

1.1: Как изменится полная волновая функция $\Psi(x, t)$, описывающая стационарные состояния, если изменить начало отсчёта потенциальной энергии на некоторую величину ΔU ?

Измениться лишь временной множитель полной волновой функции. А так как физический смысл имеет лишь квадрат модуля этой функции, то изменение временного множителя никак не проявляется.

1.2: Объясните с позиции квантовой теории: почему невозможно состояние, в котором частица находилась бы в состоянии покоя?

Состояние, в котором частица находится в полном покое невозможно. В макроскопической физике импульс частицы определяется формулой $p = mv$. Для нахождения скорости v измеряют координаты частицы x_1 и x_2 в два близких момента времени t_1 и t_2 , затем находят частное $(x_2 - x_1)/(t_2 - t_1)$ и выполняют предельный переход $t_2 \rightarrow t_1$. Такой метод не годится для частицы, т.к. предельный переход требует точного измерения x_1 и x_2 , т.е. измерение координаты существенно меняет импульс частицы.

1.3: Имеет ли смысл делить полную энергию на кинетическую и потенциальную с позиции квантовой теории?

В квантовой механике теряет смысл деление полной энергии E на кинетическую и потенциальную, т.к. одна из этих величин зависит от импульса, а другая от координаты. Эти переменные не могут иметь одновременно определённые значения.

1.4: Объясните, почему электрон не падает на ядро с позиции квантовой теории.

Бор предположил модель атома, похожую на модель Резерфорда, но с тем отличием, что электроны располагались вокруг ядра на строго определенных, постоянных орбитах. Эта модель напоминает устройство солнечной системы, где электроны вращаются вокруг ядра так же, как планеты вокруг Солнца.

1.5: Поясните причину возникновения «туннельного эффекта».

Волновая функция ψ есть величина вспомогательная: все реально наблюдаемые величины связаны с ней вероятностными соотношениями. Поскольку функция ψ всюду отлична от нуля, существует конечная вероятность обнаружения частицы как внутри барьера, так и за его пределами.

1.6: Объясните основные отличия между квантовым и классическим гармоническим осциллятором.

Квантовый осциллятор имеет дискретный спектр, а классический – сплошной.

1.7: Может ли частица находиться на дне потенциальной ямы? Определяется ли это формой ямы?

В следствии принципа неопределенности Гейзенберга:

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \hbar$$

Заметим, что минимальная энергия, которой может обладать частица в яме:

$$E_{min} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ml^2} \neq 0$$

Если $E = 0 \Rightarrow p = 0$, то $\Delta x \rightarrow \infty$. Частица не может находиться на дне «потенциальной ямы», причём этот вывод не зависит от формы ямы. В самом деле, падение на дно ямы связано с обращением в ноль импульса частицы. Тогда неопределенность координаты становится сколько угодно большой, что противоречит соотношению Гейзенберга.

1.8: В чём состояла ценность опытов Штерна и Герлаха?

Наличие у атомов магнитных моментов и их квантование было доказано прямыми опытами Штерна и Герлаха.

1.9: Дайте наглядное истолкование спин-орбитальному взаимодействию.

Воспользуемся теорией Бора для атома водорода: электрона, вращающийся по орбите, обладает спином и тем самым обладает спиновым магнитным моментом. Электрическое поле ядра оказывает воздействие на спиновый магнитный момент, в этом легко убедиться, если перейти в систему отсчёта электрон покоится, а ядро – движется, создавая магнитное поле, которое будет взаимо-

действовать со спиновым магнитным моментом.

1.10: Почему расщепление дублетов резкой серии в спектрах щелочных металлов одинаково для всех линий, а главной серии – неодинаково?

Тонкая структура уровней и спектральных щелочных металлов в основном обусловлена спин-орбитальным взаимодействием. Главная серия возникает в результате переходов на наиболее глубокий уровень S с вышележащих P-уровней. Уровень S простой, а все P-уровни двойные, причём расстояние между компонентами этих уровней убывает с возрастанием главного квантового числа n . Поэтому и сами спектральные линии главной серии получаются двойными – дублетами. Линии резкой серии возникают в результате переходов с простых S-уровней на лежащий ниже двойной P-уровень, состоящий из подуровней. Поэтому расстояния между компонентами дублетов одни и те же для всей серии, причём сами компоненты являются резкими линиями.

1.11: Почему количество линий, наблюдаемых при нормально эффекте Зеемана различно при наблюдении вдоль и перпендикулярно магнитному полю?

Эффект Зеемана – это расщепление энергетических уровней под действием магнитного поля. При наложении магнитного поля движение электрона становится сложным, а также будет сложным спектре излучения. Его можно представить как совокупность трёх монохроматических волн разной частоты $(\nu_0 - \Delta\nu), \nu_0, (\nu_0 + \Delta\nu)$ в разных состояниях поляризации. При наблюдении в магнитном поле в направлении, перпендикулярном полю (поперечный эффект Зеемана) в спектрах излучения и поглощения обнаруживает триплет: три линейно поляризованные спектральные линии: несмещенную линию первоначальной частоты с электрическим вектором \vec{E} , направленным вдоль \vec{B} , и две смещенные линии с частотами $(\nu_0 - \Delta\nu)$ и $\nu_0 + \Delta\nu$ и электрическим вектором \perp магнитному полю.

При наблюдении вдоль магнитного поля (продольный эффект Зеемана) в спектрах обнаруживается дублет – две симметрично смещенные спектральные линии с частотами $(\nu_0 - \Delta\nu)$ и $(\nu_0 + \Delta\nu)$. Обе линии оказываются поляризованными по кругу. Линия с $(\nu_0 - \Delta\nu)$ поляризована по левому кругу, а $(\nu_0 + \Delta\nu)$ по правому. При продольном наблюдении несмещенная спектральная компонента отсутствует.

1.12: Как будет видоизменяться спектр поглощения рентгеновского излучения веществом при уменьшении энергии излучения?

При высоких E возбуждены все серии, при уменьшении энергии происходит прекращение возбуждения К-серии. Появляется край полосы поглощения, при дальнейшем уменьшении энергии на кривой поглощения появляется L-край.

1.13: Почему L-край полосы поглощения рентгеновского излучения веществом состоит из 3-ёх «зубчиков»?

Появление зубчиков связано с тонкой структурой рентгеновских спектров.

1.14: Объясните, почему при комнатных температурах интенсивность красных спутников заметно выше, чем фиолетовых в явлении комбинационного рассеяния света.

При обычных температурах, согласно распределению Больцмана, число молекул в возбужденном состоянии значительно меньше, чем в основном. Поэтому в основном будут происходить процессы поглощения энергии. Значит интенсивность красных спутников будет больше.

1.15: Можно ли наблюдать для молекулы водорода вращательный и колебательно-вращательный спектр.

Нет, т.к. вращательный и колебательно-вращательный спектры наблюдаются на опыте только для несимметричных молекул.

1.16: Почему при электронных переходах в молекулах меняется колебательный и вращательный характер движения?

При электронном переходе изменяется электронная конфигурация оболочки, следовательно, изменяются силы, действующие между ядрами. Следовательно меняются и колебательный и вращательный характер движения. Т.е. при электронном переходе меняются все три составляющие энергии.

1.17: Дайте наглядное истолкование принципу Франка-Кондона.

Электронный переход, происходящий наиболее вероятно без изменения положения ядер в молекуле.

2.1: Протон с длиной волны $\lambda = 1,7$ нм упруго рассеялся под углом 90° на первоначально покоившейся частице, масса которой в $n = 4,0$ раза больше массы протона. Определить длину волны рассеянного протона.

Закон сохранения энергии:

$$\frac{mv^2}{2} = \frac{mv'^2}{2} + \frac{m_2u^2}{2}$$

т.к. $m_2 = nm$, то

$$v^2 = v'^2 + nu^2$$

По теореме Пифагора: $(mv)^2 + (mv')^2 = (m_2u)^2$

$$v^2 + v'^2 = (nu)^2$$

$$\begin{cases} v^2 + v'^2 = (nu)^2 \\ v^2 = v'^2 + (nu)^2 \end{cases}$$

Решая систему уравнение получаем:

$$v' = v\sqrt{\frac{n-1}{n+1}}$$

С учётом соотношения:

$$p = \hbar k = \hbar \frac{2\pi}{\lambda} = mv$$

Получим:

$$\lambda' = \lambda\sqrt{\frac{n+1}{n-1}}$$

2.2: Нейтрон с кинетической энергией $T = 0,25$ эВ испытал упругое соударение с первоначально покоившемся ядром атома ^4He . Найти длину волн обеих частиц в их Ц-системе до и после соударения.

2.3: Два атома, ^1H и ^4He , движутся в одном направлении, причём дейбройлевская длина волны каждого атома $\lambda = 60$ нм. Найти длины волн обоих атомов в их Ц-системе.

2.4: Найти кинетическую энергию электронов, падающих нормально на диафрагму с двумя узкими щелями, если на экране, отстоящем от диафрагмы на $l = 75$ см, расстояние между соседними максимумами $\Delta x = 7,5$. Расстояние между щелями $d = 25$ мкм.

2.5: Узкий пучок моноэнергетических электронов падает под углом скольжения $\vartheta = 30^\circ$ на грань монокристалла алюминия. Расстояние между соседними кристаллическими плоскостями, параллельными этой грани монокристалла, $d = 0,20$ нм. При ускоряющем напряжении U_0 наблюдали максимум зеркального отражения. Найти U_0 , если следующий максимум зеркально отражения возникал при увеличении ускоряющего напряжения в $\eta = 2,25$ раза.

2.6: Узкий пучок электронов с кинетической энергией $K = 10$ кэВ проходит через поликристаллическую алюминиевую фольгу, образуя на экране систему дифракционных колец. Вычислить межплоскостное расстояние, соответствующее отражение третьего порядка от некоторой системы кристаллических плоскостей, если ему отвечает дифракционное кольцо диаметра $D = 3,20$ см. Расстояние между экраном и фольгой $l = 10,0$ см.

$$\begin{aligned}\Delta &= d \sin \varphi \\ \Delta &= n\lambda = \frac{2n\pi\hbar}{p} = \frac{2n\pi\hbar}{\sqrt{2mT}} \\ d \sin \varphi &= \frac{2n\pi\hbar}{\sqrt{2mT}} \\ d &= \frac{2n\pi\hbar}{\sqrt{2mT} \sin \varphi}\end{aligned}$$

2.7: Интерпретировать квантовые условия Бора на основе волновых представлений: показать, что электрон в атоме водорода может двигаться только по тем круговым орбитам, на которых укладывается целое число дебройлевских волн.

$$\begin{aligned}\lambda &= \frac{h}{p}; \quad p = mv = \frac{h}{p\lambda} \\ mv(2\pi R) &= \frac{h}{p\lambda}(2\pi R) \\ mv(2\pi R) &= hn\end{aligned}$$

Условие квантования: $pRmv = (nh)/(2\pi)$

$$\frac{h}{p\lambda}(2\pi R) = nh; \quad 2\pi R = n\lambda; \quad R = \frac{n\lambda}{2\pi}$$

2.8: Убедиться, что измерения координаты частицы с помощью микроскопа вносит неопределенность в её импульс Δp_x , такую, что

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq h$$

Иметь в виду, что разрешение микроскопа $d = \lambda / \sin \vartheta$, где λ - длина волны используемого света.

У фотона, рассеянного на микрочастице и прошедшего через объектив О, проекция импульса p_x не превышает, как видно из рисунка :), значение $p \sin \vartheta = \hbar k \sin \vartheta$, где $k = 2\pi/\lambda$. Эта величина характеризует и неопределенность Δp_x фотона. Но при рассеянии фотона на микрочастице последняя испытывает отдачу, в результате чего её импульс получит такую же неопределенность Δp_x , как и фотон: $\Delta p_x \approx \hbar k \sin \vartheta$.

Имея, кроме того, в виду, что неопределенность координаты x микрочастицы $\Delta x \approx d = \lambda / \sin \vartheta$ получим в результате:

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \approx \frac{\lambda}{\sin \vartheta} \frac{2\pi\hbar}{\lambda} \sin \vartheta = 2\pi\hbar$$

в чём и следовало убедиться.

2.9: Плоский поток частиц падает нормально на диафрагму с двумя узкими щелями, образуя на экране дифракционную картину. Показать, что попытка определить, через какую щель прошла та или иная частица (например, с помощью введения индикатора И), приводит к разрушению дифракционной картины. Для простоты считать углы дифракции малыми.

2.10: Оценить минимально возможную энергию электронов в атоме и соответствующее расстояние электронов от ядра.

2.11: Оценить с помощью соотношения неопределенностей неопределенность скорости электрона в атоме водорода, полагая размер атома $l = 0,10$ нм. Сравнить полученную величину со скоростью электрона на первой боровской орбите данного атома.

2.12: Оценить с помощью соотношения неопределенностей минимальную кинетическую энергию электрона, локализованного в области размером $l = 0,20$ нм.

2.13: Электрон с кинетической энергией $K \approx 4$ эВ локализован в области размером $l \approx 1$ мкм. Оценить с помощью соотношения неопределенностей относительную неопределенность его скорости.

2.14: Электрон находится в одномерной прямоугольной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками. Ширина ямы l . Оценить с помощью соотношения неопределенностей силу давления электрона на стенки этой ямы при минимально возможной его энергии.

2.15: След пучка электронов на экране электронно-лучевой трубки имеет диаметр $d \approx 0,5$ мм. Расстояние от электронной пушки до экрана $l \approx 20$ см, ускоряющее напряжение $U = 10$ кВ. Оценить с помощью соотношения неопределенностей координаты электрона на экране.

2.16. Частица массы m движется в одномерном потенциальном поле $U = \frac{\chi x^2}{2}$ (гармонический осциллятор). Оценить с помощью соотношения неопределенностей минимально возможную энергию частицы в таком поле.

2.17: Параллельный пучок атомов водорода со скоростью $v = 600$ м/с падает нормально на узкую щель, за которой на расстоянии $l = 1,0$ м расположен экран. Оценить с помощью соотношения неопределенностей ширину b щели, при которой ширина изображения её на экране будет минимальной.

4.17: Вычислить энергию связи K – электрона ванадия, для которого длина волны L – края поглощения $\lambda_L = 2,4$ нм.

С помощью схемы :) можно записать, что искомая энергия связи:

$$E_K = \hbar\omega_L + \hbar\omega_{K\alpha}$$

где $\omega_L = 2\pi c/\lambda_L$ и $\omega_{K\alpha}$ – частота определяемая законом Мозли:

$$\omega_{K\alpha} = \frac{3}{4}R(Z - \sigma)^2$$

В результате получаем:

$$E_K = \hbar \left(\frac{2\pi c}{\lambda_L} + \frac{3}{4} R(Z-1)^2 \right)$$

5.1: Найти магнитный момент μ и возможные проекции μ_z атома в состоянии:

а) 1F

б) $^2D_{3/2}$

Основные формулы:

$$\mu_L = -\mu_B \sqrt{L(L+1)}; \quad \mu_{LZ} = m_L \mu_B; \quad m_L = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm L$$

$$\mu_S = -2\mu_B \sqrt{S(S+1)}; \quad \mu_{SZ} = 2m_S \mu_B; \quad m_S = -S, -S+1, \dots, +S$$

$$\mu_J = -\mu_B g \sqrt{J(J+1)}; \quad \mu_{JZ} = m_J g \mu_B; \quad m_J = -J, -J+1, \dots, +J$$

$$g = 1 + \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)}$$

а) $^1F : L = 3, S = 0, J = 3$

$$g = 0$$

$$\mu_L = -2\mu_B \sqrt{3}$$

$$\mu_S = 0$$

$$\mu_J = 0$$

$$m_L = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3$$

$$m_S = 0$$

$$m_J = -3, -2, -1, 0, 1, 2, 3$$

б) $^2D_{3/2} : L = 2, S = \frac{1}{2}, J = \frac{3}{2}$

$$g = \frac{12}{5}$$

$$\mu_L = -\mu_B \sqrt{6}$$

$$\mu_S = -\mu_B \sqrt{3}$$

$$\mu_J = -\frac{6}{5} \mu_B \sqrt{15}$$

$$m_L = 0, \pm 1, \pm 2$$

$$m_S = -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}$$

$$m_J = -\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{3}{2}$$

5.2: Вычислить магнитный момент атома водорода в основном состоянии.

Используем формулы из предыдущей задачи.

$$S = \frac{1}{2} \text{ из условия } m_S = \frac{1}{2} \text{ и } S = \sum m_S = \frac{1}{2}$$

$$L = 0; \quad J = L + S \Rightarrow J = \frac{1}{2}$$

$$g = 2; \quad \mu_L = 0; \quad \mu_S = -\mu_B \sqrt{3}; \quad \mu_J = -\mu_B \sqrt{3};$$

5.3: Найти механические моменты атомов в состоянии 5F и 7H , если известно, что в этих состояниях магнитные моменты равны нулю.

Основные формулы:

$$M_L = \hbar \sqrt{L(L+1)}; \quad M_S = \hbar \sqrt{S(S+1)}; \quad M_J = \hbar \sqrt{J(J+1)}$$

а) 5F

$$L = 3, \quad S = 2, \quad J = 0$$

$$M_L = 2\hbar\sqrt{3}; \quad M_S = \hbar\sqrt{6}; \quad M_J = 0$$

б) 7H

$$L = 4, \quad S = 3, \quad J = 0$$

$$M_L = 2\hbar\sqrt{5}; \quad M_S = 2\hbar\sqrt{3}; \quad M_J = 0$$

5.4: Механический момент атома в состоянии 3F прецессирует в магнитном поле $B = 500 \text{ Гс}$ с угловой скоростью $\omega = 5,5 \cdot 10^9 \text{ рад/с}$. Определить механический и магнитный моменты атома.

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m}$$

$${}^3F : S = 1, L = 3, J = L + S = 4$$

$$\dot{M}_J = \vec{N} = \vec{\mu}_J \times \vec{B}$$

$$M_J \cdot \frac{d\varphi}{dt} \cdot \sin \alpha = \mu_J \cdot B \cdot \sin \alpha$$

$$M_J \omega = \mu_J \cdot B$$

$$M_J = \frac{\mu_J B}{\omega}$$

$$g = 1 + \frac{S(S+1) + J(J+1) - L(L+1)}{2J(J+1)} = \frac{5}{4}$$

$$\mu_J = \mu_B g \sqrt{J(J+1)} = \frac{5\sqrt{5}}{2} \mu_B$$

В результате получаем:

$$M_J = \frac{5\sqrt{5}}{2} \cdot \frac{\mu_B B}{\omega}$$

5.5: Объяснить с помощью векторной модели, почему механический момент атома, находящегося в состоянии ${}^6F_{1/2}$ прецессирует в магнитном поле B с угловой скоростью ω , вектор которого направлен противоположно вектору \vec{B} .

5.6: Узкий пучок атомов пропускают по методу Штерна и Герлаха через резко неоднородное магнитное поле. Определить:

а) максимальные значения проекций магнитных моментов атомов в состояниях 4F , 6S и 5D , если известно, что пучок расщепляется соответственно на 4, 6 и 9 компонент;

б) на сколько компонент расщепится пучок атомов, находящихся в состояниях 3D_2 и 5F_1 ?

