

## Контрольная работа №2.

### Последнее обновление:

### Часть 1. Качественные задачи.

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

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

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

*Ответ:*

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

*Ответ:* 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. Следовательно, в силу соотношения неопределенностей, эти величины не могут иметь одновременно определённые значения.

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

*Ответ:*

- 1.5. Поясните причину возникновения «туннельного эффекта».

*Ответ:* Волновая функция  $\psi$  есть величина вспомогательная: все реально наблюдаемые величины связаны с ней вероятностными соотношениями. Поскольку функция  $\psi$  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.

*Ответ:* Квантовый осциллятор имеет дискретный спектр, а классический – сплошной.

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

*Ответ:* Падение на дно потенциальной ямы связано с обращением в ноль импульса частицы. Тогда неопределенность координаты становится сколько угодно большой, что противоречит соотношению неопределенностей Гейзенберга:

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

1.8. В чём состояла ценность опытов Штерна и Герлаха?

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

1.9. Дайте наглядное истолкование спин-орбитальному взаимодействию.

*Ответ:* Воспользуемся теорией Бора для атома водорода: электрон, 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, где электрон покоится, а ядро движется, создавая магнитное поле, которое будет взаимодействовать со спиновым магнитным моментом.

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

*Ответ:* Тонкая структура уровней и спектральных щелочных металлов в основном обусловлена спин-орбитальным взаимодействием. Главная серия возникает в результате переходов на наиболее низкий уровень S с вышележащих P-уровней. Уровень S синглетный, 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 дублетами, расстояния между отдельными линиями которых различны. Линии резкой серии возникают в результате переходов с S-уровней на двойной P-уровень. Поэтому расстояния между компонентами дублетов одни и те же для всей серии.

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

*Ответ:* Эффект Зеемана – это расщепление энергетических уровней под действием магнитного поля. При наложении магнитного поля движение электрона становится сложным, а также будет сложным спектр его 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 обнаруживается триплет – три линейно поляризованные спектральные линии: несмещенная линия 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?

*Ответ:* 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 трёх «зубчиков»?

*Ответ:* 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.

*Ответ:* 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?

*Ответ:* 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?

*Ответ:* 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.

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

## Часть 2.

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

*Решение:* Закон сохранения энергии:

$$\frac{mv^2}{2} = \frac{mv'^2}{2} + \frac{m_2 u^2}{2}.$$

Т.к.  $m_2 = nm$ , то  $v^2 = v'^2 + nu^2$ .

По теореме Пифагора:  $(mv)^2 + (mv')^2 = (m_2 u)^2$ , откуда  $v^2 + v'^2 = (nu)^2$ .

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

Решая систему уравнений 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 покоившимся ядром атома  ${}^4\text{He}$ . Найти длину волн обеих частиц в их Ц-системе до и после соударения.

*Решение:*

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

*Решение:*

- 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.

*Решение:*

- 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.

*Решение:*



- 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 отражению 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.

*Решение:*

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

- 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.

*Решение:*

$$\lambda = \frac{h}{p}; \quad p = mv = \frac{h}{p\lambda}.$$

$$mv(2\pi R) = \frac{h}{p\lambda}(2\pi R);$$

$$mv(2\pi R) = hn.$$

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

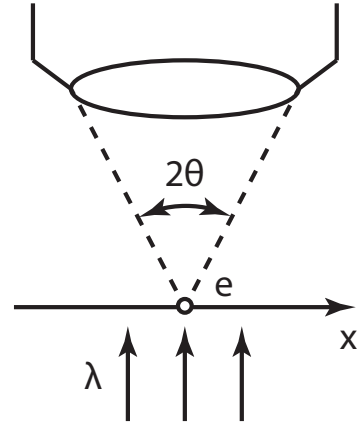
$$\frac{h}{p\lambda}(2\pi R) = nh; \quad 2\pi R = n\lambda; \quad R = \frac{n\lambda}{2\pi}$$

2.8. Убедиться, что измерения координаты частицы с помощью микроскопа вносит неопределенность в её импульс  $\Delta p_x$ , такую, что  $\Delta x \cdot \Delta p_x \geq h$ . Иметь в виду, что разрешение микроскопа  $d = \lambda / \sin \vartheta$ , где  $\lambda$  – длина волны используемого света.

*Решение:*

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  $\Delta p_x$  фотона. Но при рассеянии фотона на микрочастице последняя испытывает отдачу, в результате чего её импульс получит такую же неопределенность  $\Delta p_x$ , как и фотон:  $\Delta p_x \approx \hbar k \sin \vartheta$ .

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



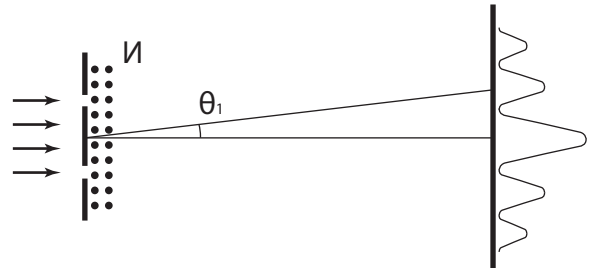
получим в результате:

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

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.

*Решение:*



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

*Решение:*

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.

*Решение:*

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

*Решение:*

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

*Решение:*



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.

*Решение:*

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 неопределенность координаты электрона на экране.

*Решение:*

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.

*Решение:*

2.17. Параллельный пучок атомов водорода со скоростью  $\nu = 600$  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.

*Решение:*

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  $\mu$  и возможные проекции  $\mu_z$  атома в состоянии:

а)  $^1F$

б)  $^2D_{3/2}$

Основные формулы:

$$\begin{aligned}\mu_L &= -\mu_B \sqrt{L(L+1)}; & \mu_{LZ} &= m_L \mu_B; & m_L &= 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm L \\ \mu_S &= -2\mu_B \sqrt{S(S+1)}; & \mu_{SZ} &= 2m_S \mu_B; & m_S &= -S, -S+1, \dots, +S \\ \mu_J &= -\mu_B g \sqrt{J(J+1)}; & \mu_{JZ} &= m_J g \mu_B; & m_J &= -J, -J+1, \dots, +J \\ g &= 1 + \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)}\end{aligned}$$

а)  $^1F : L = 3, S = 0, J = 3$

$$\begin{aligned}g &= 0 \\ \mu_L &= -2\mu_B \sqrt{3} \\ \mu_S &= 0 \\ \mu_J &= 0 \\ m_L &= 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3 \\ m_S &= 0 \\ m_J &= -3, -2, -1, 0, 1, 2, 3\end{aligned}$$

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

$$\begin{aligned}g &= \frac{12}{5} \\ \mu_L &= -\mu_B \sqrt{6} \\ \mu_S &= -\mu_B \sqrt{3} \\ \mu_J &= -\frac{6}{5} \mu_B \sqrt{15} \\ m_L &= 0, \pm 1, \pm 2 \\ m_S &= -\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \\ m_J &= -\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{3}{2}\end{aligned}$$

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  $B = 500$  Гс с угловой скоростью  $\omega = 5,5 \cdot 10^9$  рад/с. Определить механический и магнитный моменты атома.

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

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

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

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

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

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

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

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

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  $\omega$ , 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  $m_J$

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

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

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

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



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

а) полное расщепление,  $\text{см}^{-1}$ , 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,  $\text{см}^{-1}$ , 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:

$$-\frac{3}{2} \rightarrow -\frac{1}{2}; \quad -\frac{1}{2} \rightarrow -\frac{1}{2}; \quad -\frac{1}{2} \rightarrow \frac{1}{2};$$

$$\frac{1}{2} \rightarrow \frac{1}{2}; \quad \frac{1}{2} \rightarrow \frac{3}{2}; \quad \frac{3}{2} \rightarrow \frac{3}{2};$$

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  $\Delta E_1$  на  $\Delta E_2$ :

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

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 определения 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: