пока ещё есть время, предлагаю способ подготовки к комиссии — публикацию решений задач уровня сложности комиссии, и их обсуждение на форуме

задачи можно брать, например, отсюда: *http://dubinushka.ru/upload/materials/385.doc*

эти решения задач были оформлены пользователем *kuchumovn* и подвергнуты обсуждению на форуме с пользователями *Dawka*, *Nacht-Wändler*, *≪Lexus≫*

также на отдельные задачи бегло посмотрел профессор Александр Михайлович Попов, и указал на ряд ошибок

однако эти решения задач могут содержать ошибки, и предоставлены AS IS

если вы заметили ошибку, напишите о ней на форуме

вы можете внести вклад в этот документ, разместив на форуме (или послав на *atomkawaii@gmail.com*) решение какой-то комиссионной задачи — она будет переведена в TeX

Комиссия, Вариант 3, Задача 1. Частица массы M гармонически осциллирует в основном состоянии в области $\triangle x_0$. Исходя из соотношения неопределённостей, оцените частоту осцилляций частицы.

Решение.

$$U = \frac{kx^2}{2},\ \ \omega = \sqrt{\frac{k}{M}} \implies U = \frac{M\omega^2 x^2}{2}$$

$$T = \frac{p^2}{2M}$$

Координата частицы никогда не определена точно

Неопределённость координаты — это когда $x \in [x_0 - \triangle x, x_0 + \triangle x]$

Поместим x_0 в точку $x = 0$

Тогда $\triangle x = \dfrac{\triangle x_0}{2}$

Импульс тоже не определён, и $\triangle x \triangle p \sim \hbar \implies \triangle p \sim \dfrac{\hbar}{\triangle x}$

Неопределённость импульса — это когда $p \in [p_0 - \triangle p, p_0 + \triangle p]$

Можно положить импульс максимально неопределённым

Тогда снизу он будет ограничен нулём, а сверху величиной $\triangle p \implies p \sim \triangle p \sim \dfrac{\hbar}{\triangle x}$

1 способ

Тогда полную энергию частицы можно записать как $E = T + U = \dfrac{\triangle p^2}{2M} + \dfrac{M\omega^2 \triangle x^2}{2} \sim \dfrac{\hbar^2}{2M \triangle x^2} + \dfrac{M\omega^2 \triangle x^2}{2}$

Дано, что частица совершает осцилляции в основном состоянии $\implies E$ минимальна $\implies \dfrac{\partial E}{\partial \triangle x} = 0$

$$\frac{\partial E}{\partial \triangle x}(\triangle x, \omega) \sim -\frac{\hbar^2}{M \triangle x^3} + M\omega^2 \triangle x = 0$$

Отсюда можно найти частоту колебаний

$$\omega \sim \frac{\hbar}{M \triangle x^2} = \frac{4\hbar}{M \triangle x_0^2}$$

2 способ

$$U_{\max} = \frac{kx_{\max}^2}{2} = \frac{M\omega^2 \triangle x^2}{2} = \frac{M\omega^2 \triangle x^2}{2}$$

$$T_{\max} = \frac{p_{\max}^2}{2M} = \frac{\triangle p^2}{2M} = \frac{\triangle p^2}{2M}$$

$$U_{\max} = T_{\max} \implies M\omega^2 \triangle x^2 = \frac{\triangle p^2}{M} \implies \omega = \frac{\triangle p}{\triangle x}\frac{1}{M}$$

$$\triangle p \triangle x \sim \hbar \implies \triangle p \sim \frac{\hbar}{\triangle x} \implies \omega \sim \frac{\hbar}{M}\frac{1}{\triangle x^2} = \frac{4\hbar}{M \triangle x_0^2}$$

Комиссия, Вариант 4, Задача 2. Энергия электрона в ионе He^+ равна $E = -Ry$. Какими могут быть значения орбитального квантового числа l?

Решение.

Используя модель атома Бора: $E = -Ry\dfrac{Z^2}{n^2}$

$$\begin{cases} Z = 2 \\ E = -Ry \end{cases} \implies n = 2; \quad l = 0, ..., n-1 = 0, 1$$

Комиссия, Вариант 4, Задача 3. Одномерная симметричная ($U(-x) = U(x)$) потенциальная яма содержит всего три уровня. С какой частотой (частотами) может осциллировать дисперсия координаты частицы $\langle x(t)^2\rangle$? Уровни энергии $E_{1,2,3}$ и собственные функции $\psi_{1,2,3}(x)$ оператора Гамильтона считать известными.

Решение.

$D(t) = \langle x(t)^2\rangle - \langle x(t)\rangle^2 = \langle x(t)^2\rangle \implies \langle x(t)\rangle = 0$

$\langle x(t)\rangle = \int\limits_{-\infty}^{\infty} \bar{\psi}(x,t)x(t)\psi(x,t)dx$

по условию $\psi(x,t) = C_1\psi_1(x,t) + C_2\psi_2(x,t) + C_3\psi_3(x,t) \implies$

$\langle x(t)\rangle = \int\limits_{-\infty}^{\infty} [\bar{C}_1\bar{\psi}_1(x,t)+\bar{C}_2\bar{\psi}_2(x,t)+\bar{C}_3\bar{\psi}_3(x,t)]x[C_1\psi_1(x,t)+C_2\psi_2(x,t)+C_3\psi_3(x,t)]dx$

C_k и $\psi_k(x)$ - вещественные (см. лекция №5), но не $\psi_k(x,t)$

$\implies \langle x(t)\rangle = C_1^2\langle x(t)\rangle_1 + C_2^2\langle x(t)\rangle_2 + C_3^2\langle x(t)\rangle_3 + \sum\limits_{i\neq j}\int\limits_{-\infty}^{\infty} x[_iC_j\bar{\psi}_i(x,t)\psi_j(x,t)]dx = 0$