а) Используемые формулы:

$$\mu_{LZ} = m_L \mu_B; \quad m_L = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm L$$

$$\mu_{SZ} = 2m_S \mu_B; \quad m_S = -S, -S+1, \dots, +S$$

$$\mu_{JZ} = m_J g \mu_B; \quad m_J = -J, -J+1, \dots, +J$$

$$g = 1 + \frac{S(S+1) + J(J+1) - L(L+1)}{2J(J+1)}$$

Рассмотрим каждое состояние атома в отдельности:

$${}^4F : L = 3, S = \frac{3}{2}, J = \frac{3}{2}$$

$$g = 1 + \frac{\frac{3}{2} \cdot \frac{5}{2} + \frac{3}{2} \cdot \frac{5}{2} - 3 \cdot 4}{3 \cdot \frac{5}{2}} = \frac{2}{5}$$

$$m_L = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3; \quad m_S = -\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{3}{2}$$

$$m_J = -\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{3}{2} \leftarrow \text{расщепление на 4 компоненты}$$

$$\mu_{maxLZ} = 3\mu_B; \quad \mu_{maxSZ} = 3\mu_B; \quad \mu_{maxJZ} = \frac{6}{5}\mu_B;$$

$${}^6S : L = 0, S = \frac{5}{2}, J = \frac{5}{2}$$

$$g = 1 + \frac{\frac{35}{4} + \frac{35}{4}}{\frac{35}{2}} = 2$$

$$m_L = 0; \quad m_S = -\frac{5}{2}, -\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}$$

$$m_J = -\frac{5}{2}, -\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2} \leftarrow \text{расщепление на 6 компонент}$$

$$\mu_{maxLZ} = 0; \quad \mu_{maxSZ} = 5\mu_B; \quad \mu_{maxJZ} = 10\mu_B$$

$${}^5D : L = 2, S = 2, J = 4$$

$$g = 1 + \frac{2 \cdot 3 + 4 \cdot 5 - 2 \cdot 3}{8 \cdot 5} = \frac{3}{2}$$

$$m_L = 0, \pm 1, \pm 2; \quad m_S = -2, -1, 0, 1, 2$$

$$m_J = -4, -3, -2, -1, 0, 1, 2, 3, 4 \leftarrow \text{расщепление на 9 компонент}$$

$$\mu_{maxLZ} = 2\mu_B; \quad \mu_{maxSZ} = \mu_B; \quad \mu_{maxJZ} = 3\mu_B$$

б) Запишем для каждого терма значение m_J

$${}^3D_2 : L = 2, S = 1, J = 2$$

$$m_J = -2, -1, 0, 1, 2 \leftarrow \text{расщепление на 5 компонент}$$

$${}^5F_1 : L = 3, S = 2, J = 1$$

$m_J = -1, 0, 1 \leftarrow$ расщепление на 3 компоненты

5.7: Атом находится в магнитном поле $B = 3,00$ кГс. Определить:

- а) полное расщепление, см^{-1} , терма 1D ;
 б) спектральный символ синглетного терма, полная ширина расщепления которого составляет $0,84 \text{ см}^{-1}$.

Используемые формулы:

$$\Delta\omega = \frac{\mu_B B}{\hbar} (m_{J2}g_2 - m_{J1}g_1)$$

$$m_J = -J, -J + 1, \dots, +J$$

$$g = 1 + \frac{S(S+1) + J(J+1) - L(L+1)}{2J(J+1)}$$

а)

$${}^1D : L = 2, S = 0, J = 2; \quad m_J = -2, -1, 0, 1, 2; \quad g = 1$$

В предположении, что полное расщепление образуется в случае разности m_J и постоянства числа g , получаем:

$$\Delta\omega = \frac{\mu_B B}{\hbar} (2 + 2) = 4 \frac{\mu_B B}{\hbar}$$

б)

5.8: Спектральная линия $\lambda = 0.612$ мкм обусловлена переходом между двумя синглетными термами атома. Определить интервал $\Delta\lambda$ между крайними компонентами этой линии в магнитном поле $B = 10,00$ кГс.

