

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 – $(\nu_0 - \Delta\nu)$, ν_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.

5.1: Основные формулы:

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

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

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

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

a) $^1F : L = 3, S = 0, J = 3$

$$g = 0$$

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

$$\mu_S = 0$$

$$\mu_J = 0$$

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

$$m_S = 0$$

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

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: 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: Основные формулы:

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

a) 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:

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

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

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

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

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

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

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

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

В результате получаем:

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

5.5:

5.6:

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:

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

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

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

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

$$\mu_{\max LZ} = 3\mu_B; \quad \mu_{\max SZ} = 3\mu_B; \quad \mu_{\max JZ} = \frac{6}{5}\mu_B;$$

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

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

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

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

$$\mu_{\max LZ} = 0; \quad \mu_{\max SZ} = 5\mu_B; \quad \mu_{\max JZ} = 10\mu_B$$

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

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

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

$m_J = -4, -3, -2, -1, 0, 1, 2, 3, 4 \leftarrow$ 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

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

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

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

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

5.7: 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:

5.9: Используемые формул:

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

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

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

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: 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:

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:

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:

$$\Delta E_1 = E_{J_2} - E_{J_1} = \frac{\hbar^2}{2I}((J+1)(J+2) - J(J+1)) = \frac{\hbar^2}{I}(J+1)$$

$$\Delta E_2 = E_{J_3} - E_{J_2} = \frac{\hbar^2}{2I}((J+2)(J+3) - (J+1)(J+2)) = \frac{\hbar^2}{I}(J+2)$$

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:

5.17: