 2}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{3}{48\pi}} \sin^2(\theta) e^{\pm 2i\varphi}.$$

Разложение $\frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}$ по сферическим функциям

$$\frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} = \begin{cases} \frac{4\pi}{r_1} \sum_{\ell m} \frac{1}{2\ell + 1} \left(\frac{r_2}{r_1}\right)^\ell Y_{\ell m}^*(\theta_1, \varphi_1) Y_{\ell m}(\theta_2, \varphi_2), & r_1 > r_2, \\ \frac{4\pi}{r_2} \sum_{\ell m} \frac{1}{2\ell + 1} \left(\frac{r_1}{r_2}\right)^\ell Y_{\ell m}^*(\theta_1, \varphi_1) Y_{\ell m}(\theta_2, \varphi_2), & r_1 < r_2. \end{cases}$$

Здесь (θ_1, φ_1) и (θ_2, φ_2) - полярный и азимутальный углы векторов \vec{r}_1 и \vec{r}_2 .

Разложение плоской волны по сферическим функциям

$$\exp(i\vec{k}\vec{r}) = 4\pi \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{\ell} i^\ell j_\ell(kr) Y_{\ell m}^*(\theta_k, \varphi_k) Y_{\ell m}(\theta, \varphi),$$

где θ_k, φ_k и θ, φ - углы, задающие ориентацию векторов \vec{k} и \vec{r} в пространстве, $j_\ell(\xi)$ - сферическая функция Бесселя. В частности

$$j_0(\xi) = \frac{\sin \xi}{\xi}, \quad j_1(\xi) = \frac{\sin \xi}{\xi^2} - \frac{\cos \xi}{\xi}.$$

Оператор Лапласа:

а) в декартовых координатах

$$\nabla^2 \psi = \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2};$$

б) в цилиндрических координатах

$$\nabla^2 \psi = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2};$$

в) в сферических координатах

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

**Атомные массы, размеры, потенциалы ионизации,
спектроскопические характеристики элементов
периодической системы**

Атом- ный номер	Элемент	Сим- вол	Атом- ная масса	Электрон - ная кон- фи- гурация	Осно- вной терм	Сред- ний ра- диус, ед. a_0	Потенциалы ионизации, (эВ)	
							I	II
1	Водород	H	1.008	1s	2S	1.5	13.599	-
2	Гелий	He	4.003	1s ²	1S	0.927	24.588	54.418
3	Литий	Li	6.940	2s	2S	3.874	5.392	75.641
4	Бериллий	Be	9.013	2s ²	1S	2.649	9.323	18.211
5	Бор	B	10.81	2p	2P	2.205	8.298	25.155
6	Углерод	C	12.011	2p ²	3P	1.743	11.260	24.384
7	Азот	N	14.007	2p ³	4S	1.447	14.534	29.602
8	Кислород	O	16.00	2p ⁴	3P	1.239	13.618	35.118
9	Фтор	F	19.00	2p ⁵	2P	1.085	17.423	34.971
10	Неон	Ne	20.179	2p ⁶	1S	0.965	21.565	40.964
11	Натрий	Na	22.990	3s	2S	4.209	5.139	47.287
12	Магний	Mg	24.305	3s ²	1S	3.253	7.646	15.035
13	Алюминий	Al	26.98	3p	2P	3.434	5.986	18.829
14	Кремний	Si	28.09	3p ²	3P	2.788	8.152	16.346
15	Фосфор	P	30.974	3p ³	4S	2.369	10.487	19.726
16	Сера	S	32.06	3p ⁴	3P	2.069	10.360	23.338
17	Хлор	Cl	35.453	3p ⁵	2P	1.842	12.968	23.814
18	Аргон	Ar	39.948	3p ⁶	1S	1.663	15.760	27.630
19	Калий	K	39.10	4s	2S	5.244	4.341	31.626
20	Кальций	Ca	40.08	4s ²	1S	4.218	6.113	11.872
21	Скандий	Sc	44.96	3d4s ²	2D	3.96	6.562	12.800
22	Титан	Ti	47.90	3d ² 4s ²	3F	3.766	6.74	13.58
23	Ванадий	V	50.94	3d ³ 4s ²	4F	3.607	6.74	14.66
24	Хром	Cr	51.996	3d ⁵ 4s	7S	3.843	6.767	16.498
25	Марганец	Mn	54.94	3d ⁵ 4s ²	6S	3.349	7.434	15.640
26	Железо	Fe	55.85	3d ⁶ 4s ²	5D	3.242	7.870	16.188
27	Кобальт	Co	58.93	3d ⁷ 4s ²	4F	3.144	7.864	17.083
28	Никель	Ni	58.70	3d ⁸ 4s ²	3F	3.055	7.637	18.169

Атом- ный номер	Элемент	Сим- вол	Атом- ная масса	Электрон - ная кон- фи- гурация	Осно- вной терм	Сред- ний ра- диус, ед. a_0	Потенциалы ионизации, (эВ)	
							I	II
29	Медь	Cu	63.55	$3d^{10}4s$	2S	3.331	7.726	20.292
30	Цинк	Zn	65.38	$3d^{10}4s^2$	1S	2.898	9.394	17.965
31	Галлий	Ga	69.72	$4s^24p$	2P	3.424	5.999	20.515
32	Германий	Ge	72.59	$4s^24p^2$	3P	2.904	7.899	15.934
33	Мышьяк	As	74.92	$4s^24p^3$	4S	2.561	9.789	18.589
34	Селен	Se	78.96	$4s^24p^4$	3P	2.309	9.752	21.16
35	Бром	Br	79.904	$4s^24p^5$	2P	2.112	11.814	21.81
36	Криптон	Kr	83.80	$4s^24p^6$	1S	1.952	14.000	24.359
37	Рубидий	Rb	85.47	$5s$	2S	5.632	4.177	27.28
38	Стронций	Sr	87.62	$5s^2$	1S	4.633	5.695	11.030
39	Иттрий	Y	88.91	$4d5s^2$	2D	4.300	6.217	12.24
40	Цирконий	Zr	91.22	$4d^25s^2$	3F	4.078	6.634	13.13
41	Ниобий	Nb	92.91	$4d^45s$	6D	4.207	6.759	14.32
42	Молибден	Mo	95.94	$4d^55s$	7S	4.079	7.092	16.16
43	Технеций	Tc	[98]	$4d^55s^2$	6S	3.650	7.28	15.26
44	Рутений	Ru	101.1	$4d^75s$	5F	3.877	7.366	16.76
45	Родий	Ro	102.91	$4d^85s$	4F	3.795	7.46	18.08
46	Палладий	Pd	106.4	$4d^{10}$	1S	1.533	8.336	19.43
47	Серебро	Ag	107.88	$4d^{10}5s$	2S	3.656	7.576	21.484
48	Кадмий	Cd	112.41	$4d^{10}5s^2$	1S	3.237	8.994	16.908
49	Индий	In	114.82	$5s^25p$	2P	3.778	5.786	18.870
50	Олово	Sn	118.69	$5s^25p^2$	3P	3.286	7.344	14.632
51	Сурьма	Sb	121.75	$5s^25p^3$	4S	2.952	8.608	16.53
52	Теллур	Te	127.60	$5s^25p^4$	3P	2.701	9.010	18.6
53	Иод	I	126.90	$5s^25p^5$	2P	2.502	10.451	19.131
54	Ксенон	Xe	131.30	$5s^25p^6$	1S	2.338	12.130	21.21
55	Цезий	Cs	132.91	$6s$	2S	6.30	3.894	25.08
56	Барий	Ba	137.33	$6s^2$	1S	5.25	5.212	10.004
57	Лантан	La	138.91	$5d6s^2$	2D	4.93	5.577	11.06
58	Церий	Ce	140.12	$4f5d6s^2$	1G	4.88	5.539	10.85
59	Празеодим	Pr	140.9	$4f^36s^2$	4I	5.06	5.473	10.55