5.9: Построить схему возможных переходов между термами ${}^2P_{3/2}$ и ${}^2S_{1/2}$ в слабом магнитном поле. Вычислить для соответствующей спектральной линии:

- а) смещения зеемановских компонент в единицах $\mu_B B / \hbar$;
 б) интервал, см^{-1} , между крайними компонентами, если $B = 5,00$ кГс.

Используемые формулы:

$$\Delta\omega = \frac{\mu_B B}{\hbar} (m_{J2}g_2 - m_{J1}g_1)$$

$$m_J = -J, -J + 1, \dots, +J$$

$$g = 1 + \frac{S(S+1) + J(J+1) - L(L+1)}{2J(J+1)}$$

Распишем значения двух термов:

$$^2P_{\frac{3}{2}} : L = 1, S = \frac{1}{2}, J = \frac{3}{2}; \quad m_J = -\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{3}{2}; \quad g = \frac{1}{3}$$

$$^2S_{\frac{1}{2}} : L = 0, S = \frac{1}{2}, J = \frac{1}{2}; \quad m_J = -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}; \quad g = 2$$

а)

$$\Delta\omega = \frac{\mu_B B}{\hbar} \left(\frac{3}{2} \cdot \frac{1}{3} - 2 \cdot \frac{1}{2} \right) = -\frac{1}{2} \frac{\mu_B B}{\hbar}$$

б)

5.10: Изобразить схему возможных переходов в слабом магнитном поле и вычислить смещения (в единицах $\mu_B B/\hbar$) зеемановских компонент спектральной линии:

а) $^2D_{3/2} \rightarrow ^2P_{3/2}$;

б) $^2D_{5/2} \rightarrow ^2P_{3/2}$.

Используемые формулы:

$$\Delta\omega = \frac{\mu_B B}{\hbar} (m_{J2}g_2 - m_{J1}g_1) = \Delta\omega_0 (m_{J2}g_2 - m_{J1}g_1)$$

$$g = 1 + \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)}$$

Рассмотрим пункт решение для пункта а:

$$^2D_{3/2} : L = 2, S = \frac{1}{2}, J = \frac{3}{2}$$

$$m_{J2} = -\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{3}{2}$$

$$g_2 = 1 + \frac{\frac{3}{2} \cdot \frac{5}{2} + \frac{1}{2} \cdot \frac{3}{2} - 2 \cdot 3}{\frac{15}{2}} = \frac{24}{30}$$

$$^2P_{3/2} : L = 1, S = \frac{1}{2}, J = \frac{3}{2}$$

$$m_{J1} = -\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{3}{2}$$

$$g_1 = 1 + \frac{\frac{18}{4} - 2}{\frac{15}{2}} = \frac{2}{3}$$

Правило отбора: $\Delta m_J = 0, \pm 1$.

$$-\frac{3}{2} \rightarrow -\frac{3}{2} : \Delta\omega = \Delta\omega_0 \left(-\frac{3}{2} \cdot \frac{24}{30} + \frac{3}{2} \cdot \frac{2}{3} \right) = -\frac{1}{5} \Delta\omega_0$$

Считаем $\Delta\omega$ для чисел:

$$\begin{aligned} -\frac{3}{2} &\rightarrow -\frac{1}{2}; & -\frac{1}{2} &\rightarrow -\frac{1}{2}; & -\frac{1}{2} &\rightarrow \frac{1}{2}; \\ \frac{1}{2} &\rightarrow \frac{1}{2}; & \frac{1}{2} &\rightarrow \frac{3}{2}; & \frac{3}{2} &\rightarrow \frac{3}{2}; \end{aligned}$$

И находим разность между двумя $\Delta\omega$.

Пункт б считается по аналогии.

5.11: Найти значения температуры, при которых средняя кинетическая энергия поступательного движения молекул H_2 и N_2 равна их вращательной энергии в состоянии с квантовым числом $J = 1$.

Основная идея: записываем энергию вращательного движения молекулы ($E_J = \frac{\hbar^2}{2I} J(J+1)$), где I – момент инерции молекулы, J – вращательное квантовое число; приравниваем к значению $\frac{3}{2}kT$, где k – постоянная Больцмана ($1.38 \cdot 10^{-23} \text{ Дж} \cdot \text{К}^{-1}$), T – температура; выражаем и находим значение для каждой из молекул.

5.12:

5.13:

5.14:

5.15: Для двухатомной молекулы известны интервалы между тремя последовательными вращательными уровнями $\Delta E_1 = 0, 20 \text{ МэВ}$

Используемая формула:

$$E_r = \frac{\hbar^2}{2I} J(J+1)$$

Запишем формулы для вращательных уровней:

$$E_{J1} = \frac{\hbar^2}{2I} J(J+1)$$

$$E_{J2} = \frac{\hbar^2}{2I} (J+1)(J+2) = \frac{\hbar^2}{2I} n(n+1)$$

$$E_{J3} = \frac{\hbar^2}{2I} (J+2)(J+3)$$

Сделаем обозначение $n = J + 1$.

Распишем разность энергий через формулы для уровней:

$$\Delta E_1 = E_{J2} - E_{J1} = \frac{\hbar^2}{2I} ((J+1)(J+2) - J(J+1)) = \frac{\hbar^2}{I} (J+1)$$

$$\Delta E_2 = E_{J3} - E_{J2} = \frac{\hbar^2}{2I} ((J+2)(J+3) - (J+1)(J+2)) = \frac{\hbar^2}{I} (J+2)$$

Найдём значение J поделив ΔE_1 на ΔE_2 :

$$\frac{\Delta E_1}{\Delta E_2} = \frac{J+1}{J+2}$$

Сделаем преобразования относительно J получим:

$$J = \frac{\Delta E_2 - 2\Delta E_1}{\Delta E_1 - \Delta E_2} = 1$$

Отсюда получаем значение для среднего уровня $n = J + 1 = 2$.

Для определение момента запишем:

$$\Delta E_2 - \Delta E_1 = \frac{\hbar^2}{I} (J+2 - J-1) \Rightarrow I = \frac{\hbar^2}{\Delta E_2 - \Delta E_1}$$

5.16: Оценить, сколько линий содержит чисто вращательный спектр молекул CO, момент инерции которых равен $I = 1,44 \cdot 10^{-39} \text{ г} \cdot \text{см}^2$.

Возможно задача не допоставлена и нехватает $\omega = 4.1 \cdot 10^{14} \text{ с}^{-1}$.

Решение:

Искомое число линий должно быть равно числу вращательных уровней между нулевым и первым возбужденным колебательными уровнями ($\nu = 0$ и $\nu = 1$), интервал между которыми согласно формуле:

$$E_\nu = \left(\nu + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega$$

равен $\hbar\omega$. Задача, таким образом, сводится к определению максимального вращательного квантового числа r уровня с энергией $\hbar\omega$. Учитывая формулу:

$$E_r = \frac{\hbar^2}{2I}r(r+1)$$

запишем

$$\hbar\omega = \frac{\hbar^2}{2I}r(r+1)$$

откуда

$$r^2 + r - \frac{2I\omega}{\hbar} = 0$$

Решение этого уравнения даёт $r_{\text{макс}}$:

$$r_{\text{макс}} = \frac{-1 + \sqrt{1 + 4(2I\omega/\hbar)}}{2} \approx \frac{2I\omega}{\hbar} = 33$$

Следовательно, чисто вращательных спектр данной молекулы содержит около 30 линий.

5.17: