WARNING: я не даю гарантию, что задачи решены на 100% верно!!! **Последнее обновление:** 10:00 13/12/12 (bugfix)

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

- a) 1F
- б) $^{2}D_{3/2}$

Основные формулы:

$$\begin{split} \mu_L &= -\mu_{\rm B} \sqrt{L(L+1)}; \quad \mu_{LZ} = m_L \mu_{\rm B}; \quad m_L = 0, \pm 1, \pm 2, ..., \pm L \\ \mu_S &= -2\mu_{\rm B} \sqrt{S(S+1)}; \quad \mu_{SZ} = 2m_S \mu_{\rm B}; \quad m_S = -S, -S+1, ..., +S \\ \mu_J &= -\mu_{\rm B} g \sqrt{J(J+1)}; \quad \mu_{JZ} = m_J g \mu_{\rm B}; \quad m_J = -J, -J+1, ..., +J \\ g &= 1 + \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)} \\ \text{a)} \quad {}^1F: L = 3, S = 0, J = 3 \\ g &= 0 \\ \mu_L &= -2\mu_{\rm B} \sqrt{3} \\ \mu_S &= 0 \\ \mu_J &= 0 \\ m_L &= 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3 \\ m_S &= 0 \\ m_J &= -3, -2, -1, 0, 1, 2, 3 \\ \text{6)} \quad {}^2D_{3/2}: L = 2, S = \frac{1}{2}, J = \frac{3}{2} \\ g &= \frac{12}{5} \\ \mu_L &= -\mu_{\rm B} \sqrt{6} \\ \mu_S &= -\mu_{\rm B} \sqrt{3} \\ \mu_J &= -\frac{6}{5} \mu_{\rm B} \sqrt{15} \\ m_L &= 0, \pm 1, \pm 2 \\ m_S &= -\frac{1}{9}; \frac{1}{2} \end{split}$$

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

5.2: Вычислить магнитный момент атома водорода в основном сотоянии. Используем формулы из предыдущей задачи.

$$S=rac{1}{2}$$
 из условия $m_S=rac{1}{2}$ и $S=\sum m_S=rac{1}{2}$ $L=0;\quad J=L+S\Rightarrow J=rac{1}{2}$ $g=2;\quad \mu_L=0;\quad \mu_S=-\mu_{
m B}\sqrt{3};\quad \mu_J=-\mu_{
m B}\sqrt{3};$

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

a)
$${}^{5}F$$

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

$$M_{L}=2\hbar\sqrt{3}; \quad M_{S}=\hbar\sqrt{6}; \quad M_{J}=0$$
 6) ${}^{7}H$
$$L=4, \quad S=3, \quad J=0$$

$$M_{L}=2\hbar\sqrt{5}; \quad M_{S}=2\hbar\sqrt{3}; \quad M_{J}=0$$

5.4 Механический момент атома в состоянии 3F прецессирует в магнитном поле $B=500~\Gamma c$ с угловой скоростью $\omega=5.5\cdot 10^9$ рад/с. Определить механический и магнитный моменты атома.

$$\mu_{\rm B} = \frac{e\hbar}{2m}$$

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

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

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

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

$$M_{J} = \frac{\mu_{J}B}{\omega}$$

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

$$\mu_{J} = \mu_{B}g\sqrt{J(J+1)} = \frac{5\sqrt{5}}{2}\mu_{B}$$

В результате получаем:

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

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

$$\mu_{LZ} = m_L \mu_{\rm B}; \quad m_L = 0, \pm 1, \pm 2, ..., \pm L$$

 $\mu_{SZ} = 2m_S \mu_{\rm B}; \quad m_S = -S, -S + 1, ..., +S$
 $\mu_{JZ} = m_J g \mu_{\rm B}; \quad m_J = -J, -J + 1, ..., +J$
 $g = 1 + \frac{S(S+1) + J(J+1) - L(L+1)}{2J(J+1)}$

Рассмотрим каждое состояние атома в отдельности:

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

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

$$m_{L} = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3; \quad m_{S} = -\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{3}{2}$$

$$m_J=-rac{3}{2},-rac{1}{2},rac{1}{2},rac{3}{2}\leftarrow$$
 расщепление на 4 компоненты $\mu_{maxLZ}=3\mu_{\mathrm{B}}; \quad \mu_{maxSZ}=3\mu_{\mathrm{B}}; \quad \mu_{maxJZ}=rac{6}{5}\mu_{\mathrm{B}};$

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

$$g=1+rac{35}{4}+rac{35}{4}=2$$

$$rac{35}{2}$$
 $m_L=0; \quad m_S=-rac{5}{2},-rac{3}{2},-rac{1}{2},rac{1}{2},rac{3}{2},rac{5}{2}$ $m_J=-rac{5}{2},-rac{3}{2},rac{1}{2},rac{1}{2},rac{3}{2},rac{5}{2}$ \leftarrow расщепление на 6 компонент $\mu_{maxLZ}=0; \quad \mu_{maxSZ}=5\mu_{
m B}; \quad \mu_{maxJZ}=10\mu_{
m B}$

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

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

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

 $m_J=-4,-3,-2,-1,0,1,2,3,4\leftarrow$ расщепление на 9 компонент $\mu_{maxLZ}=2\mu_{\rm B};\quad \mu_{maxSZ}=\mu_{\rm B};\quad \mu_{maxJZ}=3\mu_{\rm B}$

б) Запишем для каждого терма значение m_J

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

 $m_J = -2, -1, 0, 1, 2 \leftarrow$ 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 $B = 3{,}00 \text{ к}\Gamma \text{c}$. Определить:
 - а) полное расщепление, ${\rm cm}^{-1}$, терма 1D
 - б) спектральный символ синглетного терма, полная ширина расщепления которого составляет $0.84~{\rm cm}^{-1}$.

Используемые формулы:

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

$$m_J = -J, -J+1, ..., +J$$

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

a) ${}^{1}D:L=2,S=0,J=2;\quad m_{I}=-2,-1,0,1,2;\quad g=1$

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

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

б)

- **5.8** Спектральная линия L=0.612 мкм обусловлена переходом между двумя синглетными термами атома. Определить интервал L между крайними компонентами этой линии в магнитном поле $B=10.0~{\rm k\Gamma c}$.
- **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 $\mu_{\rm B}B/\hbar$
 - б) интервал, см $^{-1}$, между крайними компонентами, если $B=5{,}00~{\rm k}\Gamma{\rm c}$.

Используемые формул:

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

$$m_J = -J, -J+1, ..., +J$$

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

Распишем значения двух термов:

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

a)
$$^2S_{\frac{1}{2}}:L=0,S=\frac{1}{2},J=\frac{1}{2};\quad m_J=-\frac{1}{2},\frac{1}{2};\quad g=2$$
 a)
$$\Delta\omega=\frac{\mu_{\rm B}B}{\hbar}(\frac{3}{2}\cdot\frac{1}{3}-2\cdot\frac{1}{2})=-\frac{1}{2}\frac{\mu_{\rm B}B}{\hbar}$$
 6)

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

a)
$$^{2}D_{3/2} \rightarrow ^{2}P_{3/2}$$

б)
$${}^{2}D_{5/2} → {}^{2}P_{3/2}$$

Используемые формулы:

$$\Delta\omega = \frac{\mu_{\rm B}B}{\hbar}(m_{J2}g_2 - m_{J1}g_1) = \Delta\omega_0(m_{J2}g_2 - m_{J1}g_1)$$
$$g = 1 + \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)}$$

Рассмотрим пункт решение для пункта а:

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

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

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

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

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

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

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

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

6

Считаем $\Delta \omega$ для чисел:

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

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 ($1.38 \cdot 10^{-23} \text{Дж} \cdot \text{K}^{-1}$), T – температура; выражаем и находим значение для каждой из молекул.

- **5.12** Определить момент импульса молекулы кислорода в состоянии с вращательной энергией 2,16 мэВ.
- **5.13** Найти для молекулы HCl вращательные квантовые числа двух соседних уровней, разность энергий которых равна 7,86 мэВ.
- **5.14** Найти механический момент молекулы кислорода, вращательная энергия которой $E=2,16\,$ мэВ.
- **5.15** Для двухатомной молекулы известны интервалы между тремя последовательными вращательными уровнями $\Delta E_1=0.20$ мэВ и $\Delta E_2=0.30$ мэВ. Найти вращательное квантовое число среднего уровня исоответствующий момент инерции молекулы.

Используемая формула:

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

Запишем формулы для вращательных уровней:

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

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

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

Сделав обозначение n = J + 1.

Распишем разность энергий через формулы для уровней:

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

$$\Delta E_1 = E_{J2} - E_{J1} = \frac{\hbar^2}{2I}((J+2)(J+3) - (J+1)(J+2)) = \frac{\hbar^2}{I}(J+2)$$

Найдём значение J поделив ΔE_1 на ΔE_2 :

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

Сделав 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 $I=1.44\cdot 10^{-39} \mathrm{r\cdot cm^2}$.
- **5.17** Найти отношение энергий, которые необходимо затратить для возбуждения двухатомной молекулы на первый колебательный и первый вращательный уровни. Вычислить это отношение для следующих молекул:
 - a) H_2
 - б) *HI*
 - B) I_2