Співвідношення невизначеностей

1. Оцінити за допомогою співвідношення невизначеностей мінімальну можливу енергію електрону в атомі водню та відповідну ефективну відстань від ядра.

$$\Delta p \Delta r \geq \hbar, \quad \Delta r = r, \quad p \geq \Delta p \geq \frac{\hbar}{r}$$

$$E = \frac{p^2}{2m} - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r} = \frac{\hbar^2}{2mr^2} - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}$$

$$\frac{dE}{dr} = 0 \qquad -\frac{\hbar^2}{m r_0^3} + \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r_0^2} = 0 = \frac{-4\pi\varepsilon_0\hbar^2 + me^2 r_0}{4\pi\varepsilon_0 m r_0^3} \Rightarrow r_0 = \frac{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}{me^2} = 0,5$$

$$E_{min} = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}{me^2}\right)^{-2} - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{me^2}{4\pi\varepsilon_0\hbar^2} = -\frac{me^4}{2(4\pi\varepsilon_0)^2\hbar^2} \approx -13,6\,eV$$

2 - Д/З. Частинка масою m рухається в одновимірному потенціальному полі $U = \frac{kx^2}{2}$ (гармонічний осцилятор). Оцінити за допомогою співвідношення невизначеностей мінімально можливу енергію частинки в такому полі.

$$p \sim \Delta p \geq \frac{\hbar}{\Delta x} \sim \frac{\hbar}{x} \qquad E = T + U = \frac{\hbar^2}{2mx^2} + \frac{kx^2}{2}$$

$$\frac{dE}{dx} = 0 = -\frac{\hbar^2}{mx_0^3} + kx_0 = \frac{mkx_0^4 - \hbar^2}{mx_0^3} \Rightarrow x_0^4 = \frac{\hbar^2}{mk}$$

$$E_{min} = \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\sqrt{mk}}{\hbar} + \frac{k}{2}\frac{\hbar}{\sqrt{mk}} = \hbar\sqrt{\frac{k}{m}} = \hbar\omega$$

(5б - цифру)

Задачі.

1. ~~Хвильова функція~~ Частинка масою m перебуває ~~для основного~~ стану в потенціальному полі $U = \frac{kx^2}{2}$. її хв-ва ф-я має вигляд $\psi(x) = Ae^{-\alpha x^2}$; A - коефіцієнт нормування, α - додатна стала. За допомогою рівняння Шредінгера знайти α і E в цьому стані.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi'' + U\psi = E\psi$$

$$\psi'' + \frac{2m}{\hbar^2}(E-U)\psi = 0$$

$$\psi' = -\alpha A\, 2x\, e^{-\alpha x^2} \qquad \psi'' = -2\alpha A\left(e^{-\alpha x^2} - 2\alpha x^2 e^{-\alpha x^2}\right)$$

$$4\alpha^2 x^2 - 2\alpha + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E - \frac{kx^2}{2}\right) = 0$$

$$x^0:\ -2\alpha + \frac{2m}{\hbar^2}E = 0 \qquad x^2:\ 4\alpha^2 - \frac{km}{\hbar^2} = 0$$

$\Rightarrow \alpha = +\frac{\sqrt{km}}{2\hbar}$ бо ψ має бути обмежена. $\quad E = \frac{\alpha\hbar^2}{m} = \frac{1}{2}\hbar\sqrt{\frac{k}{m}} = \frac{1}{2}\hbar\omega$

2. Підрахувати за допомогою рів-ня Шредінгера похідну по часу від середнього значення деякої механічної величини F, якій відповідає оператор $\hat{F}$.

$$\bar{F} = \int \psi^* \hat{F} \psi \, d\tau$$

$$\frac{d\bar F}{dt} = \int \psi^* \frac{\partial \hat F}{\partial t}\psi\, d\tau + \int \frac{\partial \psi^*}{\partial t}\hat F \psi\, d\tau + \int \psi^* \hat F \frac{\partial \psi}{\partial t} d\tau =$$

$$\hat H \psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}, \quad (\hat H \psi)^* = -i\hbar \frac{\partial \psi^*}{\partial t}$$

$$= \int \psi^* \frac{\partial \hat F}{\partial t}\psi\, d\tau - \frac{1}{i\hbar}\int (\hat H \psi)^* \hat F \psi\, d\tau + \frac{1}{i\hbar}\int \psi^* \hat F \hat H \psi\, d\tau$$

$\hat H$ - самоспряжений $\quad \int (\hat H \psi_1)^* \psi_2\, d\tau = \int \psi_1^* \hat H \psi_2\, d\tau$

$$= \int \psi^* \frac{\partial \hat F}{\partial t}\psi\, d\tau + \frac{i}{\hbar}\int \psi^* \hat H \hat F \psi\, d\tau - \frac{i}{\hbar}\int \psi^* \hat F \hat H \psi\, d\tau =$$

$$= \int \psi^* \left(\frac{\partial \hat F}{\partial t} + \frac{i}{\hbar}(\hat H \hat F - \hat F \hat H)\right)\psi\, d\tau = \int \psi^* \left(\frac{\partial \hat F}{\partial t} + \frac{i}{\hbar}[\hat H \hat F]\right)\psi$$

$$\frac{d\hat F}{dt} = \frac{\partial \hat F}{\partial t} + \frac{i}{\hbar}[\hat H, \hat F], \quad \text{бо } \frac{d\bar F}{dt} = \int \psi^* \frac{d\hat F}{dt}\psi\, d\tau \text{ - за означ.}$$

3. Довести, що $\hat{\vec L} \times \hat{\vec L} = i\hbar \hat{\vec L}$

$\hat{\vec L} = [\hat{\vec r} \times \hat{\vec p}] \Rightarrow \hat L_x = \hat y \hat p_z - \hat z \hat p_y;\ \hat L_y = \hat z \hat p_x - \hat x \hat p_z$