$\langle x(t)\rangle_k = 0 \implies$ сумма произвольных $\int\limits_{-\infty}^{\infty} x[_iC_j\bar{\psi}_i(x,t)\psi_j(x,t)]dx$ равна нулю

$\implies$ каждый $\int\limits_{-\infty}^{\infty} x[_iC_j\bar{\psi}_i(x,t)\psi_j(x,t)]dx$ равен нулю

x - нечётная функция $\implies \bar{\psi}_i(x,t)\psi_j(x,t)$ — чётная по x функция

$\psi_k(x,t) = \psi_k(x)\exp\left(-i\frac{E_k}{\hbar}t\right)$

$\implies \psi_i(x,t)\psi_j(x,t)$– тоже чётная по x функция $\implies \psi_k(x,t)$, из которых состоит $\psi(x,t)$, либо все нечётные, либо все чётные по x

$\psi_k(-x,t) = \begin{cases} \psi_k(x,t), k = 1,3,... \\ \psi_k(-x,t), k = 2,4,... \end{cases}$ (см. лекция №5)

$$\Longrightarrow \text{ 2 случая: } \begin{cases} \psi(x,t) = C_1\psi_1(x,t) + C_3\psi_3(x,t) \\ \psi(x,t) = \psi_2(x,t) \end{cases}$$

1 случай: $\psi(x,t) = C_1\psi_1(x,t) + C_3\psi_3(x,t)$

$$D(t) = \langle x(t)^2 \rangle = \int\limits_{-\infty}^{\infty} [C_1\bar{\psi}_1(x,t) + C_3\bar{\psi}_3(x,t)]x^2[C_1\psi_1(x,t) + C_3\psi_3(x,t)]dx =$$
$$= C_1^2 D_1 + C_3^2 D_3 + \int\limits_{-\infty}^{\infty} x^2 C_1 C_3 \bar{\psi}_1(x,t)\psi_3(x,t)dx + \int\limits_{-\infty}^{\infty} x^2 C_1 C_3 \psi_1(x,t)\bar{\psi}_3(x,t)dx$$

в этом выражении от времени зависят только интегралы

$$\begin{cases} \int\limits_{-\infty}^{\infty} x^2 C_1 C_3 \bar{\psi}_1(x,t)\psi_3(x,t)dx = C_1 C_3 \exp\left(i\dfrac{E_1 - E_3}{\hbar}t\right) \int\limits_{-\infty}^{\infty} x^2\psi_1(x)\psi_3(x)dx \\ \int\limits_{-\infty}^{\infty} x^2 C_1 C_3 \psi_1(x,t)\bar{\psi}_3(x,t)dx = C_1 C_3 \exp\left(i\dfrac{E_3 - E_1}{\hbar}t\right) \int\limits_{-\infty}^{\infty} x^2\psi_1(x)\psi_3(x)dx \end{cases}$$

пусть $\int\limits_{-\infty}^{\infty} x^2\psi_1(x)\psi_3(x)dx = I_{13}$, $\left|\dfrac{E_1 - E_3}{\hbar}\right| = \omega$

тогда $D(t) = C_1^2 D_1 + C_3^2 D_3 + C_1 C_3 I_{13}[\exp(i\omega t) + \exp(-i\omega t)] =$
$= C_1^2 D_1 + C_3^2 D_3 + 2C_1 C_3 I_{13}\cos\omega t$

$\Longrightarrow$ дисперсия осциллирует с частотой $\omega = \left|\dfrac{E_1 - E_3}{\hbar}\right|$

2 случай: $\psi(x,t) = \psi_2(x,t)$

$$D(t) = \langle x(t)^2 \rangle = \int\limits_{-\infty}^{\infty} \bar{\psi}_2(x,t)x^2\psi_2(x,t)dx = \int\limits_{-\infty}^{\infty} |\psi_2(x)|^2 \exp\left(i\frac{E_2 - E_2}{\hbar}t\right)x^2 dx = D_2$$

и нет никакой зависимости ни от чего $\Longrightarrow$ дисперсия не осциллирует
по условию дисперсия осциллирует $\Longrightarrow$ этот случай исключён

Комиссия, Вариант 4, Задача 3. Одномерная симметричная ($U(-x) = U(x)$) потенциальная яма содержит всего три уровня. $\langle x(t)\rangle = 0$. Дисперсия координаты частицы $D = c_1 + c_2 \cos\omega t$. Определите вид волновой функции частицы. Уровни энергии $E_{1,2,3}$ и собственные функции $\psi_{1,2,3}(x)$ оператора Гамильтона считать известными.

Решение.

$D(t) = \langle x(t)^2\rangle - \langle x(t)\rangle^2 = \langle x(t)^2\rangle$, т.к. $\langle x(t)\rangle = 0$

$$< x(t) >= \int\limits_{-\infty}^{\infty} \bar{\psi} x(t) \psi dx$$

по условию самый общий вид волновой функции частицы

$\psi(x,t) = C_1\psi_1(x,t) + C_2\psi_2(x,t) + C_3\psi_3(x,t)$

Опять $\langle x(t)\rangle = 0 \implies$

$$\implies \text{ 2 случая: } \begin{cases} \psi(x,t) = C_1\psi_1(x,t) + C_3\psi_3(x,t) \\ \psi(x,t) = \psi_2(x,t) \end{cases}$$