Атомный номер	Элемент	Символ	Атомная масса	Электронная конфигурация	Основной терм	Средний радиус, ед. a_0	Потенциалы ионизации, (эВ)	
							I	II
60	Неодим	Nd	144.24	$4f^4 6s^2$	5I	5.01	5.526	10.73
61	Прометий	Pm	[145]	$4f^5 6s^2$	6H	4.96	5.582	10.9
62	Самарий	Sm	150.4	$4f^6 6s^2$	7F	4.91	5.644	11.07
63	Европий	Eu	151.96	$4f^7 6s^2$	8S	4.86	5.670	11.24
64	Гадолиний	Gd	157.25	$4f^7 5d 6s^2$	9D	4.58	6.150	12.09
65	Тербий	Tb	158.93	$4f^9 6s^2$	6H	4.77	5.864	11.52
66	Диспрозий	Dy	162.50	$4f^{10} 6s^2$	5I	4.73	5.939	11.67
67	Гольмий	Ho	164.93	$4f^{11} 6s^2$	4I	4.69	6.022	11.80
68	Эрбий	Er	167.26	$4f^{12} 6s^2$	3H	4.65	6.108	11.93
69	Тулий	Tm	168.93	$4f^{13} 6s^2$	2F	4.61	6.184	12.05
70	Иттербий	Yb	173.04	$4f^{14} 6s^2$	1S	4.57	6.254	12.76
71	Лютеций	Lu	174.97	$4f^{14} 5d 6s^2$	2D	4.27	5.426	12.97
72	Гафний	Hf	178.49	$5d^2 6s^2$	3F	4.08	6.454	13.78
73	Тантал	Ta	180.95	$5d^3 6s^2$	4F	3.94	7.89	14.47
74	Вольфрам	W	183.85	$5d^4 6s^2$	5D	3.82	7.98	15.08
75	Рений	Re	186.21	$5d^5 6s^2$	6S	3.72	7.88	15.73
76	Осмий	Os	190.2	$5d^6 6s^2$	5D	3.62	8.73	16.34
77	Иридий	Ir	192.2	$5d^7 6s^2$	4F	3.53	9.05	16.91
78	Платина	Pt	195.09	$5d^9 6s$	3D	3.72	8.96	18.563
79	Золото	Au	196.97	$5d^{10} 6s$	2S	3.70	9.226	20.56
80	Ртуть	Hg	200.59	$5d^{10} 6s^2$	1S	3.33	10.438	18.756
81	Таллий	Tl	204.37	$6s^2 6p$	2P	3.92	6.108	20.428
82	Свинец	Pb	207.21	$6s^2 6p^2$	3P	3.42	7.417	15.032
83	Висмут	Bi	208.98	$6s^2 6p^3$	4S	3.08	7.285	16.69
84	Полоний	Po	[209]	$6s^2 6p^4$	3P	-	8.417	17.18
85	Астат	At	[210]	$6s^2 6p^5$	2P	-	9.224	19.10
86	Радон	Rn	[222]	$6s^2 6p^6$	1S	2.54	10.749	20.99
87	Франций	Fr	[223]	$7s$	2S	-	4.073	20.02
88	Радий	Ra	226.03	$7s^2$	1S	-	5.279	10.147
89	Актиний	Ac	227.03	$6d 7s^2$	2D	-	5.17	11.04
90	Торий	To	232.04	$6d^2 7s^2$	3F	5.00	6.08	11.90

Атом- ный номер	Элемент	Сим- вол	Атом- ная масса	Электрон - ная кон- фи- гурация	Осно- вной терм	Сред- ний ра- диус, ед. a_0	Потенциалы ионизации, (эВ)	
							I	II
91	Протакти- ний	Pa	231.04	$5f^2 6d 7s^2$	4K	5.35	5.89	11.46
92	Уран	U	238.03	$5f^3 6d 7s^2$	5L	5.08	6.194	11.63
93	Нептуний	Np	237.05	$5f^4 6d 7s^2$	6L	-	6.266	11.80
94	Плутоний	Pu	[244]	$5f^6 7s^2$	7F	5.18	6.06	11.19
95	Амерций	Am	[243]	$5f^7 7s^2$	8S		5.99	12.15
96	Кюрий	Cm	[245]	$5f^8 6d 7s^2$	9D		6.02	12.36
97	Берклий	Bk	[247]	$5f^9 7s^2$	8H		6.23	12.57
98	Калифорний	Cf	[249]	$5f^{10} 7s^2$	5I		6.30	11.83
99	Эйнштейн- ний	Es	[254]	$5f^{11} 7s^2$	4I		6.42	11.98
100	Фермий	Fm	[253]	$5f^{12} 7s^2$	3H		6.50	12.14
101	Менделевий	Md	[255]	$5f^{13} 7s^2$	2F		6.58	12.29
102	Нобелий	No	[255]	$5f^{14} 7s^2$	1S		6.65	12.45
103	Лоуренсий	Lr	[257]	$5f^{14} 6d 7s^2$	2D		4.312	14.00
104	Резерфор- дий	Rf	[261]	$6d^2 7s^2$				
105	Дубний	Db	[262]	$6d^3 7s^2$				
106	Сиборгий	Sg	[263]	$6d^4 7s$				
107	Борий	Bh	[262]	$6d^5 7s$				
108	Хассий	Hs	[264]	$6d^6 7s$				
109	Мейтнерий	Mt	[266]	$6d^7 7s$				

Примечания.

- 1) В квадратных скобках указаны массовые числа наиболее устойчивых изотопов данного элемента.
- 2) Основные термы всех элементов заданы в приближении LS связи. Это приближение нарушается для тяжелых атомов, поэтому представленные данные для тяжелых атомов достаточно условны.
- 3) Под средним радиусом атома понимается среднее удаление валентного электрона от атомного ядра. Эта величина рассчитывалась по формуле

$$\langle r \rangle = \int_0^{\infty} r^3 |\psi|^2 dr,$$

где одноэлектронная радиальная волновая функция была получена путем разложения в ряд по базису слэтеровских атомных орбиталей.

Параметры некоторых двухатомных молекул

Молекула	Основной электронный терм	Потенциал ионизации, эВ	Равновесное межъядерное расстояние, А	Колебательный квант, эВ	Вращательная постоянная ^(*) , эВ	Энергия диссоциации, эВ
H ₂ ⁺	2 Σ	29.9	1.06	0.285	3.70(-3)	2.649
H ₂	1 Σ	15.426	0.741	0.545	7.55(-3)	4.48
N ₂	1 Σ	15.580	1.098	0.293	2.48(-4)	9.76
O ₂	3 Σ	12.077	1.207	0.196	1.79(-4)	5.12
F ₂	1 Σ	15.686	1.417	0.141	1.10(-4)	1.38
Cl ₂	1 Σ	11.48	1.988	0.069	2.08(-5)	2.50
Br ₂	1 Σ	10.56	2.281	0.040	1.01(-5)	1.97
I ₂	1 Σ	9.4	2.666	0.027	4.64(-6)	1.54
Li ₂	1 Σ	5.15	2.67	0.044	8.35(-5)	1.03
HCl	1 Σ	12.74	1.275	0.371	1.30(-3)	4.43
HBr	1 Σ	11.62	1.414	0.329	1.04(-3)	3.75
HI	1 Σ	10.38	1.609	0.287	7.98(-4)	3.06
LiH	1 Σ	7.85	1.595	0.174	9.34(-4)	2.43
Na ₂	1 Σ	4.90	3.077	0.020	1.92(-5)	0.75
NaCl	1 Σ	8.92	2.361	0.045	2.71(-5)	4.3
CO	1 Σ	14.014	1.128	0.269	2.40(-4)	11.09
NO	2 Π	9.264	1.151	0.237	2.12(-4)	6.50
OH	2 Π	13.18	0.971	0.464	2.34(-3)	4.40
CN	2 Σ	14.20	1.172	0.257	2.36(-4)	7.75
CH	2 Π	10.9	1.120	0.355	1.76(-3)	3.45

(*) Число 7.55(-3) следует читать как $7.55 \cdot 10^{-3}$.

**Длины волн и силы осцилляторов переходов
некоторых атомных переходов**

Атом	Переход	Длина волны, Å	Сила осциллятора
H	$1s \rightarrow 2p$	1215.7	0.416
	$1s \rightarrow 3p$	1025.7	0.079
	$1s \rightarrow 4p$	972.5	0.029
	$2s \rightarrow 3p$	6562.7	0.435
	$2p \rightarrow 3s$	6562.9	0.0136
	$2p \rightarrow 3d$	6562.8	0.696
	$2s \rightarrow 4p$	4861.29	0.103
	$2p \rightarrow 4s$	4861.35	0.0030
	$2p \rightarrow 4d$	4861.33	0.122
He	$1s^2(^1S) \rightarrow 1s2p(^1P)$	584.3	0.276
	$1s^2(^1S) \rightarrow 1s3p(^1P)$	537.0	0.0734
	$1s^2(^1S) \rightarrow 1s4p(^1P)$	522.2	0.030
	$1s2s(^1S) \rightarrow 1s2p(^1P)$	20581.3	0.376
	$1s2s(^1S) \rightarrow 1s3p(^1P)$	5015.7	0.151
	$1s2s(^1S) \rightarrow 1s4p(^1P)$	3964.7	0.14
	$1s2s(^3S) \rightarrow 1s2p(^3P)$	10830	0.539
	$1s2s(^3S) \rightarrow 1s3p(^3P)$	3888.6	0.0645
	$1s2s(^3S) \rightarrow 1s4p(^3P)$	3187.7	0.023
Li	$2s_{1/2} \rightarrow 2p_{1/2}$	6707.91	0.251
	$2s_{1/2} \rightarrow 2p_{3/2}$	6707.76	0.502
	$2p_{1/2} \rightarrow 3s_{1/2}$	8126.23	0.115
	$2p_{3/2} \rightarrow 3s_{1/2}$	8126.45	0.115
Na	$3s_{1/2} \rightarrow 3p_{1/2}$	5895.9	0.324
	$3s_{1/2} \rightarrow 3p_{3/2}$	5889.9	0.648
	$3s_{1/2} \rightarrow 4p_{1/2}$	3303.9	0.051
	$3s_{1/2} \rightarrow 4p_{3/2}$	3302.9	0.102
	$3p_{1/2} \rightarrow 4s_{1/2}$	22057.0	0.167
	$3p_{3/2} \rightarrow 4s_{1/2}$	22084.0	0.335

Атом	Переход	Длина волны, Å	Сила осциллятора
К	$4s_{1/2} \rightarrow 4p_{1/2}$	7699.0	0.347
	$4s_{1/2} \rightarrow 4p_{3/2}$	7664.9	0.684
	$4p_{1/2} \rightarrow 5s_{1/2}$	12434.3	0.051
	$4p_{3/2} \rightarrow 5s_{1/2}$	12523.0	0.102
Rb	$5s_{1/2} \rightarrow 5p_{1/2}$	7947.6	0.363
	$5s_{1/2} \rightarrow 5p_{3/2}$	7800.23	0.726
	$5p_{1/2} \rightarrow 6s_{1/2}$	13237.3	0.187
	$5p_{3/2} \rightarrow 6s_{1/2}$	13667.0	0.364
Cs	$6s_{1/2} \rightarrow 6p_{1/2}$	8943.5	0.394
	$5s_{1/2} \rightarrow 6p_{3/2}$	8521.2	0.814
	$6p_{1/2} \rightarrow 7s_{1/2}$	4593.2	0.00284
	$6p_{1/2} \rightarrow 7p_{3/2}$	45554.4	0.0174
Be	$2s^2 \rightarrow 2s2p(^1P)$	2348.61	1.36
	$2s2p(^1P) \rightarrow 2s3s(^1S)$	8254.1	0.13
	$2s2p(^1P) \rightarrow 2s3d(^1D)$	4572.7	0.19
	$2s2p(^3P) \rightarrow 2s3s(^3S)$	3321.2	0.034
	$2s2p(^3P) \rightarrow 2s3d(^3D)$	2494.6	0.16
	$2s2p(^3P) \rightarrow 2p^2(^3P)$	2650.6	0.466
B	$2s^22p \rightarrow 2s^23s$	2497.4	0.11
	$2s^22p \rightarrow 2s^23d$	2089.3	0.24
	$2s^23s \rightarrow 2s^23p$	11661	1.07
	$2s^22p \rightarrow 2s2p^2(^2D)$	2089.3	0.24
	$2s^22p \rightarrow 2s2p^2(^2S)$	1573.5	0.16
Mg	$3s^2 \rightarrow 3s3p(^1P)$	2852	1.2
	$3s^2 \rightarrow 3s3p(^3P)$	4571.1	$2.6 \cdot 10^{-6}$

Атом	Переход	Длина волны, Å	Сила осциллятора
Al	$3s^2 3p(^2P_{1/2}) \rightarrow 3s^2 4s(^2S_{1/2})$	3944.0	0.15
	$3s^2 3p(^2P_{3/2}) \rightarrow 3s^2 4s(^2S_{1/2})$	3962.0	0.15
	$3s^2 3p(^2P_{3/2}) \rightarrow 3s^2 4d(^2D_{3/2,5/2})$	3092.0	0.23
	$3s^2 3p(^2P_{1/2}) \rightarrow 3s^2 4d(^2D_{3/2})$	3089.0	0.22

Сила осциллятора перехода $i \rightarrow f$ (i, f — совокупности квантовых чисел начального и конечного состояний атома) определяется с помощью следующего выражения

$$F_{fi} = \frac{1}{g_i} \frac{2m\omega_{fi}}{3\hbar e^2} |d_{fi}|^2, \text{ где } \omega_{fi} \text{ — частота перехода,}$$

d_{fi} — матричный элемент дипольного момента атома, $g_i = 2J_i + 1$ — кратность вырождения начального состояния (J — квантовое число полного механического момента атома). Вероятность перехода в единицу времени из состояния $|i\rangle$ в состояние $|f\rangle$ определяется выражением

$$w_{fi} = \frac{2e^2\omega_{fi}^2}{mc^3} F_{fi}.$$

Время жизни относительно спонтанного перехода состояния $|i\rangle$ определяется как $\tau_i = (\sum_f w_{fi})^{-1}$, где сумма берется по всем ниже лежащим состояниям.

Метаустойчивые состояния атомов

Атом	Состояние	Энергия возбуждения, эВ	Время жизни, с
H	$2s$	10.20	0.142
He	$1s2s(^3S)$	19.82	$6 \cdot 10^5$
	$1s2s(^1S)$	20.61	0.038
N	$2p^3(^2D_{5/2})$	2.384	$6 \cdot 10^4$
	$2p^3(^2D_{3/2})$	2.385	$1.4 \cdot 10^5$
	$2p^3(^2P)$	3.58	13
O	$2p^4(^1D_2)$	1.97	110
	$2p^4(^1S)$	4.19	0.8