$\hat L_z = \hat x \hat p_y - \hat y \hat p_x$

$$(\hat{\vec L} \times \hat{\vec L})_x = \hat L_y \hat L_z - \hat L_z \hat L_y = (\hat z \hat p_x - \hat x \hat p_z)(\hat x \hat p_y - \hat y \hat p_x) - (\hat x \hat p_y - \hat y \hat p_x) \times$$

$$\times (\hat z \hat p_x - \hat x \hat p_z) = \hat z \hat p_x \hat x \hat p_y - \underline{\hat z \hat p_x \hat y \hat p_x} - \underline{\hat x \hat p_z \hat x \hat p_y} + \hat x \hat p_z \hat y \hat p_x -$$

$$- \hat x \hat p_y \hat z \hat p_x + \underline{\hat x \hat p_y \hat x \hat p_z} + \underline{\hat y \hat p_x \hat z \hat p_x} - \hat y \hat p_x \hat x \hat p_z$$

(5б - години)

— так де f щось однакове.

$$[\hat{x}_k \hat{p}_e] = i\hbar\delta_{ke}, \quad \hat{x}_k\hat{p}_e = \hat{p}_e x_k + i\hbar\delta_{ke}, \quad \hat{x}_k\hat{x}_e = \hat{x}_e\hat{x}_k, \quad \hat{p}_k\hat{p}_e = \hat{p}_e\hat{p}_k$$

$$-\hat{z}\hat{p}_x\hat{y}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z\hat{x}\hat{p}_y + \hat{x}\hat{p}_y\hat{x}\hat{p}_z + \hat{y}\hat{p}_x\hat{z}\hat{p}_x = \cancel{-\hat{z}\hat{y}\hat{p}_x\hat{p}_x} - \cancel{\hat{x}\hat{x}\hat{p}_z\hat{p}_y} +$$

$$+ \cancel{\hat{x}\hat{x}\hat{p}_y\hat{p}_z} + \cancel{\hat{y}\hat{z}\hat{p}_x\hat{p}_x} = 0$$

$$= \hat{z}\hat{p}_x\hat{x}\hat{p}_y + \hat{x}\hat{p}_z\hat{y}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_y\hat{z}\hat{p}_x - \hat{y}\hat{p}_x\hat{x}\hat{p}_z =$$

$$= \hat{z}(\hat{x}\hat{p}_x - i\hbar)\hat{p}_y + \hat{x}\hat{y}\hat{p}_z\hat{p}_x - \hat{x}\hat{z}\hat{p}_y\hat{p}_x - \hat{y}(\hat{x}\hat{p}_x - i\hbar)\hat{p}_z =$$

$$= \cancel{\hat{z}\hat{x}\hat{p}_x\hat{p}_y} - i\hbar\hat{z}\hat{p}_y + \cancel{\hat{x}\hat{y}\hat{p}_z\hat{p}_x} - \cancel{\hat{z}\hat{x}\hat{p}_x\hat{p}_y} - \cancel{\hat{x}\hat{y}\hat{p}_z\hat{p}_x} + i\hbar\hat{y}\hat{p}_z =$$

$$= i\hbar(\hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y) = i\hbar L_x$$

$$\Rightarrow \hat{L}\times\hat{L} = i\hbar\hat{L} \quad \text{або} \quad [\hat{L}_y, \hat{L}_z] = i\hbar\hat{L}_x$$

4. Довести, що $\hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2$ комутує з будь-якою L_i (використати результати попередньої задачі)

$$[\hat{L}^2, \hat{L}_x] = \hat{L}^2\hat{L}_x - \hat{L}_x\hat{L}^2 = \hat{L}_x^3 + \hat{L}_y^2\hat{L}_x + \hat{L}_z^2 L_x - \hat{L}_x^3 -$$

$$- \hat{L}_x\hat{L}_y^2 - \hat{L}_x\hat{L}_z^2 = \hat{L}_y^2\hat{L}_x - \hat{L}_x\hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2\hat{L}_x - \hat{L}_x\hat{L}_z^2 =$$

$$= \hat{L}_y^2\hat{L}_x - \hat{L}_y\hat{L}_x\hat{L}_y + \hat{L}_y\hat{L}_x\hat{L}_y - \hat{L}_x\hat{L}_y^2 +$$

$$+ \hat{L}_z^2\hat{L}_x - \hat{L}_z\hat{L}_x\hat{L}_z + \hat{L}_z\hat{L}_x\hat{L}_z - \hat{L}_x L_z^2 =$$

$$= \hat{L}_y\overbrace{(\hat{L}_y\hat{L}_x - \hat{L}_x\hat{L}_y)}^{-[\hat{L}_x\hat{L}_y]_z = -i\hbar L_z} + (\hat{L}_y\hat{L}_x - \hat{L}_x\hat{L}_y)\hat{L}_y +$$

$$+ \hat{L}_z\underbrace{(\hat{L}_z\hat{L}_x - \hat{L}_x\hat{L}_z)}_{[\hat{L}_x\hat{L}]_y = i\hbar\hat{L}_y} + (\hat{L}_z\hat{L}_x - \hat{L}_x\hat{L}_z)\hat{L}_z =$$

$$= \cancel{L_y} - i\hbar\hat{L}_y\hat{L}_z - i\hbar\hat{L}_z\hat{L}_y + i\hbar\hat{L}_z\hat{L}_y + i\hbar\hat{L}_y\hat{L}_z = \emptyset$$

- Д/з

5. Довести правила комутації: а) $[\hat{L}_x, \hat{p}_x] = 0$, б) $[\hat{L}_x, \hat{p}_y] = i\hbar\hat{p}_z$
в) $[\hat{L}_x, \hat{p}_z] = -i\hbar\hat{p}_y$

а) $[\hat{L}_x, \hat{p}_x] = \hat{L}_x\hat{p}_x - \hat{p}_x\hat{L}_x = (\hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y)p_x - p_x(\hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y) = 0$

б) $[\hat{L}_x, \hat{p}_y] = (\hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y)\hat{p}_y - \hat{p}_y(\hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y) =$

$= \hat{y}\hat{p}_y\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y\hat{p}_y - \hat{p}_y\hat{y}\hat{p}_z + \hat{z}\hat{p}_y\hat{p}_y = (\hat{p}_y\hat{y} + i\hbar)\hat{p}_z -$

$- \hat{p}_y\hat{y}\hat{p}_z = i\hbar\hat{p}_z$

в) $[\hat{L}_x, \hat{p}_z] = (\hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y)\hat{p}_z - \hat{p}_z(\hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y) =$

$= \hat{y}\hat{p}_z\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_z\hat{p}_y - \hat{p}_z\hat{y}\hat{p}_z + \hat{p}_z\hat{z}\hat{p}_y = -\hat{z}\hat{p}_z\hat{p}_y + (\hat{z}\hat{p}_z - i\hbar$

$= -i\hbar\hat{p}$

№11, 12 книжка

(5 a - формул)

В циліндричній системі координат $\hat{L}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}$

В сферичній — " — " — $\cancel{\hat{L}^2 = \left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]}$

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]$$

$\hat{L}_z = -i\hbar[\vec{r}\times\vec{\nabla}]_z$ в цс.к. $\vec{\nabla}a = \left\{\frac{\partial a}{\partial r}\vec{e}_r;\ \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\varphi}\vec{e}_\varphi;\ \frac{\partial}{\partial z}\vec{e}_z\right\}$

$$\hat{L}_z = -i\hbar\begin{vmatrix}\vec{e}_r & \vec{e}_\varphi & \vec{e}_z\\ r & 0 & 0\\ \frac{\partial}{\partial r} & \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\varphi} & \frac{\partial}{\partial z}\end{vmatrix} \qquad \hat{L}_z = -i\hbar\, r\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\varphi} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}$$

$$\hat{L}^2 = [\hat{\vec{r}}\times\hat{\vec{p}}][\hat{\vec{r}}\times\hat{\vec{p}}] = e_{ikl}e_{imn}\hat{x}_k\hat{p}_l\hat{x}_m\hat{p}_n =$$

$$e_{ikl}e_{imn} = \delta_{km}\delta_{ln} - \delta_{kn}\delta_{lm}$$

$$= \hat{x}_k\hat{p}_l\hat{x}_k\hat{p}_l - \hat{x}_k\hat{p}_l\hat{x}_l\hat{p}_k = [\hat{p}_l\hat{x}_k = \hat{x}_k\hat{p}_l - i\hbar\delta_{kl}] =$$

$$= \hat{x}_k(\hat{x}_k\hat{p}_l - i\hbar\delta_{kl})\hat{p}_l - \hat{x}_k\hat{p}_l(\hat{p}_k\hat{x}_l + i\hbar\delta_{kl}) =$$

$$= \hat{x}_k\hat{x}_k\hat{p}_l\hat{p}_l - i\hbar\delta_{kl}\hat{x}_k\hat{p}_l - \hat{x}_k\hat{p}_l\hat{p}_k\hat{x}_l - i\hbar\delta_{kl}\hat{x}_k\hat{p}_l =$$

$$= \hat{x}_k\hat{x}_k\hat{p}_l\hat{p}_l - 2i\hbar\hat{x}_l\hat{p}_l - \hat{x}_k\hat{p}_k\hat{p}_l\hat{x}_l =$$

$$= \hat{x}_k\hat{x}_k\hat{p}_l\hat{p}_l - 2i\hbar\hat{x}_l\hat{p}_l - \hat{x}_k\hat{p}_k(\hat{x}_l\hat{p}_l - i\hbar\delta_{ll}) =$$

$$= \hat{x}_k\hat{x}_k\hat{p}_l\hat{p}_l - \hat{x}_k\hat{p}_k\hat{x}_l\hat{p}_l - 2i\hbar\hat{x}_l\hat{p}_l + 3i\hbar\hat{x}_l\hat{p}_l =$$

"3" до сумування по індексах, що повторюються

$$= \hat{r}^2 \hat{p}^2 - (\hat{\vec r}\hat{\vec p})^2 + i\hbar(\hat{\vec r}\hat{\vec p}) = \hat{L}^2$$

$\cancel{\hat p^2 = -\hbar^2\Delta}$ В ССК : $\vec\nabla = \left(\frac{\partial}{\partial r}\vec e_r ; \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}\vec e_\theta ; \frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\vec e_\varphi\right)$

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2}\underbrace{\left(\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin^2}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right)}_{\Delta_{\theta,\varphi}}$$

$$\hat p^2 = -\hbar^2\Delta \quad , \hat r^2\hat p^2 = -\hbar^2\left[r^2\left(\frac{\partial}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right) + \Delta_{\theta\varphi}\right]$$

$$(\hat{\vec r}\hat{\vec p}) = -i\hbar\vec r\vec\nabla = -i\hbar r\nabla_r = -i\hbar r\frac{\partial}{\partial r}$$

$$(\hat r\hat p)^2 = -\hbar^2\left(r\frac{\partial}{\partial r}\right)^2$$

$$\hat L^2 = -\hbar^2\left[\Delta_{\theta\varphi} + r^2\left(\frac{\partial}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right) - r\frac{\partial}{\partial r}\cdot r\frac{\partial}{\partial r} - r\frac{\partial}{\partial r}\right] = -\hbar^2\Delta_{\theta\varphi}$$

$$\hat L^2 = -\hbar^2\left(\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right)$$

Власні ф-ї і власні знач. $\hat L_z$

$$\hat L_z\psi = \lambda\psi \qquad -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}\psi = \lambda\psi \qquad \frac{d\psi}{\psi} = \frac{i\lambda}{\hbar}d\varphi$$

$$\psi = Ce^{i\frac{\lambda}{\hbar}\varphi}$$

ψ обмежене => λ дійсне

ψ однозначна φ, $\varphi+2\pi$ означають одну й ту ж точку

$$\psi(\varphi) = \psi(\varphi+2\pi) \qquad Ce^{i\frac{\lambda}{\hbar}\varphi} = Ce^{i\frac{\lambda}{\hbar}\varphi}e^{i\frac{2\pi\lambda}{\hbar}}$$

(5δ - сходин)

$e^{i\frac{2\pi\lambda}{\hbar}} = 1$, $\frac{2\pi\lambda}{\hbar} = 2\pi m$, $\lambda = \hbar m$, m - ціле

$\psi_m(\varphi) = C e^{im\varphi}$ $\int_0^{2\pi} \psi_m^* \psi_m \, d\varphi = 1 \Rightarrow C = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}$

$\psi_m = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi}$, $L_z = \hbar m$

Власне значення $\hat{L}^2 - \hbar^2(l+1)l$, ~~$l = const$~~

$L = \hbar\sqrt{l(l+1)}$, $l = 0, 1, 2 \dots$

$\hat{L}^2, \hat{L}_z$ - комутують між собою => мають спільну систему власних функцій, l і m зв'язані, $-l \leq m \leq l$ - при фіксованому l.

Власна ф-я $\hat{L}^2$ - $Y_{l,m}(\theta,\varphi) = C_{l,m} P_l^{|m|}(\cos\theta) e^{im\varphi}$

$P_l^m(t)$ - приєднана ф-я Лежандра

$P_l^m(\cos\theta) = (\sin\theta)^{m} \cdot P_l^{(m)}(\cos\theta)$, P_l - l-й поліном Лежандра

(m - степінь, (m) - похідна)

C_{lm} з умови $\int |Y_{lm}|^2 \, d\Omega = 1$ ($\sin\theta d\theta d\varphi$) $\Rightarrow C_{lm} = \sqrt{\frac{1}{2\pi} \frac{2l+1}{2} \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}}$

Електрон в атомі характеризується чотирьма квантовими числами:

1) головним квантовим числом n $: 0, 1, 2 ..$

2) орбітальним квантовим числом l, $l = 0, 1, 2 ... n-1$

3) орбітальним квантовим магнітним числом $m_l: -l, -(l-1) .... l$

4) спіновим квантовим числом m_s, $m_s = \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$.

Для водню енергія ел-ну залежить лише від n

l - визначає квадрат моменту імпульса ел-ну орбітального $L^2 = \hbar^2 l(l+1)$

m_l - визначає проєкцію моменту імпульса на вибраний напрямок $L_z = m_l \hbar$

Т.я для водню енергія залежить лише від n - виродження по l і m_l. (виродження випадкове, повязане з тим що протон можна розглядати як точковий заряд $\Rightarrow$ кулонівська взаємодія). Для лужних металів - некулонівське центрально симетричне поле $\Rightarrow$ виродження по l знімається, енергія $= f(n, l)$

Електрон має момент повязаний зі спіном, як і для орбіт.

$S^2_{сп} = \hbar^2(s+1)s$, $s = \frac{1}{2}$ m_s визначає проекцію спіна на виділений напрямок (визначається напрямом $\vec{L}$).

Спін може бути орієнтований як по $\vec{L}$, $m_s = \frac{1}{2}$ так і проти $\vec{L}$, $\Rightarrow m_s = -\frac{1}{2}$.

(5б - годину)

Орбітальний момент кількості руху та спіновий момент кількості руху складаються в повний момент кількості руху.

$$\vec{j} = \vec{l} + \vec{s}$$

$$j^2 = \hbar^2 (j+1) j, \quad j = l + 1/2;\ l - 1/2.$$

Замість n, l, m_l, m_s для характеристики ~~...~~ стану електрона можна використовувати інші четвірки чисел.

В спектроскопії використовуються $n, l, j, 2s+1$.

Стан записується у вигляді

$$n\,^{2s+1}(A)_j$$

n - число n

A - буква, що визначається l

l	0	1	2	3	4	5	6
(A)	s	p	d	f	g	h	i

Пр. $3^2S_{1/2}$ $\quad n=3,\ l=0,\ j=1/2$

$4^2d_{3/2}$ $\quad n=4,\ l=2,\ j=3/2,\ j=l-\frac{1}{2} \Rightarrow m_s=-\frac{1}{2}$

У атома немає двох електронів, в яких всі числа n, l, m_l, m_s однакові. На оболонці $2n^2$ електронів

В атомі, як правило не один електрон. Розглядають незаповнені оболонки. Для наближення L-S зв'язку (зв'язок Рассела-Саундерса, слабкий зв'язок)

$\vec{L} = \sum \vec{l_i}$, $S = \sum S_i$

Для двох електронів $L = l_1 + l_2,\ l_1 + l_2 - 1, \dots |l_1 - l_2|$

$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$, $|\vec{J}| = \hbar\sqrt{J(J+1)}$, $J = L + S \dots |L - S|$

$\varkappa(L)_J$ $\qquad \varkappa = 2S+1$ – мультиплетність терму.

$L =$	0	1	2	3	4	5	6
(L):	S	P	D	F	G	H	I

1. p, d – побудувати можливі терми

p, $l_1 = 1$, $s_1 = \frac{1}{2}$

d $l_2 = 2$, $s_2 = \frac{1}{2}$

$L = 3, 2, 1 \qquad S = 1, 0$

$L = 3,\ S = 1 \to J = 4, 3, 2 \qquad L = 3,\ S = 0,\ J = 3$

${}^3F_4,\ {}^3F_3,\ {}^3F_2 \qquad {}^1F_3$

$L = 2,\ S = 1 \quad J = 3, 2, 1 \qquad L = 2,\ S = 0 \quad J = 2$

${}^3D_3,\ {}^3D_2,\ {}^3D_1 \qquad {}^1D_2$

$L = 1,\ S = 1,\ J = 2, 1, 0 \qquad L = 1\ S = 0,\ J = 1$

${}^3P_2\ \ {}^3P_1,\ {}^3P_0 \qquad {}^1P_1$

2. p^2 – побудувати можливі терми

$l_{1,2} = 1, \quad m_{l_{1,2}} = 0, \pm 1, \quad m_{s_{1,2}} = \pm 1/2$

$m_L = m_{l_1} + m_{l_2}, \qquad m_S = m_{s_1} + m_{s_2}$

m_l	m_s
1	1/2
1	-1/2
0	1/2
0	-1/2
-1	1/2, -1/2

(5а - додому)

(m_L, m_S)

$\underline{(2,0)}$ $(1,1)$ $(1,0)$ $(0,1)$ $(0,0)$

$\underline{(1,0)}$ $(1,-1)$ $(0,0)$ $(0,-1)$

$\underline{(0,0)}$ $(-1,1)$ $(-1,0)$

$\underline{(-1,0)}$ $(-1,-1)$

$\underline{(-2,0)}$

max $m_L = 2$, $m_S = 0$ $\Rightarrow \exists\, L = 2$, $S = 0$, $m_L = \pm 2, \pm 1, 0$ $^1D_2$ $J = 2$

$m_L = 1$ $m_S = -1, 0, 1$

З тих що лишились max $m_L = 1$ $L = 1$ $m_L = \pm 1, 0$

max $m_S = 1$ $S = 1$ $m_S = \pm 1, 0$

$J = 2, 1, 0$ $\Rightarrow$ $^3P_2$, $^3P_1$, $^3P_0$

$m_L = 0$, $m_S = 0$ $L = 0$, $S = 0$, $J = 0$ $^1S_0$

3. ДЗ 3. ~~s, d~~ - зовнішні електрони, побудувати терми

s $l_1 = 0$, $s_1 = \frac{1}{2}$ d $l = 2$, $s = \frac{1}{2}$

$L = 2$, $S = 1, 0$ $\Rightarrow$ а) $L = 2, S = 1$ $J = 3, 2, 1$

$^3D_3$, $^3D_2$, $^3D_1$

б) $L = 2$, $S = 0$ $J = 2$

$^1D_2$

Краще для d, f - електронів

d $l = 2$, $s = \frac{1}{2}$ f $l = 3$, $s = \frac{1}{2}$

$L = 5, 4, 3, 2, 1$ $S = 1, 0$

$L=5$,	$S=1$	$J=6,5,4$	${}^3H_{6,5,4}$
	$S=0$	$J=5$	${}^1H_5$
$L=4$	$S=1$	$J=5,4,3$	${}^3G_{5,4,3}$
	$S=0$	$J=4$	${}^1G_4$
$L=3$	$S=1$	$J=4,3,2$	${}^3F_{4,3,2}$
	$S=0$	$J=3$	${}^1F_3$
$L=2$	$S=1$	$J=3,2,1$	${}^3D_{3,2,1}$
	$S=0$	$J=2$	${}^1D_2$
$L=1$	$S=1$	$J=2,1,0$	${}^3P_{2,1,0}$
	$S=0$	$J=1$	${}^1P_1$

4. Знайти максимальний можливий повний механічний момент та відповідне спектральне позначення терма атома а) Na, валентний електрон якого має головне квантове число 4
б) з електронною конфігурацією $1s^2\ 2p\ 3d$

а) $S=1/2$, $L_{max} = n-1 = 3$, $J_{max} = \frac{7}{2}$

$|\vec{J}| = \hbar\frac{\sqrt{63}}{2}$ $\quad {}^2F_{7/2}$

б) $1s^2$ - замкнена $\quad S_{max}=1$, $L_{max} = 1+2=3$ $\quad J_{max}=4$

$|\vec{J}| = \hbar\sqrt{4\cdot 5} = \hbar\sqrt{20} = 2\hbar\sqrt{5}$, $\quad {}^3F_4$

(5б – годину)

5 Знайти можливі значення повних механічних моментів атомів, що знаходяться в станах ^4P та ^5D

^4P, $S = \frac{3}{2}$, $L = 1$, $J = \frac{5}{2}, \frac{3}{2}; \frac{1}{2}$ $|\vec{J}| = \hbar\frac{\sqrt{35}}{2}; \hbar\frac{\sqrt{15}}{2}; \hbar\frac{\sqrt{3}}{2}$

^5D $S = 2$, $L = 2$, $J = 4, 3, 2, 1, 0$ $|\vec{J}| = \hbar\sqrt{20}, \hbar\sqrt{12}, \hbar\sqrt{6}, \hbar\sqrt{2}, 0$

D/3.

6. Відомо, що у F стані ~~число~~ кількість можливих значень квантового числа J дорівнює п'яти. Визначити спіновий механічний момент в [redacted] цьому стані

$F \Rightarrow L = 3$ $S = 2$ $|\vec{M}_S| = \hbar\sqrt{6}$

7. Атом знаходиться в стані, мультиплетність якого дорівнює трьом, а повний механічний момент $-\hbar\sqrt{20}$. Яким може бути відповідне квантове число L?

$|\vec{J}| = \hbar\sqrt{20} \Rightarrow J = 4$, $S = 1$ $\Rightarrow L = 3, 4, 5$

Правила Хунда

1. Мінімальну енергію має терм з максимальним значенням S при даній електронній конфігурації і максимальним можливим при цьому S_{max} значенням L

2. Для основного нормального терму якщо підоболонка заповнена на половину або менше ніж на половину, то $J = |L - S|$. В

решті випадків $J = L + S$

1) S_{MAX} 2) L_{MAX} 3) $J = |L - S|$ менше рівно ~~ніж~~ на половину

p^2 – ось в нас $S_{MAX} = 1$, при цьому S ~~max~~ $L_{MAX} = 1$,

p^2 => 2 електрони на p-підоболонці, ~~половина~~ це менше половини

$(< 6/2)$ => $J = 0$ $^3P_0$ має мінімальну енергію.

1

~~Скориставшись~~ правилами Хунда знайти число електронів в єдиній незаповненій підоболонці атома, основний терм якого а) $^3F_2$, б) $^2P_{3/2}$ в) $^6S_{5/2}$

а) $^3F_2$ => 1) $S = 1$, 2) $L = 3$ 3) $J = 2 = L - S$ – оболонка заповнена менше ніж на половину.

$s^2 \neq (3)$, ~~p^2~~ ~~p~~

$p^2 \neq (2)$ ($m_{s_1} = 1/2$, $m_{s_2} = 1/2$, $m_{l_1} = 1$, $m_{l_2} = 0$) S-ціле => к-ть електронів парна.

$p^4 \neq 3$

$\boxed{d^2}$ $m_{s_1} = 1/2$, $m_{s_2} = 1/2$ => (1)

$m_{l_1} = 2$, $m_{l_2} = 1$ => (2)

2 б) $^2P_{3/2}$ 1) $S = \frac{1}{2}$ 2) $L = 1$ 3) $J = 3/2 = $ ~~$\frac{1}{2}$~~ $L + S$ підоболонка ≥ половини

$\Downarrow$ к-ть електронів непарна

$s^1 \neq (2)$, $p^1 \neq (3)$, p^3: $S_{MAX} = \frac{3}{2} \neq (1)$

$\boxed{p^5}$ = (3), $m_{s_1} = m_{s_2} = m_{s_3} = \frac{1}{2}$, $m_{s_4} = m_{s_5} = -\frac{1}{2}$ => (1)

$m_{l_1} = 1$, $m_{l_2} = 0$, $m_{l_3} = -1$, $m_{l_4} = 1$, $m_{l_5} = 0$ => (2)

$d^1, \neq (3)$, $d^3 \neq (3)$, d^5 $S_{max} = 5/2 \neq (1)$ d^7 $S_{max} = \frac{3}{2} \neq 1$

d^9 m_s $\pm 1/2$ $\pm 1/2$ $\pm 1/2$ $\pm 1/2$ $+1/2$ $= (1)$
m_l 2 1 0 -1 -2 $\neq (3)$ $(L = 2)$

б) $^6S_{5/2}$ $S = 5/2$, $L = 0$, $J = 5$

виключений к-ть електронів непарна, min -5

$\boxed{d^5}$ m_s 1/2 1/2 1/2 1/2 1/2 $= 5/2 = (1)$
m_l 2 1 0 -1 -2 $= 0 = (2)$

d^7 $\pm 1/2$ $\pm 1/2$ 1/2 1/2 1/2 $\neq (1)$
2 1 0 -1 -2

$d^9 \neq (1)$

f^5 m_s 1/2 1/2 1/2 1/2 1/2
m_l 3 2 1 0 -1 -2, -3 $= 5 \neq (2)$

$f^7, f^{11}, f^{13} \neq (1)$

f^9 $\pm 1/2$ $\pm 1/2$ 1/2 1/2 1/2 1/2 1/2
3 2 1 0 -1 -2 -3 $= 5 \neq (2)$

Можливі терми

а) nd^2 $l_{1,2} = 2$; $m_l = \pm 2; \pm 1; 0$; $s = 1/2$; $m_s = \pm 1/2$

m_l	m_s
2	↑
2	↓
1	↑
1	↓
0	↑
0	↓
-1	↑
-1	↓
-2	↑
-2	↓

(m_L, m_S)

(4,0) (3,1) (3,0) (2,1), (2,0) (1,1) (1,0) (0,1) (0,0)
(3,0) (3,-1), (2,0), (2,-1) (1,0); (1,-1) (0,0) (0,-1)
(2,0), (1,1) . (1,0) (0,1) (0,0) (-1,1) (-1,0)
(1,0) (1,-1) (0,0) (0,-1) (-1,0) (-1,-1)
(0,0) (-1,1) (-1,0) (-2,1) (-2,0)
(-1,0) (-1,-1) (-2,0) (-2,-1)
(-2,0) (-3,1) (-3,0)
(-3,0) (-3,-1)
(-4,0)

max $m_L = 4$, $m_S = 0$ $^1G_4$

max $m_L = 3$, $m_S = 1$ $L = 3$, $S = 1$, $J = 4, 3, 2$ $^3F_4, {}^3F_3, {}^3F_2$

max $m_L = 2$, $m_S = 0$ $^1D_2$ =

max $m_L = 1$, $m_S = 1$ $L = 1$, $S = 1$ $J = 2, 1, 0$ $^3P_2; {}^3P_1, {}^3P_0$

max $m_L = 0$, $m_S = 0$ $J = 0$ $^1S_0$

1) Енергія магнітного диполя

$$W = -\vec{\mu}\vec{B}$$

Для орбітального моменту

$$\vec{\mu}_L = -\frac{e}{2m}\vec{L}$$

Для спінового моменту

$$\vec{\mu}_S = -\frac{e}{m}\vec{S}$$

Тому $\vec{\mu}_J = -\frac{e}{2m} g \vec{J}$; $\mu = g\sqrt{J(J+1)}\,\mu_Б$, $\mu_Б = \frac{e\hbar}{2m}$

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

Правила відбору

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

$\Delta J = \pm 1, 0$

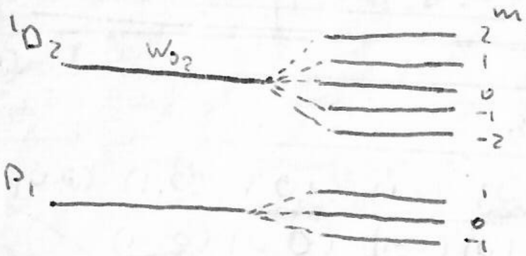
$J = 0 \not\to J = 0$

$\Delta m_S = 0$, $\Delta m_L = 0, \pm 1$

$\Delta m_J = 0, \pm 1$

if $\Delta J = 0$, то $m_J = 0 \not\to m_J$

$$\Delta W = \mu_Б g m_J B$$



$J = 2$ - на 5 компонент

$J = 1$ - на 3.

$g = 1 + \cancel{B}$

1. Визначити фактор Ланде для наступних термів:
a) $^5F_2$ б) $^5P_1$

a) $^5F_2$ $S = 2$, $L = 3$ $J = 2$

$$g = 1 + \frac{6 + 6 - 12}{2 \cdot 6} = 1$$

б) ${}^5P_1$ $S=2$, $L=1$, $J=1$

$$g = 1 + \frac{2+6-2}{2\cdot 2} = 1 + \frac{6}{4} = \frac{5}{2}$$

2. Визначити спіновий механічний момент атому в стані D_2, якщо максимальне значення проекції магнітного моменту в цьому стані дорівнює чотирьом магнетонам Бора.

$D_2 \Rightarrow J=2$, $L=2$

проекція $\mu = \mu_Б g \cdot m_J = 4\mu_Б$, $\max m_J = 2$ $(J=2) \Rightarrow g=2$

$$2 = 1 + \frac{6+(S+1)S-6}{2\cdot 6} \Rightarrow S(S+1) = 12$$

$$M_S = \hbar\sqrt{S(S+1)} = \hbar\sqrt{12} = 2\sqrt{3}\hbar$$

3. Атом знаходиться в магнітному полі з індукцією $B = 0{,}25$ Тл. ~~напруженістю H=2,5 кЭ~~

Підрахувати повну величину розщеплення

а) терма ${}^1D$

б) терма ${}^3F_4$

а) ${}^1D$ $S=0$, $L=2 \Rightarrow J=2$, $g_J=1$, $m_J = 2, 1, 0, -1, -2$

~~$E_{max} - E_{min}$~~ $\Rightarrow E = E_0 + g\mu_Б B\cdot m_J$

$$E_{max} - E_{min} = 2\cdot J\cdot g\mu_Б B = 4\cdot 9{,}27\cdot 10^{-24}\frac{Дж}{Тл}\cdot 0{,}25\,Тл =$$

$$= 9{,}27\cdot 10^{-24}\,Дж = 5{,}8\cdot 10^{-5}\,еВ$$

б) $^3F_4$ $\quad S=1$, $L=3$, $J=4 \Rightarrow g = 1 + \frac{10}{40} = 1,25$

$$\Delta E_{max} = 2 \cdot 4\, g\, \mu_Б \cdot B \approx 14,5 \cdot 10^{-5}\ eV.$$

$$8 \cdot \frac{5}{4} \mu_Б B$$

Атомне ядро. Радіоактивність

1. Підрахувати дефект маси та енергію зв'язку ядра $^{7}_{3}Li$.

Дефект маси - різниця між сумою мас вільних нуклонів і масою ядра

$$\Delta m = Z m_p + (A-Z) m_n - m_я.$$

Z - атомний номер, A - масове число.

В довідниках як правило маса атомів а не ядер

$$m_a = m_я + Z m_e$$

$$\Delta m = Z(m_p + m_e) + (A-Z) m_n - m_a$$

$m_p = 1,00728$ аем $\quad m_n = 1,00867$ а.о.м $\quad m_e = 0,00055$ а.о.м

$m(^{7}_{3}Li) = 7,01601$ а.о.м. $\quad$ 1а.о.м $= 1,660 \cdot 10^{-27}$ кг

$$\Delta m = 3 \cdot (1,00728 + 0,00055) + (7-3) \cdot 1,00867 - 7,01601 =$$

$$= 0,04216 \text{ а.о.м} = 6,9985 \cdot 10^{-29} \text{ кг}$$

$$E = c^2 \Delta m = 6,2987 \cdot 10^{-12} \text{ Дж} \approx 39 \cdot 10^6\ eV.$$

2. При ~~співудара~~ зіткненні α-частинки з ядром бора $^{10}_{5}B$ відбулась ядерна реакція, в результаті якої утворилось два нових ядра. Один з цих ядер було ядро атома водню $^{1}_{1}H$. Визначити друге ядро, написати символічно реакцію, визначити її енергетичний ефект.

$$^{4}_{2}He + ^{10}_{5}B \to ^{1}_{1}H + ^{A}_{Z}X$$

$$4+10=1+A \Rightarrow A=13, \quad 2+5=1+Z \Rightarrow Z=6 \quad \Rightarrow ^{13}_{6}C$$

$$^{4}_{2}He + ^{10}_{5}B \to ^{1}_{1}H + ^{13}_{6}C$$

$$Q = c^2\left[(m_{He}+m_B)-(m_H+m_C)\right]$$

замість мас ядер підставляють маси атомів

$$Q=(3\cdot10^2)^2\left[4,00260+10,01294-1,00783-13,00335\right]\cdot1,660\cdot10^{-27}=$$
$$=6,51\cdot10^{-13}\text{ Дж} \simeq 4,07\text{ MeV}.$$

3. Визначити ~~долю~~ частку атомів радіоактивного стронцію $^{90}_{38}Sr$ ~~масою $m=0,5\cdot10^{-3}$ г~~, що розпадеться на протязі 1) $t_1=12$ років 2) $t_2=100$ років.

$N=N_0\exp(-\lambda t)$

$N=N_0(1-e^{-\lambda t})$ – число, що розпалося

λ – постійна радіоактивного розпаду, $T_{1/2}=\frac{\ln 2}{\lambda}$ $\quad t=T_{1/2}$

1) $\delta = (1 - e^{-\lambda t}) = 1 - e^{-\frac{\ln 2}{T_{1/2}} t}$

$T_{1/2}(Sr) = 27$ років

а) $\delta = 0{,}265$ б) $\delta = 0{,}923$.

4. Визначити початкову активність радіоактивного препарата магнію 27Mg масою $m = 2 \cdot 10^{-10}$ кг, а також його активність через час $t = 6$ год. Період напіврозпаду $T_{1/2}(^{27}_{12}Mg) = 10$ хв.

$A = -\frac{dN}{dt}$; $N = N_0 e^{-\lambda t}$

$A = \lambda N_0 e^{-\lambda t}$, $\lambda = \frac{\ln 2}{T_{1/2}}$, $N_0 = \frac{m}{M} N_A$

$A_0 = \frac{m \cdot \ln 2}{M T_{1/2}} N_A$; $A = A_0 e^{-\frac{\ln 2}{T_{1/2}} t}$

$A_0 = 5{,}13 \cdot 10^{17}$ Бк, $A = 81{,}3$ Бк.

$4f^{10}$ m_l: 3 2 1 0 -1 -2 -3 $S = 2$ $\mathscr{L} = 5$ ${}^5I_8$

$L = 6$

$4f^3$ ${}^4I_{9/2}$ $S = \frac{3}{2}$ $L = 6$

$4f^4$ ${}^5I_4$

Можливі терми

а) ns^1 ; $n'p^2$ $n \neq n'$

s – $\ell = 0$; $s = 1/2$

p^2 – (див стор 50) : $(L=2 ; S=0)$, $(L=1, S=1)$ $(L=0\ S=0)$

$(L=2, S=0)$ $(\ell=0 ; s=1/2)$ => $L=2$; $S=1/2$ => ${}^2D_{3/2}$, ${}^2D_{5/2}$

$(L=1 ; S=1)$ $(\ell=0 ; s=1/2)$ => $L=1$; $S = \frac{3}{2} ; \frac{1}{2}$ => ${}^4P_{5/2}$; ${}^4P_{3/2}$; ${}^4P_{1/2}$
${}^2P_{3/2}$; ${}^2P_{1/2}$

$(L=0\ S=0)$ $(\ell=0, s=1/2)$ => $L=0$. $S=1/2$ ${}^2S_{1/2}$

б) np^1 ; $n'p^2$; $n \neq n'$

~~ta~~ p^1 – $\ell=1$; $s=1/2$; p^2 – $\ell=2, s=0$; $\ell=1 ; s=1$; $\ell=0 ; s=0$

$(\ell=1, s=1/2)$ $(\ell=2 ; s=0)$ => $L=3,2,1$; $S=1/2$ ${}^2F_{7/2}$, ${}^2F_{5/2}$
${}^2D_{5/2}$; ${}^2D_{3/2}$
${}^2P_{3/2}$; ${}^2P_{1/2}$

$(\ell=1 ; s=1/2)$ $(\ell=1 ; s=1)$ => $L=2 ; 1, 0$; $S = \frac{3}{2} ; \frac{1}{2}$

$L=2$; $S=3/2$ => $J = \frac{7}{2} ; \frac{5}{2} ; \frac{3}{2} ; \frac{1}{2}$ ${}^4D_{7/2}$; ${}^4D_{5/2}$; ${}^4D_{3/2}$; ${}^4D_{1/2}$

$L=2$; $S=1/2$ => $J = 5/2 ; 3/2$ ${}^2D_{5/2}$; ${}^2D_{3/2}$

$L=1$; $S=3/2$ => $J = 5/2 ; 3/2 ; 1/2$ ${}^4P_{3/2}$; ${}^4P_{1/2}$; ${}^4P_{5/2}$

$L=1$; $S=1/2$ => $J = 3/2 ; 1/2$ ${}^2P_{3/2}$; ${}^2P_{1/2}$

$L=0$; $S=3/2$ ${}^4S_{3/2}$

$L=0$; $S=1/2$ ${}^2S_{1/2}$

$(\ell=1 ; s=1/2)$ $(\ell=0 ; s=0)$; $L=1$; $S=1/2$ ${}^2P_{3/2}$ ${}^2P_{1/2}$

Використовуючи правила Хунда знайти основний терм атома, електронна конфігурація ~~якого~~ незаповненої підоболонки якого а) nd^2 ; б) nd^3

d => $m_L = \pm 2 ; \pm 1 ; 0$

		↑	↑	↑
-2	-1	0	1	2

а) $S_{max} = 1$; $L_{max} = 3$; $J = |L-S| = 2$ ${}^3F_2$

б) $S_{max} = 3/2$ $L_{max} = 3$ $J = |L-S| = 3/2$ ${}^4F_{3/2}$

Користуючись правилами Хунда, написати основний терм атома, єдина незамкнута підоболонка якого заповнена на третину і $S=1$

$S=1$ => к-ть електронів $=2$, це одна третя => всього 6 електронів => p^2 => ${}^3P_0$