1 случай: $\psi(x,t) = C_1\psi_1(x,t) + C_3\psi_3(x,t)$

$$D(t) = \langle x(t)^2\rangle = \int\limits_{-\infty}^{\infty} [C_1\bar{\psi}_1(x,t) + C_3\bar{\psi}_3(x,t)]x^2[C_1\psi_1(x,t) + C_3\psi_3(x,t)]dx =$$

$$= C_1^2 D_1 + C_3^2 D_3 + \int\limits_{-\infty}^{\infty} x^2 C_1 C_3 \bar{\psi}_1(x,t)\psi_3(x,t)dx + \int\limits_{-\infty}^{\infty} x^2 C_1 C_3 \psi_1(x,t)\bar{\psi}_3(x,t)dx$$

в этом выражении от времени зависят только интегралы

$$\begin{cases} \int\limits_{-\infty}^{\infty} x^2 C_1 C_3 \bar{\psi}_1(x,t)\psi_3(x,t)dx = C_1 C_3 \exp\left(i\dfrac{E_1 - E_3}{\hbar}t\right) \int\limits_{-\infty}^{\infty} x^2 \psi_1(x)\psi_3(x)dx \\ \int\limits_{-\infty}^{\infty} x^2 C_1 C_3 \psi_1(x,t)\bar{\psi}_3(x,t)dx = C_1 C_3 \exp\left(i\dfrac{E_3 - E_1}{\hbar}t\right) \int\limits_{-\infty}^{\infty} x^2 \psi_1(x)\psi_3(x)dx \end{cases}$$

пусть $\int\limits_{-\infty}^{\infty} x^2\psi_1(x)\psi_3(x)dx = I_{13}, \quad \left|\frac{E_1 - E_3}{\hbar}\right| = \omega$

тогда $D(t) = C_1^2 D_1 + C_3^2 D_3 + C_1 C_3 I_{13}[\exp(i\omega t) + \exp(-i\omega t)] =$

$$= C_1^2 D_1 + C_3^2 D_3 + 2C_1 C_3 I_{13}\cos\omega t$$

$$\Longrightarrow C_1^2 D_1 + C_3^2 D_3 + 2C_1 C_3 I_{13}\cos\omega t = c_1 + c_2\cos\omega t$$

$$\Longrightarrow \begin{cases} C_1^2 D_1 + C_3^2 D_3 = c_1 \\ 2C_1 C_3 I_{13} = c_2 \end{cases} \Longleftrightarrow \begin{cases} C_3 = \pm\dfrac{\sqrt{c_1 - C_1^2 D_1}}{D_3} \\ C_1 = 2c_2\dfrac{D_3}{\sqrt{c_1 - C_1^2 D_1}} I_{13} \end{cases}$$

$$\Longrightarrow C_1^2 = \frac{1}{4}c_2^2\frac{D_3^2}{c_1 - C_1^2 D_1} I_{13}^2 \Longrightarrow C_1^4 - c_1 C_1^2 + \frac{1}{4}c_2^2 D_3^2 I_{13}^2 = 0$$

$$\Longrightarrow \begin{cases} C_1^2 = \dfrac{c_1 \pm \sqrt{c_1^2 - c_2^2 D_3^2 I_{13}^2}}{2} \\ C_3 = \pm\dfrac{\sqrt{c_1 - C_1^2 D_1}}{D_3} \\ \psi(x,t) = C_1\psi_1(x,t) + C_3\psi_3(x,t) \end{cases}$$

2 случай: $\psi(x,t) = \psi_2(x,t)$

$$D(t) = \langle x(t)^2\rangle = \int\limits_{-\infty}^{\infty} \bar{\psi}_2(x,t) x^2 \psi_2(x,t)dx = D_2 = c_1 + c_2\cos\omega t$$

у D_2 нет никакой зависимости ни от чего $\Longrightarrow$ этот случай исключён

Комиссия, Вариант 4, Задача 4. Какие элементы $Z \leq 10$ имеют нерасщепленные основные термы?

Решение.

Терм — ^{2S+1}L, S — суммарный спин электронов на внешней оболочке, L — их суммарный орбитальный момент. Расщепление терма — это когда состояния терма $^{2S+1}L_J$ имеют разную энергию. Это смещение может возникнуть, например, вследствие тонкой структуры атома. То есть задача может быть сведена к поиску атомов, основные термы которых имеют только одно состояние.

Основные термы (термы с минимальной энергией) можно найти по правилам Хунда (см. лекция №11):

1) ниже по энергии лежит тот терм, у которого S максимален

2) при равенстве S у термов, минимальной энергией обладает терм, у которого L максимально

также у конфигурации с полностью заполненной электронной оболочкой терм может быть только ^1S (см. лекция №11)

Вообще для решения задачи достаточно найти только основные термы, но в таблице ниже найдены все термы (просто так).

Нахождение термов $_6C$ описано в лекции №11 и приложении №7

При нахождении термов $_7N$ учтено, что в p^3-конфигурации на самом деле нет терма ^2S. Дело в том, что в квартетном ^4S-терме помимо проекции полного спина $\frac{3}{2}$ бывает еще и $\frac{1}{2}$. Т.е. хотя $S = \frac{3}{2}$, это еще не означает, что все три спина сонаправлены (как ни парадоксально это может прозвучать). Значит, дуплетный ^2S терм, который можно реализовать проекцией полного спина $M_s = \frac{1}{2}$, уступит эту проекцию квартетному ^4S-терму, и будет отсутствовать в p^3-конфигурации.

Z	конфигурация	термы	основной терм	$\left\|\vec{J}\right\| = \vec{L} + \vec{S}$
$_1H$	$1s^1$	^2S	^2S	$1/2$
$_2He$	$1s^2$	полностью заполнена $\Longrightarrow$ ^1S	^1S	0
$_3Li$	$2s^1$	как у $1s^1$	^2S	$1/2$
$_4Be$	$2s^2$	как у $1s^2$	^1S	0
$_5B$	$2p^1$	^2P	^2P	$1/2, 3/2$
$_6C$	$2p^2$	$^1S,^1D,^3P = \begin{array}{\|c\|c\|}\hline m_s & m_l \\ \hline 1/2 & 1 \\ \hline 1/2 & 0 \\ \hline\end{array}$	^3P	$0, 2$
$_7N$	$2p^3$	$^2P,^2D,^4S = \begin{array}{\|c\|c\|}\hline m_s & m_l \\ \hline 1/2 & 1 \\ \hline 1/2 & 0 \\ \hline 1/2 & -1 \\ \hline\end{array}$	^4S	$\frac{3}{2}$
$_8O$	$2p^4$	2 дыры $\Longrightarrow$ как у $1p^2$	^3P	$0, 1, 2$
$_9F$	$2p^5$	1 дыра $\Longrightarrow$ как у $1p^1$	^2P	$1/2, 3/2$
$_{10}Ne$	$2p^6$	полностью заполнена $\Longrightarrow$ ^1S	^1S	0

$\Longrightarrow$ термы атомов $_1H$, $_2He$, $_3Li$, $_4Be$, $_7N$, $_{10}Ne$ имеют только одно состояние, и дают решение задачи.

Комиссия, Вариант 4, Задача 5. Спектральные линии $3p \to nl$ одной из серий поглощения атома алюминия ($Z = 13$) являются дублетами. Изобразите схему уровней и переходов с учетом тонкой структуры.

Решение.

Конфигурация Al — $3p$

Задача, видимо, поставлена так: рассмотрите все переходы алюминия $3p \to nl$ (поглощение), состоящие из дублетов, и изобразите ...

Переход с поглощением энергии $\implies n \geq 4$

Правила отбора для электромагнитного перехода (см. лекция №12):

$\triangle s = 0, \triangle m_s = 0$
$\triangle l = \pm 1, \triangle m_l = 0, \pm 1$
$\triangle j = 0, \pm 1, \triangle m_j = 0, \pm 1$

$\implies$ возможны переходы $3p \to (n+1)s$ и $3p \to nd, \ \ n \geq 3$

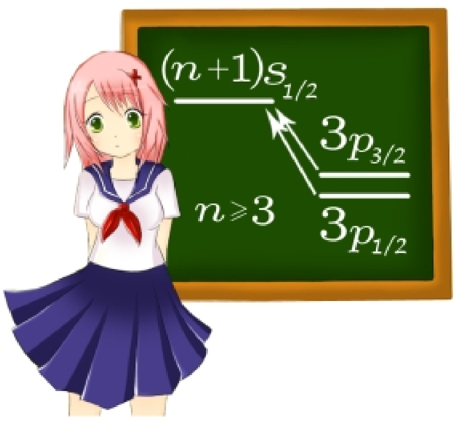
Предположим, что *"дублеты"* — это две линии

Тогда, поскольку известно, что линия — дублет, nd отпадает (это диффузная серия, линии — триплеты), и остаётся $(n+1)s$ (резкая серия, линии — дублеты)

Тогда возможны переходы $3p_{1/2} \to (n+1)s_{1/2}, 3p_{3/2} \to (n+1)s_{1/2}$

Уровни с бо́льшим j лежат выше (см. лекция №9)

Значит, схема уровней и переходов выглядит так:



Комиссия, Вариант 4, Задача 6. На сколько компонент расщепится в слабом магнитном поле спектральная линия атома натрия $3s-3p$ $\lambda_2 = 5896\mathring{A}$ резонансного дублета $\lambda_1 = 5890\mathring{A}$ и $\lambda_2 = 5896\mathring{A}$?

Решение.

Согласно правилам отбора возможны переходы $3p_{1/2} \to 3s_{1/2}, 3p_{3/2} \to 3s_{1/2}$

При рассмотрении атомов щелочных металлов вводят квантовый дефект

$$E_{nl} = -\frac{Ry}{(n-\triangle_{nl})^2} \quad \text{(см лекция №10)}$$

$\triangle_{nl}$ растёт с увеличением n, и убывает с увеличением l

Там же (в лекции №10) показана схема энергетических уровней Na

Уровни с бо́льшим j лежат выше $\implies$ энергия перехода $3p_{3/2} \to 3s_{1/2}$ больше энергии перехода $3p_{1/2} \to 3s_{1/2}$

дана $\lambda_2 > \lambda_1 \implies$ энергия перехода меньше $\implies$ дана линия $3p_{1/2} \to 3s_{1/2}$

В слабом магнитном поле — аномальный эффект Зеемана (см. лекция №14)

Число компонент спектральной линии равно количеству всевозможных комбинаций $(g_2 m_{j_2} - g_1 m_{j_1})$, с учётом правила отбора $\triangle m_j = 0, \pm 1$

$$g = 1 + \frac{j(j+1) + s(s+1) - l(l+1)}{2j(j+1)} \implies \begin{cases} g_1 = g(3s_{1/2}) = 1 + \dfrac{\frac{1}{2}\frac{3}{2} + \frac{1}{2}\frac{3}{2}}{2\frac{1}{2}\frac{3}{2}} = 2 \\ g_2 = g(3p_{1/2}) = 1 + \dfrac{\frac{1}{2}\frac{3}{2} + \frac{1}{2}\frac{3}{2} - 2}{2\frac{1}{2}\frac{3}{2}} = \dfrac{2}{3} \end{cases}$$

$$m_{j_1} = m_j(3s_{1/2}) = -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}$$

$$m_{j_2} = m_j(3p_{1/2}) = -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}$$

Таблица расчёта зеемановского расщепления линии

$g_1 m_{j_1}$ \ $g_2 m_{j_2}$	$-\frac{1}{3}_{\{m_j=-\frac{1}{2}\}}$	$\frac{1}{3}_{\{m_j=\frac{1}{2}\}}$
$-1_{\{m_j=-\frac{1}{2}\}}$	$\frac{2}{3}$	$\frac{4}{3}$
$1_{\{m_j=\frac{1}{2}\}}$	$-\frac{4}{3}$	$-\frac{2}{3}$

$\Longrightarrow$ линия будет расщеплена на 4 компоненты

Общий зачёт, Вариант ϕ, Задача 1. Исходя из соотношения неопределенностей, оценить неопределенность координаты частицы массы M, находящейся в основном состоянии в потенциале $V(R) = D\left(\dfrac{R_0^2}{R^2} - 2\dfrac{R_0}{R}\right)$. Считать, что $\dfrac{\hbar^2}{MR_0^2} \ll D$.

Решение.

Частица в основном состоянии $\implies$ полная энергия минимальна

$E = T + U = \dfrac{p^2}{2M} + V(R)$

$\implies$ минимальны импульс и потенциал

Импульс частицы никогда не определён точно, и $\triangle R \triangle p \sim \hbar \implies \triangle p \sim \dfrac{\hbar}{\triangle R}$

Неопределённость импульса — это когда $p \in [p_0 - \triangle p, p_0 + \triangle p]$

Импульс минимален $\implies p_0 = 0$ и $p \sim \dfrac{\hbar}{\triangle R}$

Координата частицы R тоже не определена точно: $R \in [R_0 - \triangle R, R_0 + \triangle R]$

Потенциал $V(R)$ похож на параболу, пересекающую ось R в точке $\dfrac{R_0}{2}$, и имеющую минимум в точке $R_0 : V(R_0) = -D$

Потенциал минимален, поэтому в выражении для области изменения R, приведённом выше, R_0 совпадает с R_0 в выражении потенциала

Неопределённый потенциал

$V(R_0 \pm \triangle R) = D\left(\dfrac{R_0^2}{(R_0 \pm \triangle R)^2} - 2\dfrac{R_0}{R_0 \pm \triangle R}\right)$

можно разложить в точке R_0 в ряд тейлора по малому параметру $\triangle R$

$$V(R_0 \pm \triangle R) \simeq V(R_0) \pm V'(R_o) \triangle R + \frac{1}{2}V''(R_0) \triangle R^2 =$$

$$= -D \pm D\left(-2\frac{R_0^2}{R_0^3} + 2\frac{R_0}{R_0^2}\right) \triangle R + \frac{1}{2}D\left(6\frac{R_0^2}{R_0^4} - 4\frac{R_0}{R_0^3}\right) \triangle R^2 = -D + D\frac{\triangle R^2}{R_0^2}$$

$$\Longrightarrow \triangle E \sim \frac{\hbar^2}{2M\triangle R^2} - D + D\frac{\triangle R^2}{R_0^2}$$

похоже на правду, потому что есть противоборство $\triangle R^2$ в числителе и знаменателе

основное состояние $\Longrightarrow$ энергия и её неопределённость минимальны

можно взять производную

$$\frac{d\triangle E}{d\triangle R} = -\frac{\hbar^2}{M\triangle R^3} + 2D\frac{\triangle R}{R_0^2} = 0$$

$$\Longrightarrow \frac{\hbar^2 R_0^2}{2MD} = \triangle R^4 \Longrightarrow \triangle R = \sqrt[4]{\frac{\hbar^2 R_0^2}{2MD}} = \frac{R_0}{\sqrt[4]{2}}\sqrt[4]{\frac{\frac{\hbar^2}{MR_0^2}}{D}}$$

$D >> \dfrac{\hbar^2}{MR_0^2} \Longrightarrow \triangle R \ll R_0$ (наверное, если D вообще большое)

Общий зачёт, Вариант ϕ, Задача 2. В рамках модели атома Бора определить величину релятивистской поправки к энергии кванта H_α линии (головной линии серии Бальмера) водородоподобного иона с зарядом Z. Считать, что $\alpha Z \ll 1$, α — постоянная тонкой структуры.

Решение.

Релятивистская поправка возникает из-за релятивистского увеличения массы электрона

$m = \dfrac{m_e}{\sqrt{1-\dfrac{v^2}{c^2}}}$ (см. лекция №3)

В итоге скорость будет та же, радиус орбиты будет сокращён — $r_n = r_{n,0}\sqrt{1-\dfrac{v_n^2}{c^2}}$, и энергия $E_n = m_e c^2\sqrt{1-\dfrac{v_n^2}{c^2}}$, где $\dfrac{v_n}{c} = \alpha\dfrac{Z}{n}$

Релятивистская поправка к энергии уровня

$\triangle E_n = (E_n - m_e c^2) - E_{n,0}$,где $E_{n,0} = -Ry\dfrac{Z^2}{n^2}$

В лекции №3 показано, что при разложении корня по малому параметру β

$\sqrt{1-\beta^2} \simeq 1 - \dfrac{1}{2}\beta^2 - \dfrac{1}{8}\beta^4$

второй член разложения слагаемого с корнем будет равен $E_{n,0}$, и релятивистскую поправку энергии уровня даст третий член разложения

$\triangle E_n = -\dfrac{1}{8}m_e c^2\left(\dfrac{\alpha Z}{n}\right)^4$

чем больше n, тем меньше эта поправка $\implies$ энергия перехода возрастёт

серия Бальмера — переходы $n \to 2$

$\implies$ поправка к энергии кванта $\triangle E_{n,2} = \dfrac{1}{8}m_e c^2(\alpha Z)^4\left(\dfrac{1}{16} - \dfrac{1}{n^4}\right)$

Общий зачёт, Вариант ϕ, Задача 3. В бесконечно глубокой прямоугольной одномерной потенциальной яме среднее значение координаты частицы $\langle x(t)\rangle$ осциллирует с частотой $\omega = \dfrac{5E_1}{\hbar}$. Напишите выражение для волновой функции и плотности вероятности в произвольный момент времени. E_1 – энергия низшего уровня. Как изменяется во времени дисперсия координаты $\langle x^2(t)\rangle$?

Решение.

Набор функций $\psi_n(x)$ бесконечно глубокой ямы найден в лекции №5

$$\psi_n(x) = \begin{cases} \sqrt{\dfrac{2}{a}}\cos\dfrac{\pi n}{a}x, & n = 1,3,5,... \\ \sqrt{\dfrac{2}{a}}\sin\dfrac{\pi n}{a}x, & n = 2,4,6,... \end{cases}$$

$$E_n = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}n^2, \quad n = 1,2,3,...$$

По условию $D(t) = \langle x(t)^2\rangle - \langle x(t)\rangle^2 = \langle x(t)^2\rangle \implies \langle x(t)\rangle = 0$

Но также по условию $\langle x(t)\rangle$ осциллирует

Так что можно предположить, что в конце условия опечатка

$$\langle x(t)\rangle = \int\limits_{-a/2}^{a/2} \bar{\psi}(x,t)x(t)\psi(x,t)dx$$

$$\psi_k(x,t) = \psi_k(x)\exp\left(-i\frac{E_k}{\hbar}t\right)$$

Пусть, например, волновая функция частицы представляет суперпозицию двух ортонормированных функций ψ_k и ψ_l

$$\psi(x,t) = C_k\psi_k(x)\exp\left(-i\frac{E_k}{\hbar}t\right) + C_l\psi_l(x)\exp\left(-i\frac{E_l}{\hbar}t\right)$$

Тогда $\langle x(t)\rangle = C_k^2\langle x(t)\rangle_k + C_l^2\langle x(t)\rangle_l + C_kC_l\int\limits_{-a/2}^{a/2} x[\bar{\psi}_k(x,t)\psi_l(x,t) + \psi_k(x,t)\bar{\psi}_l(x,t)]dx =$

$$= C_k C_l \int\limits_{-a/2}^{a/2} \psi_k(x)\psi_l(x) x \left(\exp\left(i\frac{E_k - E_l}{\hbar} t \right) + \exp\left(-i\frac{E_k - E_l}{\hbar} t \right) \right) dx =$$

$$= 2C_k C_l \cos\left(\frac{E_k - E_l}{\hbar} t \right) \int\limits_{-a/2}^{a/2} \psi_k(x)\psi_l(x) x dx = x_{\max} \cos\frac{5E_1}{\hbar} t$$

$$\Longrightarrow \begin{cases} 2C_k C_l \int\limits_{-a/2}^{a/2} \psi_k(x)\psi_l(x) x dx = x_{\max} = \dfrac{a}{2} \\ |E_k - E_l| = 5E_1 \end{cases}$$

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} n^2 = E_1 n^2$$

$$E_k - E_l = E_1(k^2 - l^2) \implies k^2 = 5 + l^2 \implies k = 3, l = 2$$

$$\begin{cases} C_2 C_3 \int\limits_{-a/2}^{a/2} \psi_2(x)\psi_3(x) x dx = 4a \\ \\ C_3^2 + C_2^2 = 1 \end{cases}$$

Ширина ямы $a = \sqrt{\dfrac{\pi^2 \hbar^2}{2mE_1}}$

$$\int\limits_{-a/2}^{a/2} \psi_2(x)\psi_3(x) x dx = \frac{2}{a} \int\limits_{-a/2}^{a/2} \sin\frac{2\pi x}{a} \cos\frac{3\pi x}{a} x dx$$

Используя равенства

$$\sin\alpha\cos\beta = \frac{1}{2}\left(\sin(\alpha + \beta) + \sin(\alpha - \beta) \right)$$

и

$$\int\limits_{-a/2}^{a/2} \sin\frac{n\pi x}{a} x dx = \left(\frac{a}{n\pi} \right)^2 \int\limits_{-n\pi/2}^{n\pi/2} t \sin t dt = \left(\frac{a}{n\pi} \right)^2 \left(-t\cos t \|_{-n\pi/2}^{n\pi/2} + \int\limits_{-n\pi/2}^{n\pi/2} \cos t dt \right) =$$

$$= -\left(\frac{a}{n\pi}\right)^2\left(n\pi\cos\frac{n\pi}{2} + 2\sin\frac{n\pi}{2}\right) = -a^2\left(\frac{\cos\frac{n\pi}{2}}{n\pi} + 2\frac{\sin\frac{n\pi}{2}}{(n\pi)^2}\right)$$

получим

$$\int\psi_2(x)\psi_3(x)xdx = \frac{1}{a}\left(\int\limits_{-a/2}^{a/2}\sin\frac{5\pi x}{a}xdx - \int\limits_{-a/2}^{a/2}\sin\frac{\pi x}{a}xdx\right) =$$

$$= -a\left(\left(\frac{\cos\frac{5\pi}{2}}{5\pi} + 2\frac{\sin\frac{5\pi}{2}}{(5\pi)^2}\right) - \left(\frac{\cos\frac{\pi}{2}}{\pi} + 2\frac{\sin\frac{\pi}{2}}{\pi^2}\right)\right) = -a\left(\frac{2}{(5\pi)^2} - \frac{2}{\pi^2}\right) = \frac{48a}{25\pi^2}$$

$$\Longrightarrow C_2C_3\frac{48a}{25\pi^2} = 4a \Longrightarrow C_2C_3 = \frac{25}{12}\pi^2 \Longrightarrow C_2 = \frac{1}{C_3}\frac{25}{12}\pi^2$$

$$C_3^2 + C_2^2 = C_3^2 + \frac{1}{\frac{2}{3}}\left(\frac{25}{12}\right)^2\pi^4 = 1 \Longrightarrow C_3^4 - C_3^2 + \left(\frac{25}{12}\right)^2\pi^4 = 0$$

$$\Longrightarrow C_3^2 = \frac{1 \pm \sqrt{1 - \left(\frac{25}{6}\right)^2\pi^4}}{2} \Longrightarrow C_3 = \pm\sqrt{\frac{1 \pm \sqrt{1 - \left(\frac{25}{6}\right)^2\pi^4}}{2}}$$

Волновая функция $\psi(x,t) = \sqrt{\frac{2}{a}}\left(C_2\sin\frac{2\pi x}{a}\exp\left(-i\frac{4E_1}{\hbar}t\right) + C_3\cos\frac{3\pi x}{a}\exp\left(-i\frac{9E_1}{\hbar}t\right)\right)$

Плотность вероятности $\rho(x,t) = |\psi(x,t)|^2 = \bar{\psi}(x,t)\psi(x,t) =$

$$= \frac{2}{a}\left(C_2^2\sin^2\frac{2\pi x}{a} + C_3^2\cos^2\frac{3\pi x}{a} + 2C_2C_3\sin\frac{2\pi x}{a}\cos\frac{3\pi x}{a}\cos\left(\frac{5E_1}{\hbar}t\right)\right)$$

Средний квадрат отклонения от центра ямы

$$\langle x(t)^2\rangle = \int\limits_{-a/2}^{a/2} \bar{\psi}(x,t)x^2(t)\psi(x,t)dx =$$

$$= D_2 + D_3 + \frac{4}{a}C_2C_3\cos\left(\frac{5E_1}{\hbar}t\right)\int\limits_{-a/2}^{a/2}\sin\frac{2\pi x}{a}\cos\frac{3\pi x}{a}x^2dx$$

$\int\limits_{-a/2}^{a/2}\sin\frac{2\pi x}{a}\cos\frac{3\pi x}{a}x^2dx = 0$, т.к. под интегралом стоит нечётная функция

$$\implies \langle x(t)^2\rangle = D_2 + D_3$$

$$D_2 = \int\limits_{-a/2}^{a/2} x^2\left|\psi_2(x,t)\right|^2dx = \frac{2}{a}\int\limits_{-a/2}^{a/2} x^2\sin^2\frac{2\pi x}{a}dx =$$

$$= \frac{1}{a}\left(\int\limits_{-a/2}^{a/2} x^2dx - \int\limits_{-a/2}^{a/2} x^2\cos\frac{4\pi x}{a}dx\right) = \frac{a^2}{12} - \frac{1}{a}\int\limits_{-a/2}^{a/2} x^2\cos\frac{4\pi x}{a}dx$$

$$D_3 = \int\limits_{-a/2}^{a/2} x^2\left|\psi_3(x,t)\right|^2dx = \frac{2}{a}\int\limits_{-a/2}^{a/2} x^2\cos^2\frac{3\pi x}{a}dx =$$

$$= \frac{1}{a}\left(\int\limits_{-a/2}^{a/2} x^2dx + \int\limits_{-a/2}^{a/2} x^2\cos\frac{6\pi x}{a}dx\right) = \frac{a^2}{12} - \frac{1}{a}\int\limits_{-a/2}^{a/2} x^2\cos\frac{6\pi x}{a}dx$$

$$\int\limits_{-a/2}^{a/2} x^2\cos\frac{n\pi x}{a}dx = \left(\frac{a}{n\pi}\right)^3\int\limits_{-\pi n/2}^{\pi n/2} t^2\cos t dt =$$

$$= \left(\frac{a}{n\pi}\right)^3\left(t^2\sin t\|_{-n\pi/2}^{n\pi/2} - 2\int\limits_{-n\pi/2}^{n\pi/2} t\cos t dt\right) = \frac{a^3}{2n\pi}\sin\frac{n\pi}{2}$$

$$\Longrightarrow \langle x(t)^2\rangle = D_2 + D_3 = \frac{a^2}{6} - \frac{a^2}{2}\left(\frac{1}{2\pi}\sin\frac{2\pi}{2} + \frac{1}{3\pi}\sin\frac{3\pi}{2}\right) =$$

$$= a^2\left(\frac{1}{6} + \frac{1}{6\pi}\right) = a^2\frac{\pi+1}{6\pi}$$

$$\Longrightarrow \text{дисперсия } D(t) = \langle x(t)^2\rangle - \langle x(t)\rangle^2 =$$

$$= a^2\frac{\pi+1}{6\pi} - \left(\frac{a}{2}\cos\frac{5E_1}{\hbar}t\right)^2 =$$

$$= \frac{a^2}{2}\left(\frac{\pi+1}{3\pi} - \frac{1}{2}\cos^2\frac{5E_1}{\hbar}t\right)$$

Ответ:

$$\begin{cases} \psi(x,t) = \sqrt{\dfrac{2}{a}}\left(C_2\sin\dfrac{2\pi x}{a}\exp\left(-i\dfrac{4E_1}{\hbar}t\right) + C_3\cos\dfrac{3\pi x}{a}\exp\left(-i\dfrac{9E_1}{\hbar}t\right)\right) \\ \rho(x,t) = \dfrac{2}{a}\left(C_2^2\sin^2\dfrac{2\pi x}{a} + C_3^2\cos^2\dfrac{3\pi x}{a} + 2C_2C_3\sin\dfrac{2\pi x}{a}\cos\dfrac{3\pi x}{a}\cos\left(\dfrac{5E_1}{\hbar}t\right)\right) \\ D(t) = \dfrac{a^2}{2}\left(\dfrac{\pi+1}{3\pi} - \dfrac{1}{2}\cos^2\dfrac{5E_1}{\hbar}t\right) \\ C_2 = \dfrac{1}{C_3}\dfrac{25}{12}\pi^2 \\ C_3 = \pm\sqrt{\dfrac{1 \pm \sqrt{1 - \left(\dfrac{25}{6}\right)^2\pi^4}}{2}} \\ a = \sqrt{\dfrac{\pi^2\hbar^2}{2mE_1}} \\ \text{масса частицы } m\text{, видимо, известна} \end{cases}$$

Общий зачёт, Вариант ϕ, Задача 4. Частица находится в одномерной симметричной потенциальной яме глубиной V_0 и шириной a. Определить условия существования двух стационарных состояний в таком потенциале. Нарисовать распределения $|\psi(x)|^2$ для каждого из них.

Решение.

Частица в симметричной потенциальной яме рассмотрена в лекции №5

Для чётных ψ_n будет трансцедентное уравнение пересечения почти тангенса и дуги окружности

Для чётных ψ_n будет трансцедентное уравнение пересечения почти котангенса и дуги этой же окружности

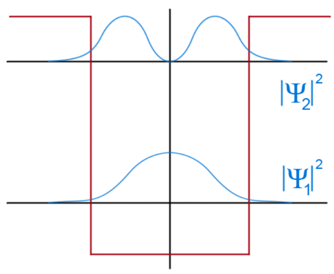
Радиус окружности $\sqrt{B} = \sqrt{2mV_0}\dfrac{a}{\hbar}$

$\implies$ только 2 стационарных состояния будет том случае, если $\pi \leq \sqrt{B} < 2\pi$

$$\implies \frac{\pi\hbar}{\sqrt{2m}} \leq \sqrt{V_0}a < \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2m}}$$

Волновые функции ψ_1 и ψ_2 нарисованы в лекции №5 — косинус и синус, переходящие в экспоненту на бесконечности

$\implies$ $|\psi(x)|^2$ выглядят так



Общий зачёт, Вариант ϕ, Задача 5. Атом кислорода ($Z = 8$) находится на терме ^5P, принадлежащем электронной конфигурации $2p^34p$. В какие нижележащие термы каких конфигураций электромагнитные переходы разрешены в дипольном приближении? Сколько компонент имеет тонкая структура каждой из спектральных линий?

Решение.

Нижележащие состояния для $4p$-электрона: $3d, 4s, 3p, 3s, 2p$

Правила отбора для электромагнитного перехода в многоэлектронном атоме (см. лекция №12):

$$P_i = -P_f, \quad P = (-1)^{\sum l_i}$$
$$\triangle L = 0, \pm 1$$
$$\triangle S = 0$$
$$\triangle J = 0, \pm 1, \quad \text{кроме } J = 0 \to J = 0$$

Исходная Р-чётность $P_i = (-1)^4 = +1 \implies P_f = -1 \implies \sum l_f$ нечётна

$\implies$ l электрона, совершающего переход, станет чётным

$\implies$ возможны переходы $4p$-электрона только в состояния $3d, 4s, 3s$

$$J_{2p^3_{1/2}} = \frac{1}{2}, \frac{3}{2} \implies \text{возможны переходы в состояния } 3d_{3/2,5/2}, 4s_{1/2}, 3s_{1/2}$$

У терма $^5P \quad S = 2 \implies$ возможен переход только опять в квитет

Переход в термы нижележащих конфигураций

конфигурация	возможные L	реализуемые L	термы перехода	число компонент
$2p^33d_{3/2,5/2}$	$1, 2, 3, 4, 5$	$1, 2$	$^5P, ^5D$	2
$2p^34s_{1/2}$	$1, 2, 3$	$1, 2$	$^5P, ^5D$	1
$2p^33s_{1/2}$	как у $2p^34s$	как у $2p^34s$	как у $2p^34s$	1

Общий зачёт, Вариант ϕ, Задача 6. В атоме водорода электрон находится в состоянии $5f$. Какие спектральные линии и каких серий могут возникнуть при спонтанных переходах? Тонкую структуру не учитывать. Схему уровней и возможных переходов изобразить графически.

Решение.

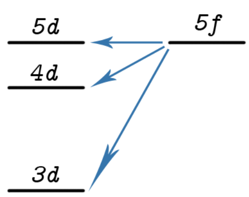
Правила отбора для электромагнитного перехода (см. лекция №12):

$\triangle s = 0, \triangle m_s = 0$
$\triangle l = \pm 1, \triangle m_l = 0, \pm 1$

$\Longrightarrow$ возможны переходы только в d-состояния и g-состояния (которые так и не возникают до $5f$)

$\Longrightarrow$ возможны переходы только в $5d, 4d, 3d$

Тонкую структуру не учитывать $\Longrightarrow$ линии будут синглетными




А ТЫ
ИДЁШЬ ЗАВТРА
НА КОМИССИЮ?
© ATOMKawaii 2008