

Билеты к экзамену по курсу "Атомная физика" (2 поток, 2014)

Билет №1

1. Равновесное электромагнитное излучение. Формула Планка. Закон Стефана-Больцмана. Закон смещения Вина.
2. Уравнение Шредингера с центрально-симметричным потенциалом. Разделение переменных. Операторы L^2 , L_z , их собственные значения и функции. Радиальное уравнение. Квантовые числа. Атом водорода. Уровни энергии и волновые функции стационарных состояний.

Билет №2

1. Фотоэффект. Законы фотоэффекта. Опыты Герца и Столетова. Формула Эйнштейна.
2. Орбитальный механический и магнитный моменты электрона. Магнетон Бора. Экспериментальное определение магнитных моментов. Опыт Штерна и Герлаха. Спин электрона. Собственный магнитный момент электрона. Гиромагнитное отношение для орбитального и спинового моментов.

Билет №3

1. Модель атома Томсона. Опыты Резерфорда. Планетарная модель атома и проблема устойчивости атомов.
2. Нестационарная теория возмущений. Взаимодействие квантовой системы с электромагнитным полем.

Билет №4

1. Волны де-Бройля. Волновые свойства частиц. Опыты Девиссона-Джермера и Томсона. Волновой пакет. Фазовая и групповая скорость волн де-Бройля. Соотношения неопределенностей.
2. Тождественность микрочастиц. Бозоны и фермионы. Принцип Паули. Системы ферми- и бозе- частиц. Обменное взаимодействие.

Билет №5

1. Принцип суперпозиции состояний. Стационарные и нестационарные состояния частицы в бесконечной прямоугольной потенциальной яме.
2. Основы физики молекул. Ковалентный и ионный тип связи. Энергетический спектр состояний двухатомной молекулы. Электронно – колебательно - вращательные переходы.

Билет №6

1. Атом водорода по Бору. Постулаты Бора. Принцип соответствия. Правило квантования Бора. Боровский радиус орбиты электрона. Экспериментальные доказательства дискретной структуры атомных уровней. Опыты Франка и Герца. Изотопический сдвиг атомных уровней. Мезоатомы, позитроний. Водородоподобные ионы.
2. Иерархия взаимодействий в многоэлектронном атоме. Приближение LS и jj -связей. Терм. Тонкая структура терма. Правило интервалов Ланде.

Билет №7

1. Гамильтониан. Определение энергетического спектра системы как задача на собственные значения оператора Гамильтона. Дискретный и непрерывный спектр.
2. Атом гелия. Симметрия волновой функции относительно перестановки электронов. Синглетные и триплетные состояния. Обменное взаимодействие. Основное состояние атома гелия.

Билет №8

1. Уравнение Шредингера. Свободное движение частицы. Плотность потока вероятности.
2. Многоэлектронные атомы. Заполнение атомных состояний электронами. Атомные оболочки и подоболочки. Электронная конфигурация. Правила Хунда. Основные термы атомов.

Билет №9

1. Стационарное уравнение Шредингера. Частица в прямоугольной потенциальной яме конечной глубины.
2. Спин-орбитальное взаимодействие. Тонкая структура спектра атома водорода. Формула тонкой структуры (Дирака).

Билет №10

1. Уравнение Шредингера. Гармонический осциллятор. Уровни энергии и волновые функции стационарных состояний.
2. Характеристическое рентгеновское излучение. Закон Мозли. Эффект Оже.

Билет №11

1. Туннельный эффект: α -распад атомных ядер, автоэлектронная эмиссия. Туннельный микроскоп.
2. Атом в магнитном поле. Слабое и сильное поле. Полный магнитный момент атома. Множитель Ланде (g-фактор). Эффекты Зеемана и Пашена - Бака.

Билет №12

1. Основы квантовомеханической теории возмущений для стационарных невырожденных состояний. Примеры.
2. Многоэлектронные атомы. Заполнение атомных состояний электронами. Атомные оболочки и подоболочки. Электронная конфигурация. Правила Хунда. Основные термы атомов.

Билет №13

1. Атом водорода по Бору. Постулаты Бора. Принцип соответствия. Правило квантования Бора. Боровский радиус орбиты электрона. Экспериментальные доказательства дискретной структуры атомных уровней. Опыты Франка и Герца. Сериальные закономерности в спектре атома водорода.
2. Атом в магнитном поле. Экспериментальное определение магнитных моментов атома. Опыт Штерна и Герлаха. Слабое и сильное поле. Множитель Ланде (g-фактор).

Билет №14

1. Многоэлектронный атом. Приближение самосогласованного поля Хартри-Фока. Одноэлектронное состояние. Иерархия взаимодействий в многоэлектронном атоме на примере атома гелия.
2. Представления о квантовой теории излучения света атомами. Дипольное приближение. Вероятность перехода. Матричный элемент оператора дипольного момента. Правила отбора. Правило Лапорта.

Билет №15

1. Уравнение Шредингера. Волновая функция, ее свойства. Плотность вероятности. Нормировка волновой функции для дискретного и непрерывного спектра.
2. Лэмбовский сдвиг. Опыт Лэмба и Ризерфорда.

Билет №16

1. Квантовые свойства электромагнитного излучения. Энергия и импульс фотона. Эффект Комптона.
2. Спин и магнитный момент нуклонов и ядра. Сверхтонкая структура атомных спектров. Правило интервалов Ланде.

Билет №17

1. Атом гелия. Симметрия волновой функции относительно перестановки электронов. Синглетные и триплетные состояния. Обменное взаимодействие.
2. Экспериментальное определение магнитных моментов атомов. Опыт Штерна и Герлаха. Полный магнитный момент атома. Множитель Ланде (g-фактор). Электронный парамагнитный резонанс (ЭПР).

Билет №18

1. Принцип суперпозиции. Разложение произвольной волновой функции по собственным функциям эрмитового оператора. Физический смысл коэффициентов разложения.
2. Тонкая структура атомных спектров. Правило интервалов Ланде.

Билет №19

1. Операторы физических величин. Собственные значения и собственные функции операторов x и p_x . Среднее значение и дисперсия физической величины. Проблема одновременного измерения физических величин. Принцип неопределенности.
2. Уравнение Шредингера с центрально-симметричным потенциалом. Разделение переменных. Операторы L^2 , L_z , их собственные значения и функции. Радиальное уравнение. Квантовые числа. Атом водорода. Уровни энергии и волновые функции стационарных состояний.

Билет №20

1. Основы квантовомеханической теории возмущений для стационарных невырожденных состояний. Примеры.
2. Сложение моментов количества движения в многоэлектронном атоме. Приближение LS и jj -связей. Терм. Тонкая структура терма.

Билет №21

1. Нестационарное уравнение Шредингера. Дифференцирование операторов по времени. Сохраняющиеся величины (интегралы движения).
2. Характеристическое рентгеновское излучение. Закон Мозли. Эффект Оже.

Билет №22

1. Волновые свойства частиц. Опыты Девиссона-Джермера и Томсона
2. Многоэлектронные атомы. Заполнение атомных состояний электронами. Атомные оболочки и подоболочки. Электронная конфигурация. Правила Хунда. Основные термы атомов.

Билет №23

1. Принцип суперпозиции. Разложение произвольной волновой функции по собственным функциям эрмитового оператора. Физический смысл коэффициентов разложения.
2. Атомы щелочных металлов. Учет конечного размера и поляризации атомного остова. Квантовый дефект. Спектральные серии щелочных металлов.

Билет №24

1. Пространственное квантование. Операторы L^2 , L_z , их собственные значения и функции. Правила сложения невзаимодействующих моментов количества движения.
2. Атом в магнитном поле. Слабое и сильное поле. Полный магнитный момент атома. Множитель Ланде (g -фактор). Эффекты Зеемана и Пашена - Бака.

Билет 1

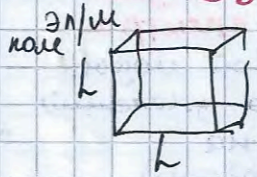
1) Равновесное э-м излучение. Формула Планка. Закон Стеф-Больц. Закон Вина

Э/м излучение, находящееся в термодин равновес. с атомами возбуждающимися, можно получить внутри замкнутой полости, стенки которой удар. при пост. температуре T . Испускание и поглощение э/м излучения атомами, обр. стенки приведет к заполн. полости э/м полем, которое в конце концов придет в сост. термодин. равновесия с вещ-м (будет хар-се T).

Характеристики равнов. излучения:

ρ_{ω} - распр. энергии по спектру (спектр. пл. энергии)
 $\rho_{\omega} d\omega$ - выш. эн. поле в ед. объема $\rho(\omega; d\omega)$

$U = \int \rho_{\omega} d\omega$ - объемная пл. энергии



хотим ρ_{ω} ?
 Произв. сост э/м поле можно представить в виде суперпозиции колебл. мод, примен. на стенках - узлы.
 Вычислим число разл. типов колеб в $(\omega; \omega + d\omega)$

$n \frac{\lambda}{2} = l$ - усл. сущ. стояч. волны в резонанс.

$$\bar{k} = \frac{2\pi}{\lambda} \Rightarrow n_x = \frac{l}{\pi} k_x$$

стоячие - суперп 2-x бегущих

$$dn_x = \frac{l}{\pi} dk_x \quad k \in (-\infty; +\infty)$$

$$dN = dn_x dn_y dn_z = \left(\frac{l}{2\pi}\right)^3 dk_x dk_y dk_z = \left(\frac{l}{2\pi}\right)^3 d^3k \quad | : l^3$$

$$dN_{dk} = \frac{2 \cdot d^3k}{(2\pi)^3} \quad k = \frac{\omega}{c}$$

$$dN d\omega = \frac{2}{(2\pi)^3} 4\pi k^2 dk = \frac{\omega^2 d\omega}{\pi^2 c^3}$$

число типов колеб в $(\omega, \omega + d\omega)$

$$\int \rho_{\omega} d\omega = \langle \epsilon_{\omega} \rangle dN d\omega = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3} \langle \epsilon_{\omega} \rangle d\omega$$

(колебл. мода - гарм. осцил. \Rightarrow выш. ср. эн осцил. в сост. ТР.)

2

$w(\epsilon) = A \exp(-\epsilon/k_B T)$ - через Больцмана.

$\langle \epsilon \rangle = \frac{\int \epsilon w(\epsilon) d\epsilon}{\int w(\epsilon) d\epsilon} = k_B T$ - зн. напр. энергии по степ. свободы

$\int \omega = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3} k_B T$ - ф-ла Рэлея и Динкса. Ковша ф-ла Рэлея и Динкса была получена,

ее неудовл. была очевидна. Выполним интегрир по частотам, т.е. вычисл. объемную плотность энергии равнов. излучения $\Rightarrow U = \int_0^\infty \rho_\omega d\omega = \frac{k_B T}{\pi^2 c^3} \int_0^\infty \omega^2 d\omega \rightarrow \infty$

Т.о. плотность энергии э/м поля "д.б. бесконечно велика", ультраф. катастрофа. Вид спектр. ф-ии ρ_ω в обл. выс частот (фиол. часть спектра) был. уст-нем **Винса**

$\rho_\omega \sim \exp(-\frac{\hbar \omega}{k_B T})$ - ф-ла Винса для фиол. части спектра

Планк: (предп: энергия конкретной полевой моды может принимать строго опред. набор значений кратных или, или самим отказ, от з-на равнораспр. энергии по степеням свободы)

$\epsilon_n = n \epsilon_0, n = 0, 1, 2, \dots$ ϵ_0 - квант. энергии.

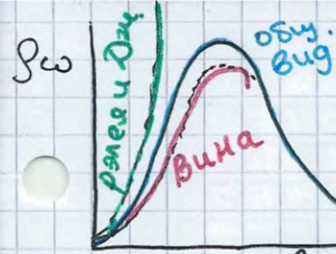
$\langle \epsilon_\omega \rangle = \frac{\sum_{n=0}^\infty \epsilon_n w(\epsilon_n)}{\sum_{n=0}^\infty w(\epsilon_n)}$, введем $\beta = \frac{1}{k_B T} \Rightarrow$

$\langle \epsilon_\omega \rangle = \frac{\sum_{n=0}^\infty \frac{n \epsilon_0 e^{-n \epsilon_0 \beta}}{e^{-n \epsilon_0 \beta}}}{\sum_{n=0}^\infty e^{-n \epsilon_0 \beta}} = -\frac{d}{d\beta} \ln \sum_{n=0}^\infty e^{-n \epsilon_0 \beta} = \frac{\epsilon_0}{\exp(\epsilon_0/k_B T) - 1}$

потреб: чтобы min энергии осущил. была проп. частоте $\epsilon_0 = \hbar \omega, t = 1,05 \cdot 10^{-27}$ эрг.с.

$\rho_\omega d\omega = \frac{1}{\pi^2 c^3} \frac{\hbar \omega^3}{\exp(\hbar \omega/k_B T) - 1} d\omega$ - напр. по спектру э/м излуч

ф-ла Планка



$$\frac{\hbar \omega_{\max}}{k_B T} \approx 2,84$$

ω_{\max} растет линейно с T
(при усл. на экстремум
3-й степ. Вина)

распр энергии в
спектре равн. излуч.

$$U = \int_0^{\infty} \rho_{\omega} d\omega = \frac{1}{\pi^2 c^3} \int_0^{\infty} \frac{\hbar \omega}{\exp(\hbar \omega / k_B T) - 1} d\omega = \frac{k_B^4 T^4}{\pi^2 c^3 \hbar^3} \int_0^{\infty} \frac{x^3}{\exp(x) - 1} dx$$

$$\Rightarrow U = \sigma T^4 \text{ - 3-й Стефана-Больцмана } \sigma = \left[\frac{9 \pi^2}{15 c^3 \hbar^3} \right]$$

т.е. плотность энергии эл/м излучения
растет как четвертая степень темпер.

Получено ρ_{ω} часто исп. ф-ла для распр энергии
излуч. по длинам волн ρ_{λ} . $\rho_{\omega} d\omega = \rho_{\lambda} d\lambda$.

$$\rho_{\lambda} d\lambda = \frac{16\pi^2}{\lambda^5} \frac{\hbar c}{\exp\left(\frac{2\pi\hbar c}{\lambda k_B T}\right) - 1} d\lambda$$

1. излуч звезд (земельный свет) от Солнца
2. рентгеновое излучение.

$$\hbar \omega \ll k_B T$$

Рэлее Джинса

$$\hbar \omega \gg k_B T$$

Вина.

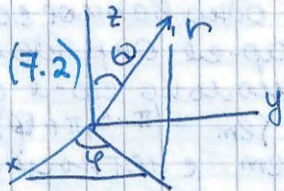
Билет 1.

② Квантование атома водорода. Уровни энергии и волн. ф-ии ст. сост. ψ х св-ва. Задача об опр сост част в УС потенциале V . Атом водор - представляет собой сист с Ч.С.

Пусть поле вн. сил опис. Ч.П. $V=V(\vec{r})$,
 В частн. сл. $V = -\frac{ze^2}{r}$ такой пот опис. $V_3 = e \in \in$ атом водорода.

В сфер. с. коорд:
 Зап. ст. опис. Ч.П.

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(r, \theta, \varphi) + V(r) \psi(r, \theta, \varphi) = E \psi(r, \theta, \varphi) \quad (7.2)$$



Всл. поле с Ч.С. опер Гамильтона коммутир. с опер. уг. мом. код-ва дв: \hat{L}^2 и \hat{L}_z , $[\hat{H}, \hat{L}^2] = 0, [\hat{H}, \hat{L}_z] = 0$

Наши Ч.С. поле позвол. искать реш. метод разд. перемен. $\psi(r, \theta, \varphi) = R(r) Y(\theta, \varphi)$ (7.5)
 разд. перемен. Ч.П. волн.

$$\Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} Y(\theta, \varphi) \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} (rR(r)) - \frac{\hbar^2}{2mr^2} R(r) \Delta_{\Omega} Y(\theta, \varphi) +$$

$$+ V(r) R(r) Y(\theta, \varphi) = ER(r) Y(\theta, \varphi) \Rightarrow \text{норме преобр.}$$

$$R(r) \frac{d^2}{dr^2} (rR(r)) + \frac{2mr^2}{\hbar^2} (E - V(r)) R(r) = -\frac{\Delta_{\Omega} Y(\theta, \varphi)}{Y(\theta, \varphi)} = \lambda \Rightarrow (7.6)$$

$$-\Delta_{\Omega} Y(\theta, \varphi) = \lambda Y(\theta, \varphi) \quad (7.7)$$

реш (7.7) - сфер. ф-ии Y_{lm} , $e^{-i\ell\pi} = 1$.

Сривозначим зр: $\hat{L}^2 Y_{lm} = \hbar^2 l(l+1) Y_{lm}$ - опр. сост
 $\hat{L}_z Y_{lm} = \hbar m Y_{lm}$ - ст. ко-опр зн. уг. мом. l

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) = P_l^m(\cos \theta) \exp(i m \varphi)$$

Состоит, в кот в-на ив пом. и кот-проекции широт
точно опред знаи отис: $h^2 = \hbar^2 \ell(\ell+1)$.

Нормир на един. сфер ф-ии т.е. $\int |Y_{\ell m}(\theta, \varphi)|^2 d\Omega = 1$

Для \forall сост. $Y_{\ell m}(\theta, \varphi)$ сред. знаи $\langle L_x \rangle = \langle L_y \rangle = 0$.
Вычислим $\langle L_x^2 \rangle$ и $\langle L_y^2 \rangle \Rightarrow \langle L_x \rangle^2 + \langle L_y \rangle^2 + \langle L_z \rangle^2 = h^2 = 1$.

$$\langle L_x \rangle^2 + \langle L_y \rangle^2 = \frac{\hbar^2}{a} (\ell(\ell+1) - m^2)$$

где сост $L_z = 0 \Rightarrow \langle L_x^2 \rangle = \langle L_y^2 \rangle = \frac{\hbar^2}{2} \ell$

Еще одно важное сост в ч. с поле:

хар-се опред еи четностью.

Поскольку сфер-е ф-е обладает св-вом

$Y_{\ell m}(\pi - \theta, \pi + \varphi) = (-1)^m Y_{\ell m}(\theta, \varphi)$, то все
сост. с четным ℓ имеют иван шала (s, d, g...)
хар-се пом. четностью, а ~~не~~ нечетные -
с отриц. четностью.

$$U_3(7.6) \text{ получим: } -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} (rR(r)) + \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2mr^2} R(r) +$$

$+V(r)R(r) = ER(r)$, введе новую ф-ю $u(r) = rR(r) \Rightarrow$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u(r)}{dr^2} + V_{\text{eff}}(r)u(r) = Eu(r); \quad V_{\text{eff}}(r) = V(r) + \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2mr^2} \quad (7.13)$$

где ф-ии $u(r)$ - ур-е Шредингера.

центробежн
потенциал.

\Rightarrow Эффект. потенциал не з-т от
магн. кв. шала.

Случай кулоновского потенциала: эфф. потенциал
в кот происх радиал. дв частиц:

$$V_{\text{eff}}(r) = -\frac{ze^2}{r} + \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2mr^2} \quad (7.15)$$

Обозначим (7.13) $\xi = \frac{r}{a_0}$ $\epsilon = |E|/R_y$ $a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2}$ $R_y = \frac{\hbar^2}{2ma_0^2}$

$$(7.13) \Rightarrow \frac{d^2 u(\xi)}{d\xi^2} - \frac{\ell(\ell+1)}{\xi^2} u(\xi) + \left(\frac{2Z}{\xi} - \epsilon \right) u(\xi) = 0 \quad (7.16)$$

7.2)

В обл. больших z . $\xi \rightarrow \infty$. (7.16) $\rightarrow U''(\xi) = \epsilon U(\xi)$

$\Rightarrow U(\xi \rightarrow \infty) \sim \exp(-\sqrt{\epsilon} \xi)$

В обл. малых z $\xi \rightarrow 0$: $U''(\xi) - \frac{\ell(\ell+1)}{\xi^2} U(\xi) = 0 \Rightarrow$
ср. в точке $\xi = 0$ $U(\xi) \sim \xi^{\ell+1}$

(7.16) $\rightarrow U(\xi) = \xi^{\ell+1} v(\xi) \exp(-\lambda \xi)$ з.б. полиномом степеней h_r

$v(\xi) = \sum_{k=0}^{h_r} C_k \xi^k$

$h_r + \ell + 1 = \frac{z}{\sqrt{\epsilon}} \Rightarrow$

из (7.20) $\rightarrow E = - \frac{z^2 R_y}{(n_r + \ell + 1)^2}$ макс. квант. число
 $n = n_r + \ell + 1 \Rightarrow$

$E_n = -z \frac{R_y}{n^2}$

Общ. решение рад. волн ф-ии: $R_{n\ell}(r)$

$R_{n\ell}(r) = A_{n\ell} r^\ell \exp(-\frac{zr}{na_0}) \cdot L_{n-\ell-1}^{2\ell+1}(\frac{2zr}{na_0})$

\Rightarrow Волн. ф-е с тремя квант. числами:

$\Psi_{n, \ell, m}(r, \theta, \varphi) = R_{n\ell}(r) Y_{\ell m}(\theta, \varphi)$

Бишет 2

① Фотоэффект. Законы фотоэф. Опыты Герца и Столетова. Ф-ла Эйнштейна

Фотоэффектом называется испускание электронов с пов-ти металла под действ. света

Герц обнаружил, что при облучении ультрафиол. лучами электродов, наход. под высоким напряж., разряд возникает при большем расстоянии м/ду электродами, чем без облучения (процесс иониз. атомов э/м излуч. (атомный фотоэф))

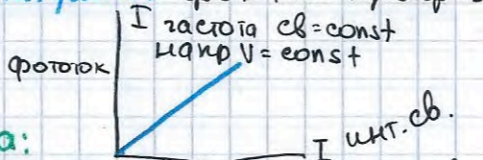
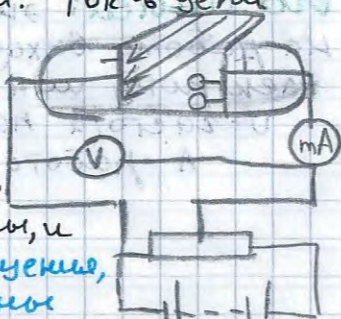
Количественные закономерности фотоэф. были установлены Столетовыми.

Он использовал вакуумный стеклянный баллон с двумя электродами. Через кварцевое стекло на катод попадает свет (в том числе ультрафиолет излуч.) С помощью потенциометра можно регулировать напр. м/ду электродами. Ток в цепи измерялся микроамперметром.

В результате облучения, электроны, выбитые из электрода, могут достигнуть противоп. электрода и создать некот. начальн. ток. При увеличении

напряж., поле разгоняет электроны, и ток увеличивается, достигая насыщения, при котором все выбитые электроны достиг. анода. Если приложить обратное напр., то электроны тормозятся и ток уменьшается. При так назыв. запирающем напряж. фототок прекращается.

$$eU = \frac{m v_{\max}^2}{2} - \text{max скор эл.}$$



Законы фотоэффекта:

1) При фиксир. частоте излуч. число электронов, выбитых из катода в ед. времени, прямо пропорц. интенсивности падающ. света

2) Свч. гранич. частота света, ниже которой фотоэфф отсутствует, незав. от интенсивности светового потока и продоит. облучения катода

3) Электроны покидают катод с энергиями от нуля до макс, котые зависит от интенсивности свет. потока и линейно зав. от частоты.

Формула Эйнштейна:

Эйнштейн, развив теорию планка показал, что 3-ий фотоэфф. м.б. объяснен при помощи квантовой теории явления

фотоэфф. эксперим. доказыв: свет имеет порывистую структуру. Излученная порция $E = h\nu$ — сохран. индивидуальность и пощощается в-вом только целшшом.

Эйнштейн предполож: 1) один фотон может выбирать только один электрон

2) на осн ЗСЭ: $h\nu = A + \frac{mv^2}{2}$ — ур-е Эйншт.

во смысле: энергия кванта тратится на работу выхода эл-на из металла и сообщ. электрону шшн энергии:

ν — частота пад. света.

A — работа выхода электронов из металла.

Билет 2

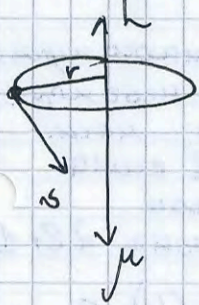
② Орбитальный мех и магн мом. электрона.

момент кол-ва двит, обусл. движением по "орбите" вокруг атомного ядра — **орбит. мех. момент**. У заряж. частицы (e^-) имеется еще и магн. момент. Для круг. орбиты:

$$\vec{\mu} = \frac{1}{c} i \vec{S}, \quad i = \frac{e}{T} \text{ — ток в атоме.}$$

$T = 2\pi/\omega$ — круг. частота.

$S = \pi r^2$ — площ. контура.



Орбит.-мом. кол-ва двит:

$$\vec{h} = [\vec{r} \times m\vec{v}]$$

получим

$$\vec{\mu} = -\frac{e}{2mc} \vec{h}$$

$\frac{e}{2mc}$ —

проценты от отношения

проценты от магн. мом. называют магн. мом. гасицы мех

$$g = \frac{\mu/h}{e/2mc} = 1.$$

$$\hat{\mu}_e = -\frac{e}{2mc} \hat{h}$$

Перейдем к квантовой теории. $\hat{\mu}_z = -\frac{e}{2mc} \hat{h}_z$ — значит, с точно опред. знан \hat{z} — проекции орбит. момента одновр. хар-ся точным знан \hat{z} — проекции магн. мом.

$$\mu_{ez} = \frac{-e\hbar}{2mc} m_l$$

$$m_l = 0; \pm 1, \text{ — магн. квант. число} \quad \mu_B = \frac{e\hbar}{2mc}$$

опред. хар. знан. атомного магн. мом. и носит назван — **МАГНЕТОН БОРА**.

$$\mu_B = 0,927 \cdot 10^{-20} \text{ эр.г/Гс}$$

$$\text{Модуль магн. мом. эл-на} |\mu_e| = \mu_B \sqrt{l(l+1)} \quad l = 0, 1, 2, \dots$$

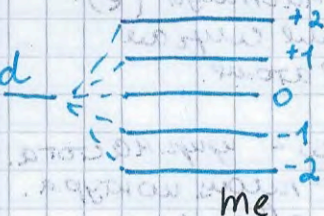
Экспер. опред. магн. мом.

Поместим частицу e^- и магн. мом. $\vec{\mu}$ во внеш. магн. поле \vec{H} , ее энергия

$$W = -(\vec{\mu} \vec{H}), \text{ перем. в виде } W = -\mu_z H$$

Т.к. в-на z -проекции магн. мом. принимает дискр. набор значений, то $\Delta E = -\mu_z H = m_l \mu_B H$,
 $m_l = 0, \pm 1, \dots, \pm l$

Три напр. внеш. магн. поле, уровни, вырота по l ,
 расщепл. на $(2l+1)$ подуровень.

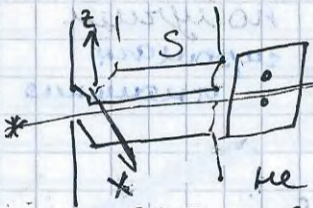


опред. атомный магн. мом.

Исследуем расщепл. атомного пучка при пролете через область неоднор. магн. поле.

В неоднор. магн. поле на атом, облад магн. мом. действ. сила

$$F = -\mu_z \frac{\partial H}{\partial z} \Rightarrow \text{пучок расщепл. } 2l+1.$$



Предпоп. четное кол-во $(H) l=0 \Rightarrow$ не расщ., а коллим. \Rightarrow

есть еще наим. то магн. мом. не связанн. с орбит. Этого собств. мех. мом. \vec{e} б. назв. **спин**.

Спиновое квантовое число $S=1/2$. Тогда возм. значения знак проекции собств. мех. момента эл-на на ось z , при два возм. знака $M_s = \pm 1/2$.

а. шло колл. расщепл. $2s+1=2$.

Квадрат спин. момента и его проекция на ось z :

$$S^2 = \hbar^2 S(S+1) = \frac{3}{4} \hbar^2$$

$$S_z = M_s \hbar = \pm \frac{\hbar}{2}$$

Абс. в-на z -проекции спина эл-на $= \frac{\hbar}{2}$

знак в-ну градиента $M \nabla \frac{\partial H}{\partial z}$, а также геом. раз-р-ы установим, можно устан. саму в-ну собств. м. м. электрона.

$$\vec{\mu}_s = -\frac{e}{mc} \vec{S} \Rightarrow \text{g-фактор } g = \frac{\mu_s / S}{e/2mc} = 2.$$

Бишет 3

① Модель атома Томсона. Опыты Резерфорда. Планетарная модель атома.

Первой физической моделью атома являлась модель Томсона. Простейший атом (атом водорода) представлял собой равномерно заряжен. шар, внутри которого находилась электрон. Поскольку атом в целом нейтрален, плотность полож. заряда ρ_0 связана с размером шара R .

$$e = \frac{4}{3} \pi R^3 \rho_0 \quad e - \text{заряд электр.}$$

Напрям. поле на расст. \vec{r} от центра шара изт. Гаусса

$$E \cdot 4\pi r^2 = 4\pi \cdot \frac{4}{3} \pi r^3 \rho_0 \Rightarrow \vec{E} = \frac{e}{R^3} \cdot \vec{r}$$

тогда ур-е двиг. электрона запишем в виде:

$$m \ddot{\vec{r}} = -\frac{e^2}{R^3} \vec{r} \quad \text{или} \quad \ddot{\vec{r}} + \Omega_0^2 \vec{r} = 0;$$

$$\Omega_0 = \sqrt{\frac{e^2}{m R^3}} - \text{кривая частота колеб.}$$

решение: $\vec{r}(t) = \vec{r}_0 \cdot \cos \Omega_0 t$ - т.е. представление

об атоме, как о гармон. осциляторе

Потери энергии на излуч. приводят к появл. доп. сил - сил радиач. трения.

$$\vec{f}_r = \frac{2e^2}{3c^3} \ddot{\vec{v}}; \quad \ddot{\vec{v}} \approx -\Omega_0^2 \dot{\vec{r}}$$

$$\Rightarrow \vec{f}_r \approx -\frac{2e^2 \Omega_0^2}{3c^3} \dot{\vec{r}} \Rightarrow \text{уравн. двиг. : } \ddot{\vec{r}} + \gamma \dot{\vec{r}} + \Omega_0^2 \vec{r} = 0.$$

$$\gamma = \frac{2e^2 \Omega_0^2}{3m c^3} - \text{класс. пост. затухания.}$$

$$\text{решение: } \vec{r}(t) = \vec{r}_0 \left(\cos \Omega t + \frac{\gamma}{2\Omega} \sin \Omega t \right) \exp(-\gamma t/2) \Rightarrow$$

мало.

$$\Rightarrow \vec{r}(t) = \vec{r}_0 \exp(-\gamma t/2) \cos \Omega t.$$

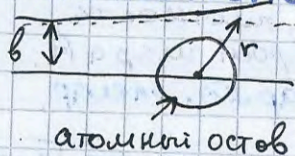
$$\text{энергия: } E(t) = \frac{m \dot{\vec{r}}^2}{2} + \frac{m \Omega_0^2 \vec{r}^2}{2} = E_0 \exp(-\gamma t).$$

Т.о. в рамках модели Томсона атомный е, будучи выведен из РР соверш. гармон. колебание, постеп. отдавая энергию на излуч., возвр. в РП. За время излуч е совер $\sim 10^6 - 10^7$ колеб. \Rightarrow степень монохроматичности высока

Опыты Резерфорда. Планетарная модель.

Опыты по рассеянию α -частиц на тонких металлических (золотых) фольгах. При прохождении через фольгу α -частицы рассеиваются вплоть до углов $180^\circ \Rightarrow$ предположение о наличии внутри атома области компакт. распол. всего полож. заряда, т.е. предпол. о сущ. атомного ядра.

На том же соне:



$E_\alpha = 5 \text{ МэВ}$ - характ-ет v .
 $\theta = \frac{p_\perp}{m_\alpha v} = \frac{2ze^2/b}{E_\alpha}$ потен. кин. $\therefore v \geq R$
 $\max \theta : v = R, R = 10^{-8} \text{ см}, z = 79 \rightarrow \theta_{\max} \sim 10^{-4}$

\Rightarrow резко уменьшить на четыре порядка размер области локализ. полож. заряда. Т.е. мы вынуждены предполож., что внутри атома ядро $R_0 \sim 10^{-12} \text{ см}$.

\Rightarrow Планетарная модель: Всм. простейшего атома (атома водорода) е движт. по ~~кругу~~ элемент. траектории **птохо:** е, движаясь по кривой орбите, излучает э/м волны, теряет энергию и падает на ядро. Атом оказывается нестабильн, живущим конечное время.

Оценим время жизни атома по Резерфорду:

$\frac{dE}{dt} = -\frac{2e^2}{3c^3} \frac{\ddot{r}^2}{r^2}$ - скорость потери энергии на излуч.

УД: $\frac{mv^2}{r} = \frac{e^2}{r^2}$
 полн. энергия $E = -\frac{mv^2}{2} = -\frac{e^2}{2r}$

$\frac{dE}{dt} = -\beta E^4, \beta = \frac{32}{3} \frac{1}{m^2 c^3 e^2}$
 $\int_{E_0}^0 \frac{dE}{E^4} = -\beta \tau, \tau$ - вр. пад. е на ядро

$\Rightarrow \tau = \frac{1}{3\beta |E_0|^3} = \frac{1}{32} \left(\frac{mc^2}{|E_0|} \right)^3 \cdot \frac{r_e}{c}; r_e = \frac{e^2}{mc^2}$

класс. рад. эл-на
 Время жизни атома зависит от энергии на л. еост. Сильно возб. сост. могут жить достат. долго. Для большинства невозб. атомов $E_0 \sim -10 \text{ эВ}$, $\tau \sim 10^{-10} \text{ с}$
 \Rightarrow е упадет на ядро слишком быстро.

Билет 3.

② Кест. теория возм. Взаим. ив сист с эл. полем
 Взаим. ив сист с электр.-м полем

Пусть атом система опис гамиль. Но, придем будем считать, что мы знаем набор $\{Z, \text{CF}\}$ атомного гамиль Ψ_0 и E_0 , удовл. ур-е $\hat{H}_0 \Psi_0 = E_0 \Psi_0$

Запишем гамиль в присут. внеш эл. поля. У нас имеется номер электр волна $\vec{E}(\vec{r}, t) = \vec{E}_0 \cos(\vec{k}\vec{r} - \omega t)$

$$\vec{H}(\vec{r}, t) = \vec{H}_0 \cos(\vec{k}\vec{r} - \omega t)$$

о стор поле волны действ инварианта: $\vec{F} = e\vec{E} + \frac{e}{c} [\vec{v} \times \vec{H}]$

Поле слабое, электрон перемет \Rightarrow т.к в вакууме $|\vec{E}_0| = |\vec{H}_0| \Rightarrow$

$$\lambda = \frac{2\pi c}{\omega}$$

$$\frac{F_m}{F_{el}} = \frac{v}{c} \sim \lambda = \frac{1}{137} \ll 1 \Rightarrow \text{ман. частью } F_m \text{ можно пренебр.}$$

Эл. поле можно считать прост-но однородным

$$\vec{E}(t) = \vec{E}_0 \cos \omega t$$

Энергия вз-я атома, как сист зарядов, с внеш эл.

полем запишем в виде $W = -(\vec{d} \cdot \vec{E})$, $\vec{d} = e \sum_b \vec{r}_i$ - дип. мом сист.

Будем работать в одноэл. приближ, $\vec{d} = e\vec{r}$, \vec{r} - коорд. ат. электр.

Переход и масс теория, и инвариант $\hat{W}(\vec{r}, t) = -(\vec{d} \cdot \vec{E}(t))$
 \vec{d} - опер. дип. момента.

Направим ось z вдоль напр вектора эл. поля волны \Rightarrow

$$\hat{W}(\vec{r}, t) = -d_z E(t), \text{ а эволюция}$$

сист под действ. поле волн опис ур-ем Шредингера:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = (\hat{H}_0 + \hat{W}(\vec{r}, t)) \Psi(\vec{r}, t)$$

Сопоставим энергии вз-я, кот входит в посылный \hat{H} :

энергия вз-я ат. электрона с внеш ман полем W и эн. его вз-я с ат ядром $V \sim e^2/a_0$ (a_0 - бор радиус).

Дип. мом есть в-на порядка $e a_0$, $\Rightarrow W \sim e a_0 E \Rightarrow$

$$E \ll e/a_0^2$$

В-на $E_{at} = e/a_0^2 = 5.10^9 \frac{B}{cm}$ - внутр. знач напр эл. поле

В-на интен. $I = c E_0^2 / 8\pi$, позе усм применимо ст теор возм но вз-ю ив сист с полем эл. волны можно переп в виде $I \ll I_{at}$

$I_{at} = c E_{at}^2 / 8\pi$ - атом. зн интенсности

Устойчивость теории возмущений

Положим, что в начальный момент времени (\$t=0\$) в квантовой системе состояние не возмущено атомом. Тогда есть волн. ф-я

$$\Psi(\vec{r}, t) = \sum_n C_n(t) \psi_n(\vec{r}) \exp(-\frac{i}{\hbar} E_n t)$$

Начусь: \$C_n(t=0) = \delta_{ni} = \begin{cases} 0, & n \neq i \\ 1, & n = i \end{cases} \Rightarrow\$

$$i\hbar \sum_n \left(\frac{dC_n}{dt} - \frac{i}{\hbar} E_n C_n \right) \psi_n \exp(-\frac{i}{\hbar} E_n t) = \sum_n C_n (\hat{H}_0 + \hat{W}) \psi_n \exp(-\frac{i}{\hbar} E_n t)$$

т.к. \$\psi_n\$ - СФ ат. замкнутой системы, то

$$i\hbar \sum_n \frac{dC_n}{dt} \psi_n \exp(-\frac{i}{\hbar} E_n t) = \sum_n C_n \hat{W} \psi_n \exp(-\frac{i}{\hbar} E_n t)$$

$$i \cdot \psi_f^*(\vec{r}) \exp(i(\hbar) E_f t) \Rightarrow i\hbar \frac{dC_f}{dt} = \sum_n C_n \langle \psi_f | \hat{W} | \psi_n \rangle \exp(i(\omega_{fn}) t)$$

Прегет. ампн в-ти \$C_n = C_n^{(0)} + C_n^{(1)} + C_n^{(2)} + \dots\$; \$C_n^{(0)}(t) = \delta_{ni}\$

$$\Rightarrow i\hbar \frac{dC_f^{(1)}}{dt} = \sum_n C_n^{(0)} \langle \psi_f | \hat{W} | \psi_n \rangle \exp(i\omega_{fn} t) = \langle \psi_f | \hat{W} | \psi_i \rangle \exp(i\omega_{fi} t)$$

$$= \text{интегр} \Rightarrow C_f^{(1)}(t) = -\frac{i}{\hbar} \int_0^t W_{fi}(t) \exp(i\omega_{fi} t) dt. \quad \text{- неуст. 3-го порядка}$$

Для вз-е опер-ра с полем вонкин: \$C_f^{(1)}(t) = i \frac{d\epsilon_i E_0}{\hbar} \int_0^t \cos(\omega t) \exp(i\omega t) dt\$

$$\Rightarrow \cos \omega t = \frac{1}{2} (\exp(i\omega t) + \exp(-i\omega t)) \Rightarrow C_f^{(1)} = i \frac{d\epsilon_i E_0}{2\hbar} \left(\frac{\exp(i(\omega_f - \omega)t) - 1}{i(\omega_f - \omega)} \right)$$

$$\text{выр для ампн. в-ти: } C_f^{(1)}(t) = \frac{d\epsilon_i E_0}{2\hbar} \exp(i \frac{\Delta\omega t}{2}) \frac{\sin(\Delta\omega t/2)}{\Delta\omega/2}$$

в случае \$\Delta\omega = 0\$, в-ти энер-ии совпадают с частотой возмущения.

$$D_{fi}(t) = \frac{|d_{fi}|^2 E_0^2}{4\hbar^2} \left(\frac{\sin \Delta\omega t/2}{\Delta\omega/2} \right)^2 \sim t^2$$

Тогда возд на том волни хар-ем \$I = \frac{c E_0^2}{8\pi}\$

\$\Rightarrow\$ вероятность перехода опер. зная энергию и т.д.

$$W_{fi} = \frac{4\pi^2 |d_{fi}|^2}{c\hbar^2} I_{\omega} = W_{fi} I_{\omega}$$

$$\Rightarrow W_{fi}^2 = \frac{4\pi^2 |d_{fi}|^2}{3c\hbar^2} I_{\omega} = B_{fi} I_{\omega} \quad \text{коэф. Эйнштейна возбуждения переходов}$$

Билет 4.

① Волновые св-ва частиц. Волны де-Бройля
 Опыт Девиссона-Джермера. Волновой пакет.
 Фазовая и групповая скорость. Соотн. неспрэд.

Де-Бройль высказал предположение, что дуализм "волно-частица" присущ не только фотонам, но и электронам и другим частицам.

Движению частиц \vec{p} про-ве соотв. некоторые волн процесс: $\vec{p} = \hbar \vec{k}$, $\lambda_0 = \frac{h}{p} = \frac{2\pi \hbar}{p}$, $E = \hbar \omega$

Выраж для волн Де-Бройля: $\lambda_0 = h \sqrt{1 - (v/c)^2} / m_0 v$, но нам

важно: $\lambda_0 = \frac{h}{m_0 v}$ λ_0 где v , приблизительно 10^8 ,

\Rightarrow наблюдать волновые св-ва не просто, т.к. для наблюд. дифракц. ущем размер $\sim 10^8$ должен быть такой размер ш/ду атомов в тв. телах \Rightarrow их использ. для обнару. св-в волн где v .

Эти опыты были выпн. Девиссоном и Джермером

детектор из меряет интенсивность рассеянного пучка в зав-ти от угла рассеян. и энергии испор. эл-нов. данные похожи на дифр. рентгеновских лучей на монокристалле.



max: $2d \cos \theta = n\lambda$. - уль Вульфа-Бригга

$$\lambda_0 = \frac{h}{\sqrt{2meV}} \rightarrow \sqrt{V} d \cos \theta = An, A = \text{const}$$

\Rightarrow пучок ϵ ведет себе как волновое поле, хер-се длиной волны де-Бройля.

Наблюдать дифракцию нет частиц (напр, нейтронов) гораздо сложнее чем электронов. Это связано с тем, что длина волны частицы убывает увеличением массы. Поэтому для наблюд. дифр. нейтронов на крист. необходимо их глубокое охлад, до темпер. не превыш. несколько десятков град. Кельвина

Т.об. 1) широкообъемтам прилуч. корпус-волн дуализм

2) дается в пр-ве опис-ся волн. теорией.

Волновой пакет. Соотн. неопределенностей.

В соотв с гипотезой де-Бройля своб. частице с шип. p можно прост в соот. волну $\Psi(x,t) = A \exp(i(kx - \omega t))$.

$$\Psi(x,t) = A \exp\left(\frac{i}{\hbar}(px - Et)\right)$$

шип. энергия част.

Из совокупности плоских волн \rightarrow волновой пакет

$$\Psi(x,t) = \frac{1}{(2\pi)^a} \int \Psi_{k,\omega} \exp(i(kx - \omega t)) dk_x d\omega$$

$\Psi_{k,\omega}$ - ампл. плоских волн, обр пакет. Из

волновой теории мы знаем, что скорость перем. пакета как целого отр. групповой скоростью:

$$v_g = \frac{d\omega}{dk}, \text{ учитывая}$$

$$E = \hbar\omega, p = \hbar k, \Rightarrow v_g = \frac{dE}{dp} = \frac{p}{m}$$

если исп. перемет связь энергии и шип, то для

фазовой скорости: $v_{ph} = \frac{\omega}{k} \sim k$ - это значит, что пакет

будет расширяться.

Связь шип спектра разн. пространств м.б. получ с помощью обр. преобр Фурье: $\Psi_{k,\omega} = \int \Psi(x,t) \exp(-i(kx - \omega t)) dx dt$.

\Rightarrow если волн. пакет $\Psi(x)$ хар-ся обл.

простр локализ размером Δx , то шип спектра волн. сп. Δk_x удовл. соотн $\Delta k_x \Delta x \geq 1$. Аналогично $\Delta p_x \Delta x \geq \hbar$

здесь Δp_x задает ширину пакета $\Psi_{k,\omega}$. Однако, Δx и Δp_x можно понимать, как неопр-ти знам координат.

В трехм. случае: $\Delta p_x \Delta x \geq \hbar, \Delta p_y \Delta y \geq \hbar, \Delta p_z \Delta z \geq \hbar$.

Эти соотношения - соотнош. неопределенностей (Гейзенберга)

Соотнош. устан. связь м/ду временной длительностью процесса τ и шип. его частотного спектра $\Delta \nu \cdot \tau \sim 1$. $\hbar \Rightarrow$

получаем соотн. неопр Гейзенберга для:

энергии - времени: $\Delta E \cdot \tau \sim \hbar$

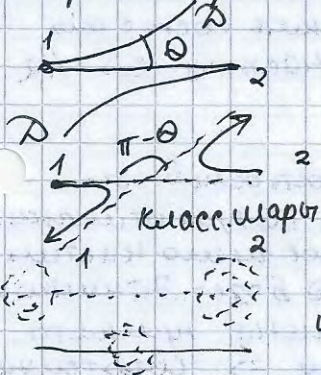
: Если квантовая сист имеет время τ , то энергии этой сист. не м.б. определена, случаем гел:

$$\Delta E \geq \hbar / \tau$$

Бишет 4.

② Тотдеств микрогастиц. Бозоны и фермионы Принцип Паули. Оби. в-звие

Принцип тотдеств - замилор. в неразим. 2-х один. микрогаст (\bar{e}) Связано е отсути вием у микродобиевтов масс. траектории двитение.



В кв. ел \bar{e} описывается волн. пакетом, деюнализ. в немот обл. пр-ва

$$P_{cl} = P(\theta) + P(\pi - \theta)$$

$$P_{cl} = P(\theta) + P(\pi - \theta)$$

Три сбмлт. в какой-то момент времени волн. ф-ии обои электроном переирыв, => утраивается возмощних идентифицировать.

Сматем. точки зрения тотдеств. микрогастци требует определенных св-в симметрии волн. ф-ии системы гастци

отно-ко перестановки Пусть имеемся сист 2-х \bar{e} , опис волн. ф-ий $\Psi(\xi_1, \xi_2)$. Тотдеств. \bar{e} ознаоает, что $\Psi(\xi_1, \xi_2)$ и $\Psi(\xi_2, \xi_1)$ опис одно и тоге сост двухэл. сист. => $\Psi(\xi_1, \xi_2) = \pm \Psi(\xi_2, \xi_1)$, т.о. принцип

тотдеств-ти ведег к опред. симметрии волн. ф-ии двухгаст. системы: она г.б симметрична ($\lambda = +1$), либо антисимметрична ($\lambda = -1$) отно-ко перестановки гастци местами

В прероде реализ. оба случая! Привем СММ. волн. ф-е опис совокупность гастци с земл спином ($s=0$), а АНТИСИМ ($s=1/2, 3/2, \dots$) => спич - ватная хар-ка

Полими \bar{e} , сполучивши спинам относятся протон и нейтрон ($s=1/2$). Цельви епиком - фотон, пионы (π^0, π^\pm), гастци - иванги переносиши елдобю в-е (W^\pm, Z^0 - бозоны)

Из расм. св-в симметрии волн. ф-ии => **Принцип Паули**: две гастци сполучел.

спином не могут. Наход. в одном и том же
квантов. состоянии. Действ, пусть $\Psi_1(\epsilon) = \Psi_2(\epsilon)$
 $\Rightarrow \Psi_A(\epsilon_1, \epsilon_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\Psi_1(\epsilon_1) \Psi_1(\epsilon_2) - \Psi_1(\epsilon_2) \Psi_1(\epsilon_1)) = 0$
т.е. состояние невозможно.

Половому волн. ф-я однозн задается квант. числами
 n, l, m_l, m_s , то в атоме не м.б. двух электронов
харая. одним и тем же набором квант. чисел.

Пр. Паулине позволяет дать $S = 1/2$ занять еосте min
энергией. Стат св-ва ансамбле частиц. с $S = 1/2$
они е распр Ферми-Дирака

Частицы с учетом спином заселенность основного
эп. еост. омаз-се больше. В рез-те при отрицных
отнух темпер. макроскоп. большое число частиц
омаз в еост стип энергией - наблюд Бозе-Эйнштейна.
Соотв. частицы с учетом знак спина называют
маз бозе-гаст или бозонами. \Rightarrow сверхтекучесть
и сверхпроводимость.

Т.о. св-ва симметрии волн. ф-и еост тотдеств
частиц. от-но их перестановки ведут к соверш. разнннм
статист. распр в ансамбле частиц.

Совершенно разннне св-ва еост. из ферми-и бозе-
частиц. не связ с нашим либо новым ерив. взаим-ем
м/ду ними, а евл. проявл св-в симметрии волн. ф-и
еост частиц.

Бишет 5

① Принцип суперпоз. сост. Стауи нестационан. сост. частиц в беск. промежутке

Принцип суперпоз. - это суперпозиция кот. не могут быть реализов. одноврем-но с массой той же энергии, это суперпозиция альтернатив. состо. яний.

Если ф-ии ψ_1 и ψ_2 доступными волновыми ф-ями, опис. состояние квант. системы, то их линейная суперпоз $\psi_3 = C_1\psi_1 + C_2\psi_2$ также опис. сост. систем \rightarrow волн. ф-ии д.д. линейными

Частица в промеж. потенциальной ямы.

1) Стау. сост. частиц в потенциале

$$V(x) = \begin{cases} 0, & |x| \leq a/2 \\ \infty, & |x| > a/2. \end{cases}$$

стау. (не зависящ. от t)

Ур-е. $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V(x)\psi = E\psi$
Передн.

Наша задача найти E , при кот. ур-е не имеет нулевых решений.

Обл: $x \in (-\frac{a}{2}, \frac{a}{2})$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \underbrace{\frac{2mE}{\hbar^2}}_{=k_1^2} \psi = 0.$$

• полагаем волнов. ф-ию непрерыв. требуем, чтобы на границах ямы она обр-ва ноль $\psi(x = \pm a/2) = 0$.

реш: $\psi(x) = A \sin kx + B \cos kx$.

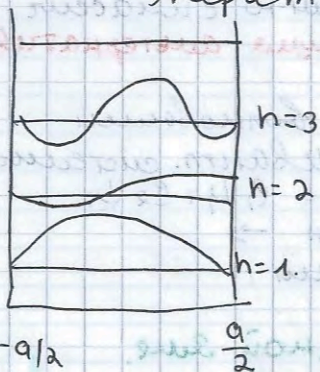
границ. усл: $\begin{cases} A \sin \frac{ka}{2} + B \cos \frac{ka}{2} = 0. \\ -A \sin \frac{ka}{2} + B \cos \frac{ka}{2} = 0. \end{cases}$

$$\Rightarrow \sin \frac{ka}{2} \cos \frac{ka}{2} + \sin \frac{ka}{2} \cos \frac{ka}{2} = 0$$

$$\sin(ka) = 0 \Rightarrow k_n = \frac{\pi n}{a} \quad n=0, 1, \dots$$

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

Т.о. в бесконечно глубокой прямоугольной потенциальной яме формируется дискретный энергетический спектр.



Уравнение Шредингера:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + V(r, t) \psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}$$

Уравнение 1-ого порядка по времени (определяет эволюцию в момент t).

Устойчивое состояние

действительно принцип суперпозиции.

$$\Psi(x, t) = C_1 \psi_1(x, t) + C_2 \psi_2(x, t)$$

Общий случай - волновые функции описывают произвольное состояние квантовой системы. Разложение по ортонормированной базе собственных функций эрмитова оператора.

$$\Psi(x, t) = \sum_n C_n \psi_n(x) e^{-i \frac{E_n}{\hbar} t}$$

$$\hat{H} \psi_n = E_n \psi_n$$

$$C_n = \int \psi_n^* \Psi(x) dx \rightarrow \sum C_n^2 = 1 \Rightarrow \delta_n$$

Билет 5

② Основы физики молекул. Ков. и ионный тип связи. Энерг. спектр. Эл.-вр.-пол. переходы

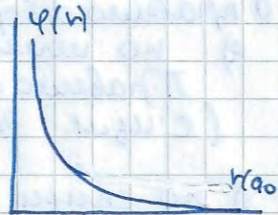
Основы физики молекул.

Образ молекул - эфф. многоионный, модель Рассел. Возм. обр. прост. мол. сист. - H_2^+ , сост. из 2-х протонов и одного эл.-на. У нас имеется атом водорода в осн. сост. (1s). Для обр. молекулы м/ду атомом водорода и протоном должны возн. силы притяж. Электрон созд. в пр-ве опр. пот. заряда $\varphi(r) = -e/|\Psi_{1s}(r)|^2 = -\frac{e}{4\pi a_0^3} \exp(-\frac{2r}{a_0})$

\Rightarrow ур-е Пуассона запишем в виде:

$$\frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} (r\varphi(r)) = -4\pi (e\delta(r) + \rho(r))$$

первый член в правой части учит. наличие атом. ядра. р-н: $\varphi(r) = \frac{e}{r} (1 + \frac{r}{a_0}) \exp(-\frac{2r}{a_0})$



энергия вз-е прот. с атомом водорода возраст.

по мере притяж. протона к атому водорода, т.е. в сист. "атом вод-протон" возм. отталкивание при притяж. протона расс. $R \leq a_0 \Rightarrow$ обр. H_2^+ - невозм.

Ковал. и ионный тип связи.

Рассм. двух атом. молекулу - водорода \Rightarrow

волн. ф-ии: $\psi(1) \sim \psi_A^{(1)} + \psi_B^{(1)}$ $\psi(2) \sim \psi_A^{(2)} + \psi_B^{(2)}$

"1" и "2" - коорд. 1 и 2 электрона.

Для молекул орбитали

$$\psi(1,2) = \psi(1)\psi(2) \sim \underbrace{\psi_A^{(1)}\psi_B^{(2)} + \psi_A^{(2)}\psi_B^{(1)}}_{\text{волн. разл. ядер}} + \underbrace{\psi_A^{(1)}\psi_A^{(2)}}_{\text{оба у А}} + \underbrace{\psi_B^{(1)}\psi_B^{(2)}}_{\text{оба у В}}$$

\Rightarrow введем подгон. параметры:

$$\psi(1,2) = \alpha (\psi_A^{(1)}\psi_B^{(2)} + \psi_A^{(2)}\psi_B^{(1)}) + \beta \cdot \psi_A^{(1)}\psi_A^{(2)} + \delta \cdot \psi_B^{(1)}\psi_B^{(2)}$$

если $\beta=1, \delta=0 \Rightarrow$ локализ. у центра "А"

если $\delta=1, \alpha=\beta=0 \Rightarrow$ локализ. у "В" центра

в такой ситуации мол. сист. в виде совок.

двух ионов: отриц. заряды \Rightarrow **ионный**

тип связи.

В ион. промет ел. может реализ. **ион. пол. связь**, когда плотность распредел. по двум. ядрам центрам, но смеш. и одному из них

Для гомоядерных молекул - ковалентная связь

Цокинн типев хар-ен дле атомов, один из кот. имеет еравн. небольш потенциал ионизации, дле своено отриц. иона.

Электр-вр-поле

Дле цомов. молекул ($M_1 = M_2$) ядерн дит. мом = 0, т.е. внем поле не оказ. влияю. возд. на ядерну подст. молекул.

В цомов. молекулах кот. вращ. переходы в пределах одного эл. термина запрещ.

Дле четеро ядерных:

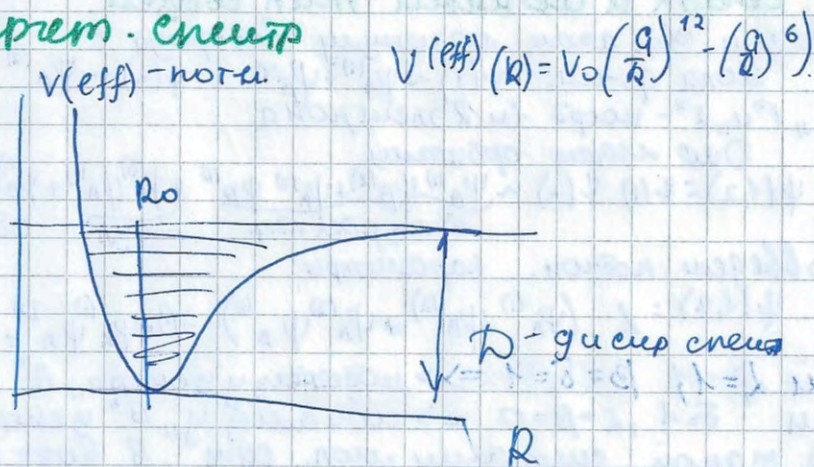
- 1) правило отбора по вращ. иван числу: $\Delta J = J_f - J_i = \pm 1$
 - 2) по колеб. ив. числу $\Delta v = v_f - v_i = \pm 1$ (прим.)
- Правило отбора дле элек-поле - вращ. переходов (с изм. электр. еост)

1) по спину: ΔS

2) По Λ , опред. проекцию электр. орбитал. момента на ось молекулы: $\Delta \Lambda = 0; \pm 1$

3) по вращ: $\Delta J = 0; \pm 1$

Энергет. спектр



Билет 6

① Атом водорода по Бору

За основу Бор взял планетарную модель Резерфорда, однако в ней было упрямое \bar{e} двигалась вокруг ядра г.б. излучать энергию непрерывно и потеряв ее очень быстро упасть на ядро. Чтобы преодолеть эту проблему Бор ввел допущение, что \bar{e} в атоме могут двигаться только по опред. (станц.) орбитам, находясь на кот они не излучают, а излучение или поглосение происходит только в момент перехода с одной орбиты на другую. (Привем станц. сост. \bar{e} лишь те орбиты, при кот двит по которым момент кол-ва движения \bar{e} = целовку числу. Планка.

- выполнено условие квантования момента кол-ва движения $L_z = n\hbar$, $n=1, 2, \dots$

Постулаты Бора.

1) Атомы и атомные системы могут длительно пребывать только в особых станц. состояниях или квантовых состояниях, катдому из котрых отвает опред. энергия. В станц. состоян. атом не излучает

2) Излучение света происх. при переходе \bar{e} из станц. состоян. с большей энергией в станц. сост. с меньшей энергией излуч. фотона = разности энергии станц. состоян. $h\nu$.

Запишем ур-е движения для \bar{e} , вращ. по круговой орбите, заряд ядра Z .

$$\frac{mv^2}{r} = \frac{Ze^2}{r^2} \quad (\text{II } Z\text{-и К. в поле центр. сил)}$$

- при двит. в центр. симметр. поле сохр. момент кол-ва двит. где Z - заряд ядра.
$$h\hbar = L_z = mvr = \text{const.}$$

• полная энергия \bar{e}

$$E = \frac{mv^2}{2} - \frac{Ze^2}{r} = -\frac{mv^2}{2}$$

• $\lambda z = \frac{ze^2}{\sqrt{v}} \rightarrow E = -\frac{mz^2 e^4}{2\lambda z^2}$ тогда при переходе на орбиту изм. энергии связано с изм. момента кол-ва движения.

$$\Delta E = -\frac{mz^2 e^4}{2\lambda z^3} \Delta \lambda z$$

\rightarrow изменение энергии связано с изменением $h\nu$.

Принцип соответствия - утверди, что в новой научной теории при наличии старой, хорошо провер. теор, наход. след. в полном противоречии, а дает менее следствия.

В квант. механ. принципе соответ. назыв. утвержд. о том, что поведение квант. мех. сист. стремится к класс. физике в пределах больших квант. чисел (т.е. в случ. высоких орбит) частота кванта д.б. равной угловой частоте электр. по орбите.

$$\Delta E = h\nu = h \frac{v}{r} = h \frac{mz^2 e^4}{\lambda z^3} \omega = \frac{v}{z}$$

т.е. для высоких орбит в случ. принципа соответ. д.б. верно $\Delta \lambda z = h$ (пусть это, верно для ν орбит)

\rightarrow орбиты должны удовл. требованию.

$$\lambda z = n h + \text{const.}$$

• при $n < 0$ e^- движется по той же орбите но в другую сторону.

$$r_n = \left[v = \frac{nh}{mr} \rightarrow m \frac{(nh)^2}{m^2 r^2 r n} = \frac{ze^2}{r^2} \right] =$$

$$\Rightarrow r_n = \frac{n^2 h^2}{ze^2 m} = a_0 \frac{n^2}{z}, \text{ где}$$

$$a_0 = \frac{h^2}{me^2} \text{ - боревский (фантаз. размер атома H)}$$

$$a_0 = 5 \cdot 10^{-9} \text{ см}$$

$$\frac{V_n}{c} = \frac{e^2 z}{h c n} \rightarrow \lambda = \frac{e^2}{h c} = \frac{1}{137}$$

постоянная тонкой стр-ры (она опред. электр. и заряд в атом. безразм. единицах) \rightarrow электрич. силы

заряд опред.

Электрон. **Взаим.** малость v -ны

λ , знает, что \Rightarrow электр. v_3 -е слабое.
 • Опр. разреш уровни энергии.

$$E_n = -\frac{m v_n^2}{2} = -\frac{m e^4 z^2}{2 \hbar^2 n^2}$$

$$R_y = \frac{m e^4}{2 \hbar^2} = 13,6 \text{ эВ}$$

потенциал.
 ионизации водор.

Частота излуч. испоси. водор. $n \rightarrow n-1$

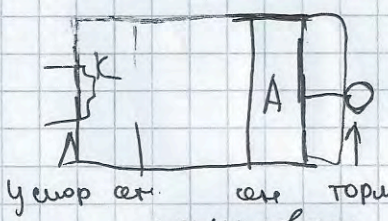
$$\hbar \omega_{nm} = R_y z^2 \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad n > m$$

ср-ла Бальмера. (помощ. ивант при $m > n$)

Серия Бальмера $\frac{2}{1} \Rightarrow$ выше.
 Серия Лаймана.

Экспер док-ва диспер стрн. Опыт Франца и Герца.

К разрядной трубке подавалось
 напрят **ускоряющее** и/ду
 катодом и сеткой и
тормозящее и/ду анодом
 и сеткой



Трубку наполнили
 насыщ парами ртути, \bar{e}
~~ионизировали~~ **Экциривали** спов-тью
 катодом и/ду катодом и сеткой, а
 затем попадали в обл. тормозящего

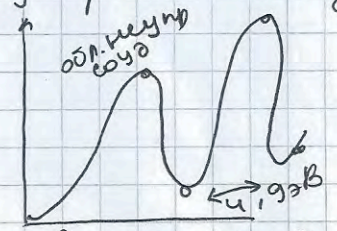
~~электронного~~ поле и/ду сеткой и анодом

• В процессе двит от катода к аноду \bar{e}
 испыт упругие и неупр. соударения с
 атомами ртути.

• при упруг атом ртути ост. в основн.
 состоянии (энергия E \bar{e} практически неизм.)

• при неупр. $E \bar{e} \rightarrow v$ возб. сост атом ртути.

• Измеряется анодный ток. (кол-во \bar{e} пришедш
 на анод)



завис. анодного I
 от U ускор.

в зав-ти от v -ны
 напр. и/ду \max ост. $\text{const} + 4,9 \text{ эВ}$
 т.к. если энергия \bar{e} набрана
 в промежутке и/ду катодом и
 сеткой не дост, чтобы возм.
 атом. водор, он испыт. только
 упругие соударения. и без труда

преодолеет **тормозящее** и увелич I анода. Но если
 от неупр. соудар. \rightarrow отдаст энергию \rightarrow уменьш I анода

Min поруге энергии \bar{e} достает передать
 атому водор, при возб. $4,9 \text{ эВ}$. \rightarrow электр дисп.

Бишет 6

② Церах в-ий в много эл атоме Лунбл $h^2 u_j j$.
Терм Токнае ст-ра терма. Правило Ланде

В много эл. атомах энергия одноэл. состои-
сильно зависит от знак орбит иван числа.

Сост. с шав. ив. числом l и нулевым знак орбит

момента "пробиваются" выше, т.к. энергия

оказ меньше, чем энергия d -сост, соотв ивант. числу

$n-1$. Эта закономерность лежит в основе

правила заплн. эл. обол и подобол. в много эл. атом:

1) из двух подобол. ните по энергии распол. та,
где кот в-на $n+l$ оказ меньшей.

2) Если две каки-либо двух подобол. знак сумм $n+l$
совпад, то ните по энергии лежит подоб. сменьш. зн n .

Т.о. $4s$ и $5s$ n /одн. дотки зап. раньше чем $3d$ и $4d$.

Накал. уровне справ-ть указ. выше порядка заплн. n /одн.

подтв. период. з-ком Менделеева. Поскольку за хим. св-ва
элементов отвт эл-ны внешних, не полностью заплн. обол,

то по извест. хим св-вам того или иного эл-та можно
судить о его электр строении. Энергии электр в $4s$ и $3d$

подобол. близки. Поэтому для ряда элементов происх.

"перепрыгивание" электрона из $4s$ подобол. в $3d$.

Такие особенности распр по близко располож.

подоболочкам можно предсказать только в рез-те
ивант. механик. расчетов.

Терми много эл. атомов

Волновые ф-ии термов облад. отлит. симметрией

кто приводит к разным знак среднего уда.

эл-нов дупл от дупла \Rightarrow разное величина энергии
электрост. $3z$ -е электронов. \Rightarrow конфигурация

расуеиается на термы.

У атомов, еодерж. произв число электронов в
каждой эл-ой конфигурации можно построить
опред. кол-во термов, хар-се знак полного орбит.

$\bar{L} = \sum \bar{l}_i$ и полного спин. мом $\bar{S} = \sum \bar{s}_i$ всей
совокупности ат. эл-нов.

1) два неживив атома: l -конф kn^1p . Чтобы опр.
терм, надо опр. возм зн \bar{L} и \bar{S} : $l = 0, 1, 2$; $s = 0, 1 \Rightarrow$
реализ. $1S, 1P, 1D$ $3S, 3P, 3D \Rightarrow 1SPD, 3SPD$.

2) 2 эвив электрона. конформ пр². Три орб.
 возм. зн l и S - принцип Паули (оба эл-ма не
 могут иметь совп. наборов кв чисел) \Rightarrow только три
 терма $^1S, ^1D, ^3P$.

Тонкая структура терма.

Спин-орбит вз-е приводит к появлению тонкой
 структуры терма: терм расщепл. на группу
 сост. - мультиплет, число ком моментом
 опред. ориент векторов l и S , т.е. числом возм. зн.
 кв. чисел J . Дале обозн. сост многоэп. атома
 принимаю обозн. $^{2S+1}L_J$.

Иногда обозн. сост. многоэп. атома исп. и для
 атома водор. (одноэп. ат), указывая зн. шав кв чисел.

Правило интерв Ланде

Оператор спин орб. вз-е $\hat{V}_{ls} = A(\hat{L}\hat{S})$, A - const
 связи.
 Мет. теор. косин $\Rightarrow \hat{V}_{ls} = \frac{A}{2} (\hat{J}^2 - \hat{L}^2 - \hat{S}^2)$ учитывая, что
 опред. знан. орбит и спин. и полного мех. мом \Rightarrow
 матричные элемент $\Rightarrow E_J = \frac{A}{2} (J(J+1) - L(L+1) - S(S+1))$.

тогда расст м/ду сосед. ком. мультиплета опред.
 $\Delta E_J = E_J - E_{J-1} = AJ$

- правило Ланде

Приближт LS и jj связей.

Орбиты спин мом свободны ат. электр опред. или
 $\vec{h} = \sum \vec{e}_i, \vec{S} = \sum \vec{s}_i$ такая схема
 постро ат термов (приближт LS связей) реал.
 не всегда.

Сравним в-ки электр-ного и спин-орб вз-я:
 электрост: $E_{ee} \sim Z^2 Ry$
 эмер. спин-орб: $E_{ls} \sim Z^4 \alpha^2 Ry$. $\Rightarrow Z \gg Z^* \sim Z^{-2/3} \approx 27$.
 $E_{ls} > E_{ee}$.

При $E_{ls} \gg E_{ee}$ пренебрегаем E_{ee} . Тогда сост
 эл-мов хар-се кв. числами j, m_j Вслучае, если
 зад. знан. кв. чисел j , то говоред, что атомный
 терм задан в приближтении jj -связи.
 Этот терм обозн. $\{j_1 \dots j_n\}$.

$\bar{U} = \sum_i \bar{U}_i$ Сост. в прикип ij -связи обозн: $\{j_1, \dots, j_n\}$ у. 62

В приближении LS -связи цепочки

"электр. конф-терм. -сост" отражает
"иерархию **взаимн в многоэп. атоме**"

" $vz-e$ электр сядром - электр. $vz-e$ электр -
спин-орб $vz-e$ "

При ij -связи: " $vz-e$ эл. сядром - спин-орб $vz-e$ -
электрост - $vz-e$ "

Билет 7

- 1) Гамильтониан, опред энер спектра как зад на СЗоперГ. Дискретн непрерыв спектр.

Гамильтониан- оператор полной энергии частицы $\hat{H} = \hat{K} + \hat{U} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U$

Рассмотрим зад на СЗиСФ оператор Гамильтониан.

$$\hat{H} \psi = E \psi \text{ или } -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + U(\vec{r}) \psi = E \psi$$

В з-ти от конкретного вида потенциала, вход в гамильтониан, спектр м.б дискретен или непрерывен

нестанд. ур-е: $i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H} \psi$

Пусть в нач. мом. в р сист. находим в нем. сост $\psi(\vec{r})$

$$\psi(\vec{r}, t) = \sum_n C_n \psi_n(\vec{r}) T_n(t) \quad \left. \begin{array}{l} \text{Наход} \\ \text{в нем. сост } \psi(\vec{r}) \end{array} \right\} \sum_n C_n (i\hbar \frac{\partial T_n}{\partial t} \psi_n - \hat{H} \psi_n T_n) = 0$$

ψ_n - собств. сост.

оператора Гамильтона с СЗ $E_n \Rightarrow$

$$\Rightarrow \sum_n C_n (i\hbar \frac{\partial T_n}{\partial t} - E_n T_n) \psi_n(\vec{r}) = 0.$$

$$T_n(t) = T_n(t=0) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_n t\right)$$

C_n опред. по волнов. фр-ии нач. состоянию.

$$\text{Для } t=0 \quad \psi(\vec{r}) = \sum_n C_n \psi_n(\vec{r})$$

$$C_n = \int \psi_n^*(\vec{r}) \psi(\vec{r}) d^3 r$$

$$T_n(t=0) = 1.$$

Реш. нестандарт. ур-е: СЛУ $\psi(\vec{r}, t=0) = \psi(\vec{r})$

$$\psi(\vec{r}, t) = \sum_n C_n \psi_n(\vec{r}) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_n t\right)$$

Бишет 7

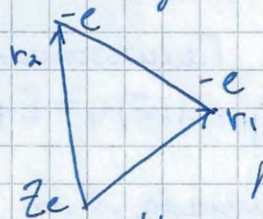
(2) Атом гелия. Сил. волн ф-ии отн-но перест-ки электронов. Сими и трих сост.

Атом гелия: Запишем гамильтониан: $\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2 + \hat{H}_{12}$ (1)

где $H_1 = \hat{T}_1 + \hat{V}_1 = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_1^2 - \frac{Ze^2}{r_1}$; $H_2 = \hat{T}_2 + \hat{V}_2 = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_2^2 - \frac{Ze^2}{r_2}$ -

гамильт, учит вз-е между из эл-нов с ядром.

$$\hat{V}_{12} = \frac{e^2}{r_{12}} \text{ метэл-е вз-е.}$$



Задача: Найти (З и СФ) гамильт (1), т.е. решить $\hat{H} \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = E \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$

• Исп. теорию возмущ. \hat{V}_{12} - возмущение.

• Рассч. на хорошем ~~уровне~~ совпаше с эксп. данными будет трудно.

В нулевом приоб. ур-е Шред. для невозм. гамильт.

$$[\hat{H}_1(\vec{r}_1) + \hat{H}_2(\vec{r}_2)] \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = E^{(0)} \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \text{ - нулев приоблнн}$$

волн ф-е: $\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \psi_1(\vec{r}_1) \psi_2(\vec{r}_2)$:

$$H_i \psi_i(\vec{r}_i) = E_i \psi_i(\vec{r}_i).$$

Осн. сост. в нулевом приоб. $E^{(0)} = -2Z^2 Ry$.

Для сист. тогда частиц волн ф-е в.б. сим. или антисим. отн-но перестановки их местами.

$$\psi_{S(A)}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_1(\vec{r}_1) \psi_2(\vec{r}_2) \pm \psi_1(\vec{r}_2) \psi_2(\vec{r}_1)).$$

Полн. волн ф-е сист есть произв: крост. и сим волн ф-и $\psi(\epsilon_1, \epsilon_2) = \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \chi(\sigma_1, \sigma_2)$
сим. волн ф-е

Антисимметрия: полн ф-е.

$$\psi(\epsilon_1, \epsilon_2) = \psi_S(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \chi_A(\sigma_1, \sigma_2)$$

$$\psi(\epsilon_1, \epsilon_2) = \psi_A(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \chi_S(\sigma_1, \sigma_2)$$

спин волн φ -и из двух эл-нов:

$$|\uparrow\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_2; |\uparrow\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_2 \quad |\downarrow\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_2$$

I и IV - симм. отн-но перест эл-нов местами.

$$\text{II, III} : \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle \pm |\downarrow\uparrow\rangle) \begin{array}{l} + \text{ симметр} \\ - \text{ антисимм.} \end{array}$$

4 спин сост двух эл-нов

3-опис симметр. и одно антисимметр

набор сост с $M_s = 0; \pm 1$. - триплет сост е полным спином $S=1$.

• антисим. сост $S=0 (M_s=0)$ - синглет.

$$\chi_s(\sigma_1, \sigma_2) = |\uparrow\uparrow\rangle, S=1, M_s=1 \quad \text{- проеи. сумм. спина}$$

$$\chi_s(\sigma_1, \sigma_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle), S=1, M_s=0$$

$$\chi_s(\sigma_1, \sigma_2) = |\downarrow\downarrow\rangle, S=1, M_s=-1$$

$$\chi_s(\sigma_1, \sigma_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle), S=0, M_s=0$$

$2S+1$ - мультиплетность.

волн φ -е доптва строить в виде:

$$\Psi(E_1, E_2) = \Psi_s(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \chi_A(\sigma_1, \sigma_2) - \text{синглетное сост } S=0$$

$$\Psi(E_1, E_2) = \Psi_A(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \chi_s(\sigma_1, \sigma_2) - \text{триплетное сост } S=1$$

Ост. сост атома гелия:

Пусть оба эл-на в наимизшем энер. сост $n_1=n_2=1$
 $l_1=l_2=0$

\Rightarrow зад эл. коорит $1s^2$

$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \Psi_{1s}(\vec{r}_1) \Psi_{2s}(\vec{r}_2)$ - возм-но построить только симм. отн-но перест-ки местами эл-нов волн φ -ю.

\Rightarrow спиновая антисимм $\Rightarrow S=0$

триплетное сост. невозможно.

Бшмет 8.

① Ур-е Шредингера. Своб. движт частицы.

Плотность потока в-ти.

Частицу описываем с помощью некоторого волнового поля. Это поле связано с вероятностью обнаруж. микрообъекта в той или иной обл. пр-ва. Частице с имп. p соотв. волна: $\Psi(x,t) = \exp(\frac{i}{\hbar}(px - Et)) = \exp(i(kx - \omega t))$. Связь ω и k задана в виде: $E = \frac{p^2}{2m}$ или $\hbar\omega = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$. | дифференциал по x и t

$$\Rightarrow \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -i\omega \Psi, \quad \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = -k^2 \Psi \quad | \cdot i\hbar | \cdot -\frac{\hbar^2}{2m} \Rightarrow$$

$$\left. \begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} &= \hbar\omega \Psi \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} &= \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \Psi \end{aligned} \right\} \Rightarrow \boxed{i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2}} \quad \text{— Ур-е Шрединг.}$$

двигт частицы в свобод пр-ве

В 3D случае: $i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi$ — димен. необход. мал. уел. в некот. мал. ном.вр. $\Psi(\vec{r}, t=0) = \Psi_0(\vec{r})$.

Плотность потока в-ти — важное св-во волн. ф-ции. Запишем ур-е Шредингера.

$$(1) \quad i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi + V(\vec{r}, t) \Psi(\vec{r}, t) \quad | \cdot \Psi^*(\vec{r}, t) \Rightarrow$$

$$(2) \quad -i\hbar \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi^* + V(\vec{r}, t) \Psi^*(\vec{r}, t) \quad | \cdot \Psi(\vec{r}, t) \Rightarrow$$

$$\Rightarrow (1)(2) \Rightarrow$$

$$i\hbar \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} + \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \right) = -\frac{\hbar^2}{2m} (\Psi^* \nabla^2 \Psi - \Psi \nabla^2 \Psi^*)$$

$$\text{или} \quad \frac{\partial |\Psi(\vec{r}, t)|^2}{\partial t} = -\frac{\hbar}{2m} \nabla \cdot (\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*) \quad (3)$$

вспомним, что $|\Psi(\vec{r}, t)|^2 = \rho(\vec{r}, t)$ — плотность вероятности.

перепишем (3) в виде $\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div } \vec{j} = 0$ — ур-е непрерывности

$\vec{j} = \frac{\hbar}{2m} (\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*)$ — вектор плотности тока вероятности.

Свободное движение частицы

Определим этап. соест. своб. частицы

Гамильтониан канонической сист. имеет вид:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2}, \text{ а с.у.ш. : } -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi_E}{dx^2} = E \psi_E.$$

E - Собст. опер. Гамильтона. Введем $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} > 0 \Rightarrow$.

$$\psi_E'' + k^2 \psi_E = 0 \Rightarrow$$

$$\text{ЗС } E: \psi_E = \begin{cases} \exp(ikx) \\ \exp(-ikx) \end{cases} \quad E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

Т.к. на знач. волн вектора k никаких ограничений не возмещено, т.е. сист. имеет непр. спектр.

Состояние явл. одноврем. собст. соест. оператора шимп. соотв. собств. знач. $p = \pm \hbar k$. Т.к. оператор шимп. и опер. шимп. энергии коммутируют м/ду собой, то можно найти соест. в кот. обе физ. в-ны имеют точно опред. значения.

Суц. 2. разных состоян. соотв. одному знач. энергии - вырожденные. Вырожден. в сист. дает построить неогр. число соест. с одним и тем же знач. энергии. $\forall k$ базис ф-ии.

$\psi_E = A \exp(ikx) + B \exp(-ikx)$ дает соест. с тем же E .

если $A = B = 0 \Rightarrow p$ уже точно не опред.

$$\hat{p} \times \psi_p = p \psi_p.$$

$\psi_p = \exp\left(\frac{i}{\hbar} p x\right)$ - плоская волна де-Бройля.
(непр. спектр).

Бишет 8

② Многоэл. атом. Запомн атом. сост электр. Атомов и подобол. Электр конфиг. Гла Хунда, Многоэл. атом рассматривают в приближении самосост. поле Хартри. Основная идея этого подхода: состояние каждого из электр. описывается волн. ф-ей $\Psi_i(\vec{r}_i)$; кот опред. из одночастич. ур-я Шредингера, описывающего движение i -го эл-на в самосост. потенциале, созд ядром, + всей совокуп. электронов. При этом суще-но, что самосост. потенциал сохр. центр симметрию, поэтому одна из возможных выделений чл.овой части одноэл. волн. ф-ии. и введ. квант. числа n, l, m, s , кроме того, спин. сост. \vec{s} хар-е квантовым числом m_s .

Двух эл. атом: пусть сост. \vec{e} опис. $\Psi_1(\vec{r}_1)$, второму $\Psi_2(\vec{r}_2)$
 \Rightarrow электрост. потенциал. $\varphi_1(\vec{r}) = \int \frac{\rho_1(\vec{r}_1)}{|\vec{r} - \vec{r}_1|} d^3 r_1$,

$\varphi_2(\vec{r}) = \int \frac{\rho_2(\vec{r}_2)}{|\vec{r} - \vec{r}_2|} d^3 r_2$, $\rho_i(\vec{r}_i) = e |\Psi_i(\vec{r}_i)|^2$ - плот. зар, созд. в пр-ве катодом из \vec{e} . \Rightarrow самосост. пот, в кот. движ. катоды из электронов имеет вид:

$$V_1^{eff}(\vec{r}_1) = -\frac{Ze^2}{r_1} + e\varphi_2(\vec{r}_1) \quad V_2^{eff}(\vec{r}_2) = -\frac{Ze^2}{r_2} + e\varphi_1(\vec{r}_2).$$

Полн. волн. ф-е двух эл.: $\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \Psi_1(\vec{r}_1)\Psi_2(\vec{r}_2)$
не явл. ни сим, ни антисим. Отн-но перестановки электронов.

Атом. оболочки и подоболочки. Электронная конфигурац.

Атомной оболочкой (слоем) - совокупность \vec{e} с одним значением главного квант. числа. Оболочка, соотв. $n=1, 2, \dots, k$ - оболочка. Атомной подоболочкой - совокупность \vec{e} в атоме с одним значением орбит. квант. числа. Число мест в подоболочке.

опред. набором квант. чисел m_s для зад. $l = 2(2l+1)$. Электроны, кот. макс. в подоболочке наз. эквивалентными. Распред. \vec{e} по оболочкам подоболочек - электронная конфигурац. Обозн. эл. конфиг.: запись. обозн. подоболочек, в кот. имеются

эл-ны, и справа вверху их по, -во: $1s^2 2s^2 2p^3$.

Заполн атоэлементов.

В многоэл. атомах энергии одноэл. еост сильно заб от знак орбит и шсла. Сост с глав ив шсло и и и мультим. знак орб. мом. „пробашив“ выизтае, что энергии одноэлеменьше чем энергии с-еост, соотв. ив шслу. и-и. Эта законом лемит в оскве правил заполи:

1) из двух н/обол. ите по энергии распола, где кот в-на н+l оказ меньшей

2) если две каших либо 2-х н/обол. знак сумм n+l совпад, то ите по энергии летит н/обол с меньшим знак n.

Т.о. под/обол $4s$ и $5s$ доитри зап раньше чем $3d$ и $4d$. На кагествь уровне спр-ть указ выше пороδια зап н/обол. подтв. период з-ном менделеева. Поемально захи св-ва элементв от вл е внешнх не полностью зап оболочек, то по изв хим. св-вам того или иного эл-та можно судить о его элемтр. строении. Энергии элемтр в $4s$ и $3d$ н/обол близки. Поэтому для ряда эл-тов происх „перепроит“ е из $4s$ в $3d$. Такие особен. распр е по близку расп. н/обол. можно предсказ только в рез-те кол-х и в атомех. расчетов. **Правила Хунда. Осн терм атомов.**

Для опр. осн терма исп правила Хунда:

- 1) ите по энергии летит тот терм, у кот мультиметность ах.
 - 2) при рав-ве мультим-ей двух и более термов min энергии обл. терм, стах знак сумм орбит мом. конфигураци
- Физ смтл: в сост. е стах знак $5d$ эл-ны локализов. дальше друг от друга \Rightarrow их энергии элемтрост. в атом. оказ min. \Rightarrow соотв. терм основным.

Для опр. осн вл. еост. в терме исп правила Ланде, соасно которому если атомная обол. заполнена мене чем наполовину, налим. энергию имеет сост. е min знак J (норм. мультимет). если же атом. н/обол. заполнена более чем наполовину, то налим. энергию имеет сост. с тах J (обратн мультимет).

Башет 9.

① Стационар. ур-е Шредингера

Уравн. опис-е во време и пр-ве
сост. частицы запис. чрез волн ф-то

← стационар
(не зав. отвр)

↘ нестационар
(зав. отвр)

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + V\psi = E\psi$$

+ ур-е ур.

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + V\psi$$

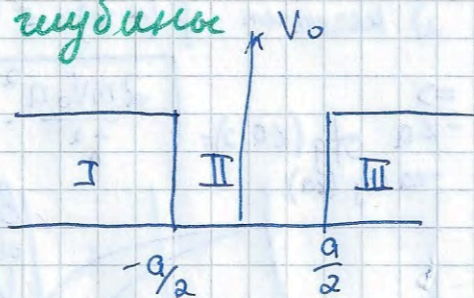
Св-ва: условия норм-ки чз интер. квадрата
волн ф-ции как вер-ть

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1.$$

Пример: яма конек глубины

потенциал задан:

$$V(x) = \begin{cases} 0, & |x| \leq a/2 \\ V_0, & |x| > a/2 \end{cases}$$



обл. I и III:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi}{dx^2} + V_0 \psi = E\psi$$

$$\text{обл. II} \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi}{dx^2} = E\psi$$

① рассм. случай $E < V_0$
что соотв. связывает
(ориентированно)

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

введем:

$$k^2 = \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}$$

$$\Rightarrow \text{в обл. I и III} \quad \psi'' - k^2 \psi = 0$$

$$\text{II} \quad \psi'' + k^2 \psi = 0$$

решение:

$$\text{I: } \psi_{\text{I}}(x) = A_{\text{I}} \exp(-kx) + B_{\text{I}} \exp(kx) \quad \text{II: } \psi_{\text{II}}(x) = A_{\text{II}} \sin(kx) + B_{\text{II}} \cos(kx)$$

$$\text{III: } \psi_{\text{III}}(x) = A_{\text{III}} \exp(-kx) + B_{\text{III}} \exp(kx)$$

т.к. волн ф-я должна удовл. усл. и квадрат. интегрируемости $\Rightarrow A_I = B_{III} = 0$

1) рассмотрим четные $\psi(x) = \psi(-x)$.

реш: $\psi_I(x) = B_I \exp(kx)$
 $\psi_{II}(x) = B_{II} \cos(kx)$
 $\psi_{III}(x) = A_{III} \exp(-kx)$ } $B_I = A_{III}$

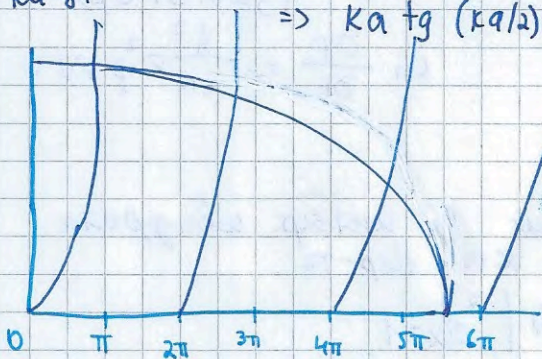
Смешиваем ф-ии в точке разрыва

$\psi_{II}(a/2) = \psi_{III}(a/2)$ $\psi_{III}' = \psi_{II}'$

| : одно и то же

$ka \operatorname{ctg}(ka/2)$

$\Rightarrow ka \operatorname{ctg}(ka/2) = \sqrt{\frac{2mV_0 a^2}{\hbar^2} - (ka)^2}$

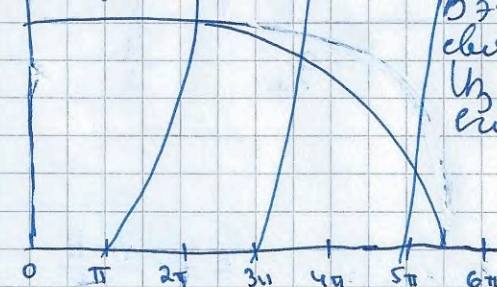


С увеличением радиуса орб (или длины волны) связь с ост. возрастает

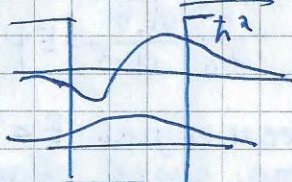
2) нечетные $\psi(x) = -\psi(-x) \Rightarrow \psi_I(x) = B_I \exp(kx)$

$\Rightarrow -ka \operatorname{ctg}(ka/2) = \sqrt{\frac{2mV_0 a^2}{\hbar^2} - (ka)^2}$ $\psi_{II}(x) = B_{II} \sin(kx)$
 $\psi_{III}(x) = A_{III} \exp(-kx) \Rightarrow$
 причем $B_I = -A_{III}$

$-ka \operatorname{ctg}(ka)$



В этом случае для достижения связи состояний может и не быть. Из графа видно, что усл. его возм. свл: $\frac{2mV_0 a^2}{\hbar^2} \geq \pi^2$.



II при $E > V_0$ соотв. инфинитн. двит. част. реш. \int где V знак энергии и соотн. непрерыв. спектру (2 сост. хар-ие прост. четностью)

• Если двит. част. охватит некотор. простр. область и с ней возник диспер. энер. спектр, если двит. инфинитно, то энергет. спектр сплошной

Билет 9

② Спин-орбит вз-е. Тонкая стр-ра атома водорода. Форм-ла Дирака.

Найдем у электрона в атоме пошнее орбит и связь мех и св-з. с шим магн мом водетк пошви **спин-орбит вз-я.**

Представим его как вз-е двух магн. моментов (орбит и спин).

$$E_{es} \sim \frac{\mu_B \mu_S}{r^3} \quad \left(\text{взаоде м/ду шим } r \sim a_0, \text{ а в } \mu_S \text{ найдем предст } r \gg a_0 \right)$$

Оценим в-ту энергии, полагаю, что $\mu_S \approx \mu_B \hat{=} \mu_B = \frac{e\hbar}{2mc}$

$$E_{es} = \frac{\mu_B^2}{a_0^3} \approx \frac{1}{2} \lambda^2 R_y, \quad \lambda = \frac{c}{\nu} \text{ - пост. } r \approx a_0 \Rightarrow$$

тонкой структуры

Энергия спин-орб. вз-е на 4 порядка меньше, чем энергия электр. вз-е электрона с ядром. Скорость электрона на первой боровской орбите.

$v/c = \lambda \Rightarrow$ уст связи шим энергии и импульса

$$T = \sqrt{p^2 c^2 + m^2 c^4} - mc^2 \text{ - разном}$$

вырат в ред по малым пар-ру $p/mc \Rightarrow$

$$T = mc^2 \left(\sqrt{1 + \left(\frac{p}{mc}\right)^2} - 1 \right) = mc^2 \left(1 + \frac{1}{2} \left(\frac{p}{mc}\right)^2 - \frac{1}{8} \left(\frac{p}{mc}\right)^4 + \dots - 1 \right) =$$

$$T_0 \approx R_y; \quad \delta T = \frac{R_y}{2mc^2} \approx \lambda^2 R_y. \quad \approx \frac{p^2}{2m} - \left(\frac{p^2/2m}{2mc^2} \right)^2$$

\Rightarrow обе поправки релативистские. Учитываем: $\mu_0 = T_0 - \frac{Ze^2}{r}$

1) релативист. связь шим и энергией: $-\frac{\hbar^2 \Delta^2}{2mc^2}$

Тогда поправка к полост. эмер. ур-еи

$$\Delta E_T = \langle n\ell | \delta \hat{T} | n\ell \rangle = -\frac{1}{2mc^2} \langle n\ell | \left(\mu_0 + \frac{Ze^2}{r} \right)^2 | n\ell \rangle$$

$$\Rightarrow \Delta E_T = \frac{1}{2mc^2} (E_n^2 + 2E_n \langle Ze^2/r \rangle + \langle Z^2 e^4 / r^2 \rangle), \quad n\ell - CO \Rightarrow$$

здесь $E_n = -Z^2 R_y$ - ур-ни энергии $E_n - C3$

\hbar^2 невозм. гамильтонова

$$\left\langle \frac{1}{r} \right\rangle = \frac{Z}{n^2 a_0} \quad \left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle = \frac{Z^2}{n^3 a_0^2 (l+1/2)}$$

$$\Delta E_T = \frac{\lambda^2 Z^2}{h} E_n \left(\frac{1}{l+1/2} - \frac{3}{4n} \right), \quad \text{считает шим выр-та по в, все ур-ни шим выр-та, с большими шим меньше шим, чем ур-ни с малыми.}$$

2) Спин-орбит вз-е. (приводит к появлению расщепления)
 Представим: вз-ют собст. мом. мом. \vec{L} и \vec{S} по \vec{H} ,

$$\vec{H} = \frac{1}{c} [\vec{E}, \vec{v}] \quad \vec{E} = \frac{ze}{r^3} \vec{r} \rightarrow \text{эл. маг. поле возн. в собст. сист. отср.}$$
 возн. в собст. сист. отср. \vec{v} созо. \vec{L} и \vec{S} .

Вопрос где энергия спин-орб. вз-е $V_{es} = -(\vec{\mu}_S \vec{H})$;

$$\vec{\mu}_S = -\frac{e}{m_S} \vec{S}$$
 - собст. м. мом. эл. на.

$$V_{es} = 2\mu_B \frac{ze}{cr^3} ([\vec{r}, \vec{v}] \vec{S}), \quad e = [\vec{r}, m\vec{v}]$$

$$\vec{V}_{es} = 4\mu_B \frac{ze}{r^3} (\vec{e}, \vec{S}) \quad \vec{V}_{es} = 2\mu_B^2 \frac{ze}{r^3} (\vec{e}, \vec{S})$$

$$\vec{V}_{es} = 2\mu_B^2 \frac{ze}{r^3} \left(\frac{\vec{J}^2 - \vec{L}^2 - \vec{S}^2}{2} \right) \quad \text{поправка Томаса-Дирака}$$

Для невозм. - базис ф-ции $|n, l, m_l, m_s\rangle \rightarrow |n, l, j, m_j\rangle$
 \hat{H} не коммутирует с \hat{L}_z и $\hat{S}_z \Rightarrow$ в станд. сист. \vec{L} и \vec{S}
 но коммутирует с \vec{J}^2 и \vec{J}_z только не определ.

Учитывая, что: $\hat{J}^2 |n, l, j, m_j\rangle = j(j+1) |n, l, j, m_j\rangle$

$$\hat{L}^2 |n, l, j, m_j\rangle = l(l+1) |n, l, j, m_j\rangle$$

$$\hat{S}^2 |n, l, j, m_j\rangle = s(s+1) |n, l, j, m_j\rangle$$

Занеим впр. где погр-ны ч \Rightarrow энергии сост.

$$\Delta E_{es} = \frac{ze\mu_B^2}{r^3} \left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle (j(j+1) - l(l+1) - s(s+1))$$

$$\left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle = \frac{1}{n^3 a_0^3} \frac{1}{e(l+1)(l+1/2)} \quad (j = l \pm 1/2) \Rightarrow$$

$$\Delta E_{el} = \Delta E_{el} + \Delta E_{es} = \frac{-\lambda^2 z^4 R_y}{n^2} \left(\frac{1}{j+1/2} - \frac{3}{4n} \right) -$$

Ф-ла Дирака

S P d

$$\text{--- } 3s_{1/2} \text{ --- } \text{--- } 3p_{3/2} \text{ --- } \text{--- } 3d_{3/2, 5/2}$$

$$\text{--- } 2s_{1/2} \text{ --- } \text{--- } 2p_{3/2} \text{ --- } \text{--- } 2p_{1/2}$$

$$V_{es} \sim (\vec{e}, \vec{S}) \quad \uparrow \uparrow \text{ " + "}$$

$\uparrow \downarrow \text{ " - "}$

вопротг. спини частико.
 $2s_{1/2}, 2p_{1/2}$ - по-претнелу
 вопротг.

$$\Delta E = \Delta E_{el}(j=l+1/2) - \Delta E_{el}(j=l-1/2) = \frac{\lambda^2 z^4 R_y}{n^3 l(l+1)}$$

в ат. водорода $\Delta E = 4.5 \cdot 10^{-5} \text{ эВ}$

Билет 10.

① Ур-е Шредингера. Гарм осцилятор.

Уровни энергии и волн. ф-ии этау состоящий
 Частицу описываем с помощью неопт. волнового
 поле Это поле связано с вероятностью
 обнаружения частицы в той или иной обл пр-ва
 част с амплитудой волн: $\psi(x,t) = \exp\left(\frac{i}{\hbar}(px - Et)\right) = \exp(i(kx - \omega t))$
 связь ω и k задана в виде $E = \frac{p^2}{2m}$ или $\hbar\omega = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ | дифференциалы
 $\Rightarrow \frac{\partial \psi}{\partial t} = -i\omega \psi; \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = -k^2 \psi$ | $\cdot i\hbar \cdot - \frac{\hbar^2}{2m} \Rightarrow$

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hbar\omega \psi$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \psi$$

$$\Rightarrow \boxed{i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}} \quad \text{ур-е Шред.}$$

где част в своб пр-ва

В 3D случ: $i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi$ - где реш необход.
 наугад выем на м.вр

Гармон осцилятор (задача об опред. этау. еост)

Пусть $V(x) = \frac{m\omega^2 x^2}{2}$, \Rightarrow тогда $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{m\omega^2 x^2}{2}$

Наша зад: опр 3Ф и СЗ оператора \hat{H} .

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi}{dx^2} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} \psi = E \psi.$$

$$\left(\frac{d^2}{dx^2} - \frac{m^2 \omega^2 x^2}{\hbar^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \right) \psi(x) = 0. \quad \text{при } x \rightarrow \pm\infty; \psi \rightarrow 0$$

введе новые безр. коор. $\xi = \frac{x}{a}$ $E = \frac{E_0}{2}$; $a = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$; $E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}$
 переи в виде: $\left(\frac{d^2}{d\xi^2} - \xi^2 + \epsilon \right) \psi(\xi) = 0. \quad (*)$

посмотрим поведение при $\xi \rightarrow \pm\infty$.

$$\frac{d^2 \psi}{d\xi^2} - \xi^2 \psi(\xi) \approx 0 \Rightarrow \psi \sim \exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right); \quad |\xi| \gg 1.$$

будем искать реш (*) в виде:

$$\psi(\xi) = v(\xi) \exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right). \quad v(\xi) \text{ не меняет асимпт. на беси.}$$

$$\Rightarrow \frac{d^2 \psi}{d\xi^2} = \frac{d}{d\xi} (v' - \xi v) \exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right) = (v'' - v + 2\xi v' + \xi^2 v) \exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right)$$

$$V^n - 2\xi V' + (\epsilon + 1) = 0$$

реш $V(\xi) = \sum_{k=0}^n a_k \xi^k \ll$ где сопр. асимпт. повед. на ∞

$$\Rightarrow \sum_{k=0}^n ((k+2)(k+1)a_{k+2} + (\epsilon - 2k)a_k) \xi^k = 0 \quad \forall \xi \Rightarrow$$

рекур. соотнош. $a_{k+2} = \frac{2k - (\epsilon - 1)}{(k+2)(k+1)} a_k$ (т.е. если a_0 и a_1 , то другие найдем)

ред конечен, если на нек. шаг $s \leq n$ коэф. $a_n = 0$, это возможно, если $\epsilon = 2n + 1$. (одновременно ψ и ψ' не вых.)

переходе к разн. един. $E_n = \hbar\omega(n + 1/2)$, $n = 0, 1, 2, \dots$
 $a_0 \rightarrow a_2 \rightarrow a_4 \rightarrow \dots$ - эвр. спектр гарм. осц.
 $a_1 = a_3 = \dots = 0$.

$a_1 \rightarrow a_3 \rightarrow a_5 \rightarrow \dots$, $a_0 = a_2 = \dots = 0$.

$\{ E_n = \hbar\omega(n + 1/2) \}_{n=0,1,2,\dots}$ - a_0, a_1 - изв. кор-ши.

$$\left\{ \begin{aligned} \Psi(\xi) &= V(\xi) \exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right) \end{aligned} \right.$$

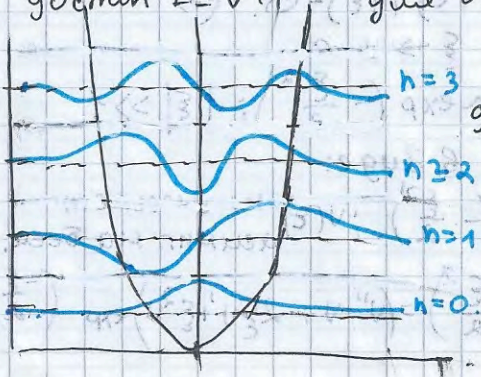
Полностью коэф. пот. удовл. рекур. соотнош. - полин Эрмита
 $H_0(\xi) = 1$, $H_1(\xi) = 2\xi$, либо чет либо неч.

станд. состояние хар-се четностью $[\hat{H}, \hat{P}] = 0$
 св-ва рещ: (нормир.)

1. Спектр дискретен: суммиров. колебание и их энергии
 частота локализ. в области $E_0 = \hbar\omega/2$

размером $\Delta x \Rightarrow$ коэф. мин. энергии $T \sim \hbar^2/2m(\Delta x)^2$

в-на пот. энергии $V \sim \hbar\omega^2(\Delta x^2)/2$ мин. полной энергии
 достиг $E = V + T$ где опр. простр. ширин $\Delta x = \sqrt{\hbar/m\omega}$.
 $E_{\min} = \hbar\omega$



На рис. приведен полн. зн. ур-ий для этих сост. предст. распр. плотности в-ти $|\Psi(x)|^2$. Важной особенностью явл. эквидистант-ность $E_n - E_{n-1} = \hbar\omega$.
 т.к. энергетич. расстояние ψ / ду ψ парой уровней одинаково

Билет 10.

② Характер рентгеновского излуч. Закон Мозли, Закон Опе.

Переход, связ с изл. составл. атомных эл-нов. В этом сл. возникает рентг. изл. Рентгеновские спектры разл. элементов похожи друг на друга. Это связано с тем, что изл. кол-ва \bar{e} во внеш. оболочке / слаба на энергия спектра сист. Для опис. энергии спектра внутр. атомных \bar{e} исп. приближ. эфф. заряда: $E_{ne} = -\frac{Ry}{n^2} Z_{eff}^2 = -\frac{Ry}{n^2} (Z - \sigma_{ne})^2$.

При переходе к оболочкам, с σ_{ne} ^{ув. шила} ^{ув. шила} большими знач. ш. иван. числа (L, M-оболочки) ↑ пост. экранир.

величина пост. экранирования возрастает за счет увел. числа внутр. электронов, ~~т.е.~~ при этом тем сильнее, чем больше знач. орбит. момента рассл. электрона. Нам важно, чтобы было выполн. $\sigma_{ne} < Z$. Пусть на K-оболочке был удал. электрон. Тогда возможны перех. на K с более выс. ~~у~~ атом. обол. K-серии рентг. изл. Вообще выр. для частот ивантов. хар-го изл.

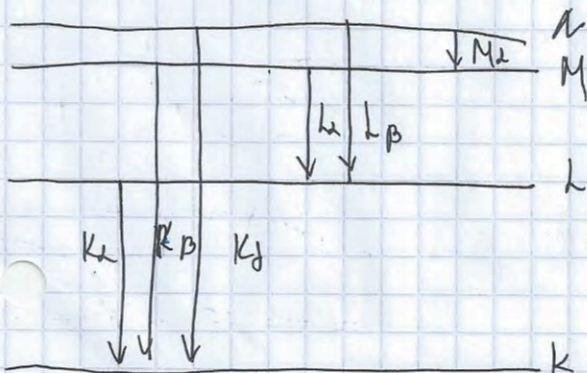
$$\hbar \omega = Ry \left(\frac{(Z - \sigma_1)^2}{n_1^2} - \frac{(Z - \sigma_2)^2}{n_2^2} \right)$$

Энергия рентгеновского иванта K α -линии есть

$$\hbar \omega_{K\alpha} = \frac{3}{4} Ry \cdot (Z - \sigma_K)^2$$

Для L α рентгеновского излуч:

$$\hbar \omega_{L\alpha} = \frac{5}{36} Ry \cdot (Z - \sigma_L)^2$$



Закон Мозли: $h\nu = R_y(z-\sigma)^2 \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right)$

перепишем

$\sqrt{\omega} \sim (z-\sigma)$, т.е. корень из частоты

излуч. явл.ли ср-ей

заряда атом. ядра

Эта зависимость Мозли

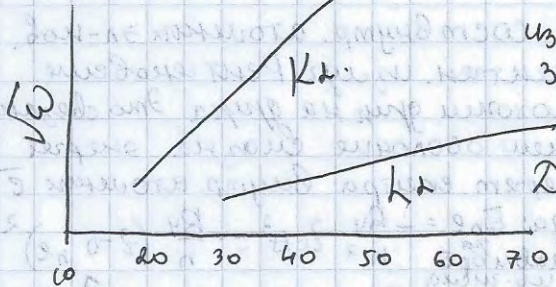
при анализе экс. данных

Диамр. Мозли - зависит

частот волновых линий

рентген серии от поряд.

номера элем в таблице



Эффект Шелл

Энергия и.б. передана одному или нескольк. электронам, нах. на выш. вет. атом. оболочках

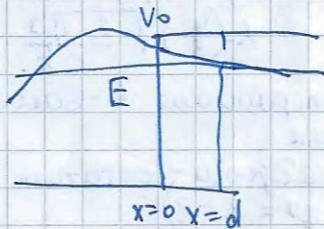
В рез-те этот электрон покидает атом, унося с собой энергию, кот. могла бы быть излучена

при эл/м переходе. - Эффект Шелл. Сами е, кот. испускаются "н+" заряд ионами с вакансией на одной из внутр. атом. оболочек - Шелл-электроны

При этом одноор. заряд электрон стал двузарядно заряд.

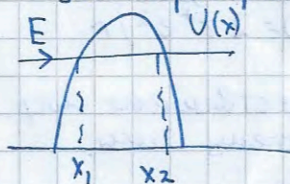
Билет 11

- ① Туннельный эффект. Распад. Автоэмиссия
Туннельный эфф - возможность туннелир. частиц через область масс. запрец. эвнт. В области масс. эвнт. запрец. эвнт. волков. ср-е, опис состоян. частицы, отлжна от нуля, $\psi(x) \neq 0$, $\psi(x) \sim \exp(-kx)$, x - удаал. частицы от масс. точки поворота. $k = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}}$



Вер-ть обнаруж. частицы в обл-ти масс. запрец. эвнт. на глубине d .
 $D \sim |\psi(x=d)|^2 \exp(-2kd) = \exp\left(-\frac{2}{\hbar} \sqrt{2m(V_0 - E)} d\right)$ - туннелир. процесс

→ для барьера произв. ф-ции:



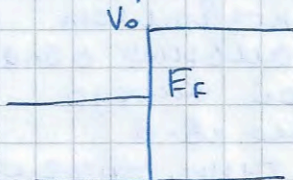
$D \sim \exp\left(-\frac{2}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m(V(x) - E)} dx\right)$,
 где интеграл по обл. масс. запрец. эвнт.

Вероятность зависит экспоненциал. от ширины потенц. барьера и его высоты.

Вероятность туннелир. убывает с ростом масс. частицы.

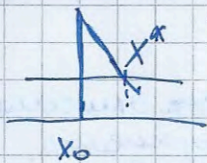
Автоэм. эмиссия - эвл. испускание эл-нов проводящими телами под действ. внеш. эл. поля дост. большой напрят. Автоэм. эмиссия не связана с нагревом, повер-ти и кат. холодной или полевой эмиссией.

Метал. проводник где нах. внеш. своб. электронов предств. потенц. яму глубины V_0 .



э в яме занимают разл. энерг. сост. ψ , при $T=0$ все сост. с энергией $>$ энергии Ферми эвл. свободными, а итает - занятыми.

Про потенц. металла во внеш. электрост. поле с напрят. E на пути электронов с пов-ти металла возн. барьер кон. ширины $V(x) = V_0 - eEx$



Здесь $x=0$ - на границе металл-вакуум, а энергия отн от уровня Ферми.

Туннельная прозрачность:

$$D \sim \exp\left(-\frac{2}{\hbar} \int_0^{x^*} \sqrt{2m(V_0 - E_F - eEx)} dx\right)$$

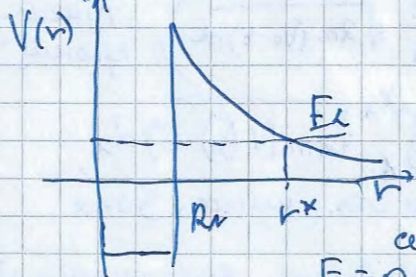
классическая пов. опред. из $V_0 - E_F - eEx^*$.

$$D \sim \exp\left(-\frac{4}{3} \sqrt{2mAe^3} / e\hbar E\right)$$

Будем считать, что плотность токов $\sim D$. $\int \sim \exp\left(-\frac{1}{E}\right)$;
 λ -распад ат. яд. $\lambda = \left(\frac{4}{3}\right) \sqrt{\frac{2mAe^3}{e\hbar}}$.

λ -распад - наименее проп. вид излуч. исп. радиат. в-ва ядра.
 -заст. 2-го по числу атомов ядра.

Вид потенциала в-е α -частицы с ядром - остаток ($z' = z - 2$).



R_n - размер атом ядра.

Этот потенциал опр. кулонов отталки: $V(r > R_n) = 2z'e^2/r$.

при ($r < R_n$) - существенные ядер. силы \rightarrow возм. потону ядра.

$E = 0$ - неподт. α -заст.

$E_\alpha > 0$ - потону барьер конез. глубины.

В-ть туннели через этот барьер $D \sim \exp\left(\frac{2}{\hbar} \int_{R_n}^{r^*} \sqrt{2M\left(\frac{2z'e^2}{r} - E_\alpha\right)} dr\right)$
 E_α или M - энергия и масса вылетающей.

Верхн. пред. интегр. из уса $r^* = 2z'e^2/E_\alpha$

если $R_n < r^* \Rightarrow D \sim \exp\left(-\frac{4\pi z'e^2}{\hbar v_\alpha}\right)$, $v_\alpha = \sqrt{2E_\alpha}$ - скор. M_α в вылет. заст.

Время жизни $\tau \sim 1/D \Rightarrow$ разное возрастание
 время жизни ядра отн-но распада с увелич. заряда,
 и набор, \downarrow на порядок в-ми времени жизни
 даже при небольшом увелич. E_α .

Туннельный микроскоп - позволяет
 регистрировать на пов-ти локальные области
 с пожит или пов-ми работой выхода

Это прибор, предназ. для изучения св-в
 эл. провод. пов-тей, в основе тунн. эффект.

Билет 11

② Атом в магнитном поле. Спин-орб. поле. Полн. маг. мом атома. Мн-ль Ланде. Эф. Зеймана и Паунга-Баха.

Электростат. вз-е атом. электр. вл. существенно превышает энергию спин-орб. вз-е в атоме. Можно исп. приближ. связи. Атомный терм-свойств. состояний стокно опр. знам сумм орбит. и спин. мом. электр. оболочки атома. Спин-орб. вз-е:

$$V_{hs} = A (\hat{L} \hat{S}) \Rightarrow \text{появл. тонкой стр-ры (антисимпл.)}$$

Энергия тонкого ~~стр~~ расщ. опр. $A \sim \lambda^2 R_y$. колеб. волны магн. поле сна H , атом. число доп. энерг. $\sim \mu_B H$.

Критич. напрят. м.п. $\mu_B H^* = V_{hs} \sim \lambda^2 R_y \Rightarrow$

$$\mu_B H^* = \frac{\lambda^2 R_y}{\mu_B} \quad \text{это выр. можно переписать } H^* = \mu_B / a_0^3$$

т.к. $\mu_B \sim e \hbar / 2 m c a_0 \Rightarrow H^* = \chi E_{at} \quad (E_{at} = \frac{e}{a_0^2} \text{ - атом. напрят. электр. поля})$

случай сильного поля: $\hat{V}_M \gg \hat{V}_{hs}, \quad |L M_L S M_S\rangle$

$$\text{Энергия вз-е } V_M = -(\vec{\mu} \vec{H}) = -(\vec{\mu}_L + \vec{\mu}_S \vec{H}),$$

здесь $\vec{\mu}_L = -\mu_B \vec{L}, \quad \vec{\mu}_S = -2\mu_B \vec{S}$ - магн. мом, связ. с орб. и спин. мех.

Выраж. для оператора вз-е атома с магн. полем: $\hat{V}_M = \mu_B H (\hat{L}_z + 2\hat{S}_z)$

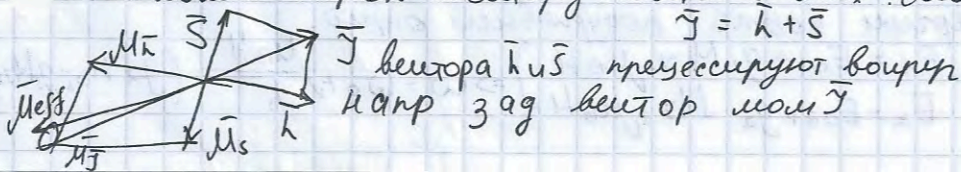
\Rightarrow попр. энергии термина $\Delta E = \mu_B H (M_L + 2M_S)$.

случай слабого поля:

В этом сл. энергия вз-е с внеш. магн. полем существенно меньше энергии спин-орб. вз-е.

Сущест-й особенностью явл. то, что все-е разн. знам. чл. магн. отношений для орбит. и спин. вращений вектор суммарного магнитного момента атома: $\vec{\mu}_J = \vec{\mu}_L + \vec{\mu}_S$

не коллинеарен вектору полного мех. мом. $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$



$\bar{\mu}_z$ и $\bar{\mu}_s$ прецессируют вокруг $\bar{J} \Rightarrow \bar{\mu}_z$ прецессирует вокруг \bar{J} .

Частота прецессии $\Omega = \frac{V_{hs}}{\hbar} \sim \frac{\lambda^2 R_y}{\hbar} \sim \lambda^2 \omega_{at}$ (радиоч. диапазон)

Это значит, что при воздействии атома слабым полем с ними взят усредненный по времени атомный маг. мом $\bar{\mu}_{eff} = -g \mu_B \bar{J}$

или g - атом g -фактор (Ландэ)

$$g = \frac{1}{\mu_B} \frac{(\bar{\mu}_{eff} \bar{J})}{\bar{J}^2} = \frac{1}{\mu_B} \frac{(\bar{\mu}_z \bar{J})}{\bar{J}^2}, \text{ выполнимая,}$$

что

$$\bar{\mu}_z = \bar{\mu}_L + \bar{\mu}_S = -\mu_B (\bar{L} + 2\bar{S}) = -\mu_B (\bar{J} + \bar{S}) \Rightarrow$$

$$g = \frac{(\bar{J} + \bar{S}, \bar{J})}{\bar{J}^2} = 1 + \frac{(\bar{S}, \bar{J})}{\bar{J}^2}$$

$$g = 1 + \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)}, \text{ в слабом маг. поле}$$

сост $2S+1$, расщепл.

по энергии на $2J+1$.

$g=0$ $\bar{\mu}_{eff}=0$ распол. взаимно \perp .

$g=1$ ($S=0$) $J=L$ - симметрич. сост.

Эффект Зеймана: расщепление линий излучения атома во внеш. М.П. $\Omega = \frac{eH}{2mc}$ - норм. эфф. Зеймана



$\omega_0 - l$ ω_0 $\omega_0 + l$

Три вет. Лоренца

Теорема: (слабое поле)

симметрич. переход $L_1 S_1 J_1$ и $L_2 S_2 J_2$.

энергии ат. сост ($E_{01} < E_{02}$) тогда

частота ат. перехода в отсутствие МП есть $\omega_0 = \frac{E_{02} - E_{01}}{\hbar}$. При

наличии МП каждое из сост расщепл. на $2J_1+1$ и $2J_2+1$.

Энергии сост. подуровней опред.

$$\left. \begin{aligned} E_1 &= E_{01} + g_1 M_{J_1} \mu_B H \\ E_2 &= E_{02} + g_2 M_{J_2} \mu_B H \end{aligned} \right\} \Rightarrow \omega = \omega_0 + \frac{\mu_B H}{\hbar} (g_2 M_{J_2} - g_1 M_{J_1})$$

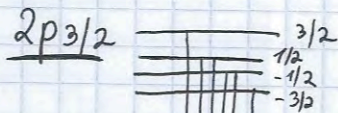
2

Бшмет 11 (прод)

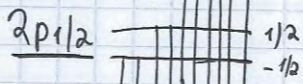
полное число компонент $(g_2 M_{J_2} - g_1 M_{J_1})$

правило отбора $\Delta M_y = M_{J_2} - M_{J_1} = 0; \pm 1$.

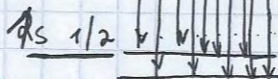
→ при $g_1 = g_2 = 1$ - норм эфф. (переход м/ду сдвинутыми
→ несоблюд. правил отбора для орбит и спин
двух $e^- \Rightarrow$ Яanomал. эфф.



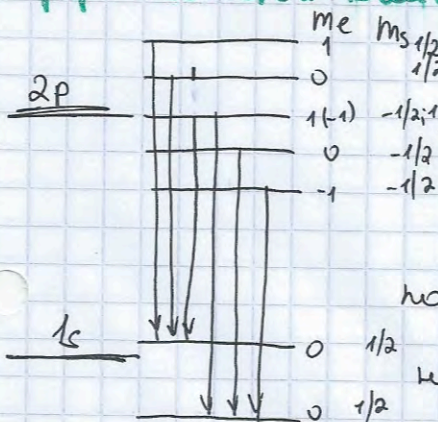
для линии водорода H_α



линии $2p_{1/2} \rightarrow 1s_{1/2}$
расщеплены на 4 компонента,
а линии $2p_{3/2} + 1s_{1/2}$ - на
6 компонент
Общ число комп $n = 10$.



Эфф. Памена-Баао



любая спектральная
линия расщ. на нормал.
триплет Лоренца, т.е. всегда
набл. норм эфф Зеймана -
Эфф. Пам-Баао

где частота перехода в снл.
магн. поле $\hbar\omega = \hbar\omega_0 + \mu_B H (\Delta M_l + 2\Delta M_s)$
по правил отбора: $\Delta M_l = 0; \pm 1; \Delta M_s = 0$
 $\Rightarrow \omega = \omega_0, \omega_0 \pm \Omega$, т.е.
норм. триплет Лоренца

эфф П-Б на H_α - линии атом водорода Посломлю
в-на томо расщеплен дублет $2p_{1/2}; 2p_{3/2}$
сост $\frac{d^2 R_y}{16}$, то эфф П-Б будет наблюд

$$H \gg H^{\alpha} = \frac{d^2 R_y}{16 \mu_B} = 70^4 \text{ Э.}$$

Билет 12

① Основн ив. мех теория возм. для стаз сост. **Примеры.**

Пусть имеем неогт ив. система описываем. гамиль \hat{H}_0 . Знаем рещ. зад на ϵ_3 и ϵ_0 .

$$\hat{H}_0 \psi_n = E_n \psi_n.$$

Пусть \exists другая сист. гамильтонов. зад: $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$

\hat{V} - оператор возмущен. Если \hat{V} мало, $\Rightarrow \epsilon_0$ гамильтон.

\hat{H} будут близки к рещ. зад. Найти в такой ситуац.

прибл. рещ. зад.

$$(\hat{H}_0 + \hat{V}) \tilde{\psi}_n = E_n \tilde{\psi}_n. \quad (1)$$

Ищем энергии стаз. сост. и соот в шиволн ф-ии.

$$E_n = E_n + \delta E_n, \quad \psi_n = \psi_n + \delta \psi_n.$$

(1) до 1-го порядка малости:

$$\hat{H}_0 \psi_n + \hat{H}_0 \delta \psi_n + \hat{V} \psi_n = E_n \psi_n + \delta E_n \psi_n + E_n \delta \psi_n.$$

умножим $|\cdot\rangle \psi_n^*$ и проинтегр. по всей обл.

$$\delta E_n = \int \psi_n^* \hat{V} \psi_n d\tau + \int \psi_n^* (\hat{H}_0 - E_n) \delta \psi_n d\tau$$

$$\{\psi_n\} - \text{полный базис. } \delta \psi_n = \sum_m c_m \psi_m. \quad \text{так } = 0.$$

тогда второе слагаемое преобр. и виду:

$$\int \psi_n^* (\hat{H}_0 - E_n) \delta \psi_n d\tau = \sum_m c_m \int \psi_n^* (E_m - E_n) \psi_m d\tau = 0.$$

для поправки к ур-ниям энергии получаем:

$$(2) \quad \delta E_n = \int \psi_n^* \hat{V} \psi_n d\tau \quad \text{, т.е. } \delta E_n \text{ энергия}$$

м.б. вычислена как среднее значение энергии возмущ.

$$\delta E_n = \langle \psi_n | \hat{V} | \psi_n \rangle \equiv \langle n | \hat{V} | n \rangle = V_{nn}.$$

Вычислим поправки к волн ф-ии стаз. сост $\delta \psi_n$.

умнож (1) на ψ_k^* ($k \neq n$) и интегр. \Rightarrow

$$\langle \psi_k | \hat{H}_0 | \delta \psi_n \rangle + V_{kn} = E_n \langle \psi_k | \delta \psi_n \rangle \quad (3)$$

Здесь $V_{kn} = \int \psi_k^* \hat{V} \psi_n d\tau$ - матрич. элемент-опер. возм. \hat{V}

$$\delta \psi_n = \sum_m c_m \psi_m \psi(\mathbf{z}) : c_k = \frac{V_{kn}}{(E_n - E_k)} \Rightarrow$$

поправка имеет вид $\delta \psi_n = \sum_{k \neq n} \frac{V_{kn}}{E_n - E_k} \psi_k \Rightarrow$

если волн ф-я стая сост

$$\psi_n = \psi_n + \sum_{k \neq n} \frac{V_{kn}}{E_n - E_k} \psi_k + \dots$$

\Rightarrow возмущ. возмешивает к n-ому стая. сост. гр. стая сост невозм гашлт.

Пример: \hat{H}_0 -гашт. чл. имеет энерг. электромагнит. возм. с ядром:

\hat{V} -отне спин-орбит. взаи-е в атоме.

Бишет 12 Перед. ест элем. №

(2) Многоэл. атом. Запомн атом. сост электр. Атомов и подобол. Электр конфиг. Гла Хунда,

Многоэл. атом рассматривают в приближении самосост. поле Хартри. Основная идея этого подхода: состояние каждого из электр. описывается волн. ф-ей $\psi_i(\vec{r}_i)$, кот. опред. из одночастич. ур-я Шредингера, описывающей движение i -го эл-на в самосост. потенциале, созд. ядром, + всей совокуп. электронов. При этом еще-но, что самосост. потенциал сохр. электр. симметрию, поэтому одна из возможных выделенных чл. волн. ф-ий ψ_i и введ. кв. числа n, l, m, s , кроме того, спин. сост. $\bar{\epsilon}$ хар-е квантовыми числами m_s .

Двух эл. атом: пусть сост. $\bar{\epsilon}$ опис. $\psi_1(\vec{r}_1)$, второму $\psi_2(\vec{r}_2)$
 \Rightarrow электрост. потенциал. $\varphi_1(\vec{r}) = \int \frac{\rho_1(\vec{r}_1)}{|\vec{r} - \vec{r}_1|} d^3 r_1$,

$\varphi_2(\vec{r}) = \int \frac{\rho_2(\vec{r}_2)}{|\vec{r} - \vec{r}_2|} d^3 r_2$, $\rho_i(\vec{r}_i) = e |\psi_i(\vec{r}_i)|^2$ - плот. зар, созд. в пр-ве катодом из $\bar{\epsilon}$. \Rightarrow самосост. пот, в кот. двит. катоды из электронов имеет вид:

$$V_1^{eff}(\vec{r}_1) = -\frac{Ze^2}{r_1} + e\varphi_2(\vec{r}_1) \quad V_2^{eff}(\vec{r}_2) = -\frac{Ze^2}{r_2} + e\varphi_1(\vec{r}_2).$$

Полн. волн. ф-е двух эл.: $\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \psi_1(\vec{r}_1)\psi_2(\vec{r}_2)$
не евл. ни сим., ни антисим. Отн-но перестановки электронов.

Атом. оболочки и подоболочки. Электронная конфигурация.

Атомной оболочкой (слоем) - совокупность $\bar{\epsilon}$ с одним значением главного кв. числа. Оболочка, соотв. $n=1, k$ - оболочка. Атомной подобол. - совокупность $\bar{\epsilon}$ в атоме с одним знач. глав. и орбит. кв. числа. Число мест в подобол.

опред. набором кв. чисел m_s для зад. $l = 2(2l+1)$. Электроны, кот. нах. в подобол. наз. живыми электронами. Распред. $\bar{\epsilon}$ по обол. подобол. - электронная конфиг. Обозн. эл. конфиг.: запис. обозн. подобол., в кот. имеются

эл-ны, ч справа вверху их по, во: $1s^2 2s^2 2p^3$.

Заполн атоэлектронами.

В многоэл. атомах энергии одноэл. еост сильно заб от знак орбит ил мсла. Сост с глав ил мсло и и мультим. знак орб. мсло, "пробашив" вынзта, что энергии одноэлеменьше чем энергии с-сост, соотв ил мсло. n-1. Эта законом лемит воскове правил заполн:

- 1) из двух н/обол. ките по энергии распота, дикот в-но n+l оказменьшей
 - 2) если две каших либо 2-х н/обол. знак сумми n+l совпад, то ките по энергии лемит н/обол. с меньшим знак n.
- Т.о. под/обол $4s$ и $5s$ долтий зап равным кит $3d$ и $4d$. На кагествь уровне спр-ть указ выше пороδια зап н/обол. подтв. период з-ном менделеева. Поемально захит св-ва элементв от вил \bar{e} внешних не полностью зап оболочек, то по изв хит св-вам то или инос эл-та можно судить о его элемтр. строении. Энергии элемтр в $4s$ и $3d$ н/обол близки. Поэтому для ряда эл-тов происх "перепри" \bar{e} из $4s$ в $3d$. Такие особен. распр \bar{e} по близко расп. н/обол. можно предмаз только в рез-те кол-х ил ватомех. расчетов. **Правила Хунда. Осн терм атомов.**

Для опр. осн терма исп **правила Хунда**:

- 1) ките по энергии лемит тот терм, у кот мультиметность стах.
 - 2) при рав-ве мультим-ей двух и более термов min энергией обл. терм, стах знак сумм. орбит мом. конфигураци.
- Физическ: в сост. е стах знак S и L эл-ны локализв. дальние груп от группа \Rightarrow их энергии элемтрост. в атом. оказ min. \Rightarrow **соответ. терм осн**

Для опр. осн вост. в терме исп **правила Ланде**, сомасно которому если атомная обол. заполнена менее кит $\frac{1}{2}$ (наполовину), то мин. энергию имеет сост. с тах J (норм. мультиметность). Если же атом. н/обол. заполнена более кит $\frac{1}{2}$ (наполовину), то мин. энергию имеет сост. с тах J (обрату мультиметность).

① Атомное водородо по Борю. Фокусоматт Борю.

Эксперим. доказательство дискретной структуры атомных уровней. Опыт Франка и Герца. Цур-монгеский спектр атомных уровней. Меркатомент, позитроний?

Основавася в рамках планетарной модели, Бор предположил, что среди бесконечного множества орбит, удовлетвор. классическим уравнением движения, разрешены только те, для которых выполнено условие квантования момента количества движения: проекция момента на ось, перпендикулярную к-ти орбиты, кратна пост. Планка:

$$L_z = n\hbar, n = 1, 2, 3, \dots$$

При этом, находясь на этих разрешенных орбитах, электроны не излучают вопреки законам классич. механики. Лучшее происходит при переходе с орбиты на орбиту, при этом теряется квант энергии $\hbar\omega$ - разность начального и конечного атомных состояний?

Уравн. движения для электронов, движ. по круговой орбите вокруг ядра с зарядом Z :

$$m \frac{v^2}{r} = \frac{Ze^2}{r^2}$$

При движении в центрально-симметрич. поле сокр. момент количества движения:

Для n - проекции: $L_z = mvr = \text{const}$

Полная энергия электронов на орбите:

$$E = \frac{mv^2}{2} - \frac{Ze^2}{r} = -\frac{mv^2}{2}$$

$$L_z = \frac{Ze^2}{v}$$

$$E = -\frac{mZ^2e^4}{2L_z^2}$$

Изменившиеся термические и угловые моменты количества движущихся при переходе с орбиты на орбиту:

$$\Delta E = \frac{m \hbar^2 e^4}{L_z^3} \Delta L_z$$

$$\Delta E = \hbar \omega = \hbar \frac{v}{r} = \hbar \frac{m \hbar^2 e^4}{L_z^3}$$

Получаем, что при вращении орбит в силу принципа соответствия: $\Delta L_z = \hbar$

Пусть это верно для любых орбит:

$L_z = n \hbar + \text{const}$ - предположим для орбит, по которым движ. электроны.

$$n \in \mathbb{Z}, n \neq 0.$$

$\text{const} = 0 \Rightarrow L_z = n \hbar$ - правило квантования момента

$$\alpha_n = \frac{\hbar^2}{m e^2} \frac{n^2}{\hbar} = a_0 \frac{n^2}{\hbar}$$

$$v_n = \frac{e^2}{\hbar} \frac{\hbar}{n}$$

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{m e^2} = 5,29 \cdot 10^{-9} \text{ см} - \text{боровский радиус}$$

(радиус атома водорода в основном состоянии ($n=1$))

Орбиты Франка и Герца

① Уравнение Шредингера. Волновая функция и ее св-ва. Плотность верт. Мерометровая волновая функция для дискретного и непрерывного спектра

Частицу следует описывать с помощью некотор. волнового поля, св-ва. с верт. обнаружения микро-объекта в той или иной области пространства.

Частица с мом. p соотв. волна

$$\psi(x, t) = \exp\left(\frac{i}{\hbar} (px - Et)\right) = \exp(i(kx - \omega t))$$

Дискретное соотнош. (связь ω и k):

$$E = \frac{p^2}{2m} \quad \text{или} \quad \hbar\omega = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = -i\omega \psi \quad ; \quad \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = -k^2 \psi$$

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hbar\omega \psi$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \psi$$

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \quad \text{— уравнение Шредингера}$$

Обобщение на трехмерный случай:

$$\psi(\vec{r}, t) = \exp\left(\frac{i}{\hbar} (\vec{p} \cdot \vec{r} - Et)\right) = \exp(i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t))$$

$$\hbar\omega = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)$$

⇒ Несм. уравн. Шредингера:

$$i\hbar \cdot \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} \right) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi$$

Обобщ. уравнение на случай движущейся частицы в потенц. поле $U(\vec{r})$:

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + U(\vec{r}, t) \psi(\vec{r}, t)}$$

нестационар.
уравнение
Шредингера,
описыв. движение час-
т. в произв. потенц.
поле

Решив. волнов. уравнение:

Сверх релятив. и
нелат. релятив.
частицы

$$E^2 = p^2 c^2 + m^2 c^4$$

Дискретное
соотношение $\omega(k)$
для волн др. времени

$$\omega^2 = k^2 c^2 + \frac{m^2 c^4}{\hbar^2}$$

Уравнение Клейна - Гордона:

$$\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} = \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} - \left(\frac{mc}{\hbar}\right)^2 \psi$$

Волновая ф-ция и ее ф-ция смол:

поле $\psi(\vec{r}, t)$ определяет вер-ть обнаружить частицу в
различных местах пр-ва в заданных моментах времени

$|\psi(\vec{r}, t)|^2$ - вероятность вер-ти обнаружить
частицу в месте с коорд. \vec{r} в мом. t .

$$\rho(\vec{r}, t) = |\psi(\vec{r}, t)|^2$$

Условие нормировки: | где-то в пр-ве частица
наверно E

$$\int_V |\psi(\vec{r}, t)|^2 d^3r = 1 \quad \text{— смысл дисперсии.}$$

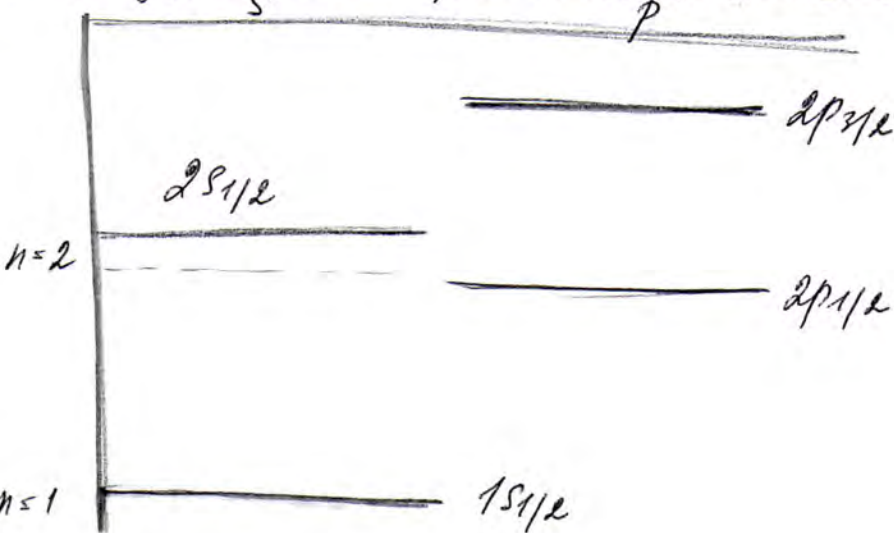
(движение ф-кцион. волн)

② Лэмбовский сдвиг. Опыт Лэмба и Ризерфорда

Лэмбовский сдвиг - эффект, обусловленный взаимодействием вакуума с атомной подсистемой

В соответствии с теорией Дирака для орбитального и спинного момента главного квантового числа уровни с равными значениями l , но одинаковыми значениями полного момента j , являлись вырожденными.

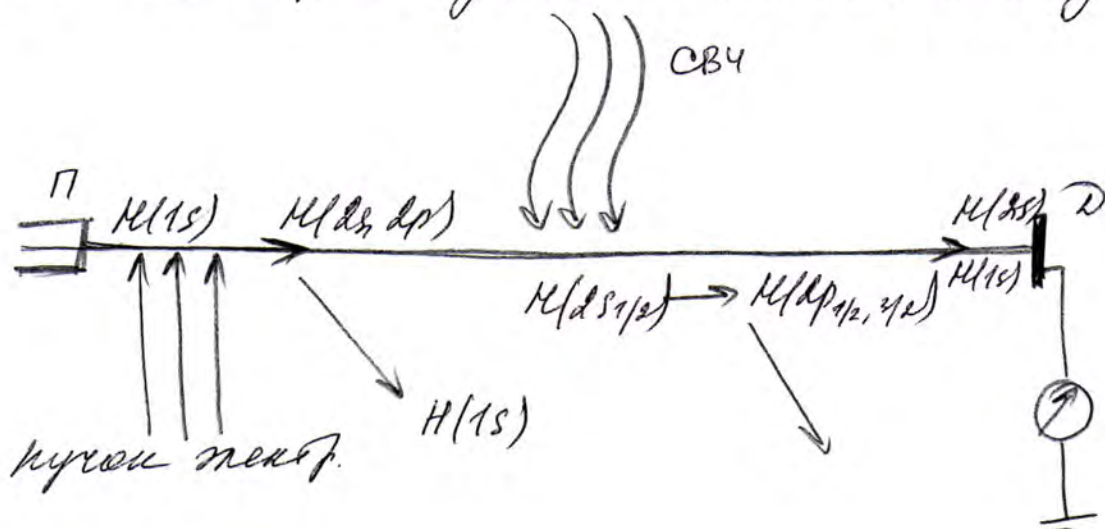
Оказалось, что взаимодействие атомного дипольного момента с вакуумными флуктуациями поля смещает эти вырожденные



магнитом, $2s_{1/2}$ и $2p_{1/2}$.

Уровень $2s_{1/2}$ смещен вверх относительно своего вырождения, предсказанного Дираком, в то время как подуровни $2p_{1/2}$ практически не существуют.

Схема измерения лэмбовского сдвига по методу Лэмба и Ризерфорда.



Нейтральные возбужденные атомы водорода взаимодействуют с лучами (П) и подвергаются действию лучей тектронов, в котором тектрон ударом происходит возбужденных состояний $2s_{1/2}$ и $2p_{1/2, 3/2}$

Атом в состоянии $1S_{1/2}$ в результате радиационного перехода спонтанно переходит в основное состояние $1S_{1/2}$.
Состояние $2S_{1/2}$ является метастабильным по отношению к переходу $2S_{1/2} \rightarrow 1S_{1/2}$ ввиду полного запрета на переходы в результате запрета на переходы.
В результате атомов $1S_{1/2}$ доходят до детектора (D) и отдают электроны детектору, своего жермию возбуждения ($\sim 10,2 \text{ эВ}$)

Получившие жермию электроны покидают детектор, и включенный в цепь гальванометр показывает показания тока.

Величина тока в цепи детектора скачет пропорционально переменной жермии, т.е. числу метастабильных атомов в состоянии $2S_{1/2}$

По пути к детектору пучок атомов в состоянии $2S_{1/2}$ проходит через область СВЧ поля, частота которого может перестраиваться. При совпадении частоты поля с частотой переходов $2S_{1/2} \rightarrow 2P_{1/2}$ или $2S_{1/2} \rightarrow 2P_{3/2}$ скачет. Возможны вынужденные переходы в $2P$ -состояние, что приводит к беспрямому спонтанному переходу в основное состояние. В результате метастабильные атомы не доходят до детектора и сигнал с него пропадает \Rightarrow скачет. Возможным можно измерить поперечные уровни $2S_{1/2}$ относительно дублета $2P_{1/2, 3/2}$

Эксперимент показал, что расщепление между компонентами дублета $2P_{1/2, 3/2}$ составляет величину 10950 МГц в соответствии с теорией Дирака ($= \frac{2^2 k_y}{16}$), а уровень $2S_{1/2}$ сдвинут вверх примерно на 1058 МГц относительно нижней компоненты дублета $2P_{1/2, 3/2}$

При строгом анализе спонтанной квантовой механики следует неоднократно учитывать ее взаимодействие с полем вакуума. Взаимодействие атомного электрона с вакуумными полями ведет не только к спонтанному переходу, но и к жермии сдвигу уровней.

$\epsilon_{k\lambda}$ - ампл. значение вакуумного т. поля в полевой моде

$$\epsilon_{k\lambda} = \sqrt{\frac{4\pi\hbar\omega_{k\lambda}}{L^3}}$$

$$\langle (\delta\vec{r})^2 \rangle = \frac{2\hbar e^2 t}{m^2} \frac{1}{L^3} \sum_{k\lambda} \frac{1}{\omega_{k\lambda}^3}$$

Если L^3 достаточно большой:

$$\frac{1}{L^3} \sum_{k\lambda} \rightarrow 2 \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} = \frac{1}{\pi^2 c^3} \int \omega^2 d\omega$$

$$\begin{aligned} \langle (\delta\vec{r})^2 \rangle &= \frac{2e^2\hbar}{\pi m^2 c^3} \int \frac{d\omega}{\omega} = \frac{2e^2}{\pi \hbar c} \left(\frac{\hbar}{mc}\right)^2 \int \frac{d\omega}{\omega} \\ &= \frac{2}{\pi} \alpha^3 a_0^2 \int \frac{d\omega}{\omega} \end{aligned}$$

Интеграл раскогнется и на верхнем, и на нижнем пределе \Rightarrow требуется ограничить спектр полевых мод, например, с минимальной

$$\hbar\omega_{\text{MAX}} = mc^2; \quad \hbar\omega_{\text{MIN}} = \frac{1}{2} \alpha^2 mc^2 \frac{\hbar^2}{n^2}$$

«Квадрат амплитуды гравитационных»:

$$\langle (\delta\vec{r})^2 \rangle = \frac{2}{\pi} \alpha^3 a_0^2 \ln \frac{dn^2}{\hbar^2 \alpha^2}$$

$$\sqrt{\langle (\delta\vec{r})^2 \rangle} \sim \alpha^{3/2} a_0 \sim 6 \cdot 10^{-4} a_0 \ll a_0 \Rightarrow \text{Эффект оказывается}$$

существ. только для s-состояний.

Величина относ. errors ns-сост.:

$$\delta E_{ns} \sim \frac{\hbar^4}{n^3} \alpha^3 R_y$$

Более точные вычисления, проверенные Демье:

$$\delta E_{ns} = \frac{8}{3\pi} \frac{\hbar^4}{n^3} \alpha^3 R_y \cdot \ln \frac{dn^2}{\hbar^2 \alpha^2}$$

Флуктуирующее вакуумное поле электр. диполя.
 Воздействие на электрон, приводит к его "дрожанию" на орбите.

В ср. с электронами, "дрожает" - атомный центр \Rightarrow
 \Rightarrow электрон "видит" его как неподвиж. объект

Конечный размер ядра, так же как и конечная масса ядра, не влияют на частоту свечения

В рамках рассмотр. модели атомовский центр имеет такую же природу, только из-за размера ядра свечение имеет большую амплитуду "дрожания" электрона на орбите

Уже простр. структура радиальных волнов. ф-ций приводит к тому, что неподвижность атомного ядра приводит к свечению вверх только S-сост. \Rightarrow ожидается, что вращение атомного ядра в вакуумном поле все же также приводит к свечению вверх атомных сост. с ненулевой орбит. моментом.

"Дрожит" электрон:

$$m \ddot{\vec{r}} = e \vec{E}_{vac} + \frac{e}{c} [\dot{\vec{r}} \times \vec{H}_{vac}] \quad (*)$$

\vec{r} - отклонение электрона от равнов. орбиты

$$\vec{E}_{vac}(t) = \sum_{k, \lambda} \vec{e}_\lambda \epsilon_{k\lambda} \cos(\omega_{k\lambda} t)$$

Решение уравн. (*)

$$\vec{r} = -\frac{e}{m} \sum_{k, \lambda} \vec{e}_\lambda \epsilon_{k\lambda} \frac{\cos(\omega_{k\lambda} t)}{\omega_{k\lambda}^2}$$

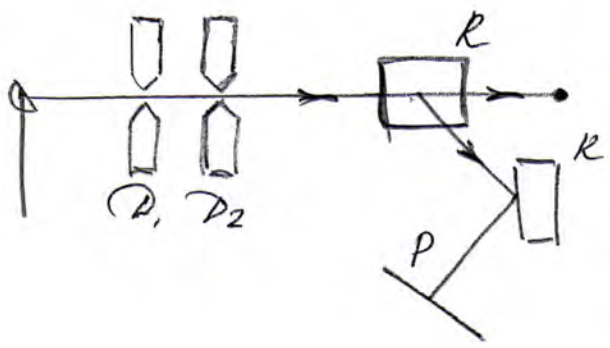
Средний квадрат отклонения электрона от равнов. траектории:

$$\langle (\delta \vec{r})^2 \rangle = \frac{e^2}{m^2} \sum_{k\lambda} \frac{\epsilon_{k\lambda}^2}{\omega_{k\lambda}^4} \cos^2(\omega_{k\lambda} t) = \frac{e^2}{2m^2} \sum_{k\lambda} \frac{\epsilon_{k\lambda}^2}{\omega_{k\lambda}^4}$$

① Квантовая связь при излучении. Термическое и шептальное фотоны. Эффект Комптона

Шептальное излучение: свет представляет собой поток частиц - квантов света, фотонов, несущих термическую энергию.

Комптоном замечено излучение рассеянного рентгеновского излучения различной длины волны



Пучок рентгеновского излучения коллимируется диафрагмами D1 и D2, рассеивается на мишенях K, затем попадает в рентгеновский спектрограф. Сигнал со спектрографа регистрируется на фотопластинке P.

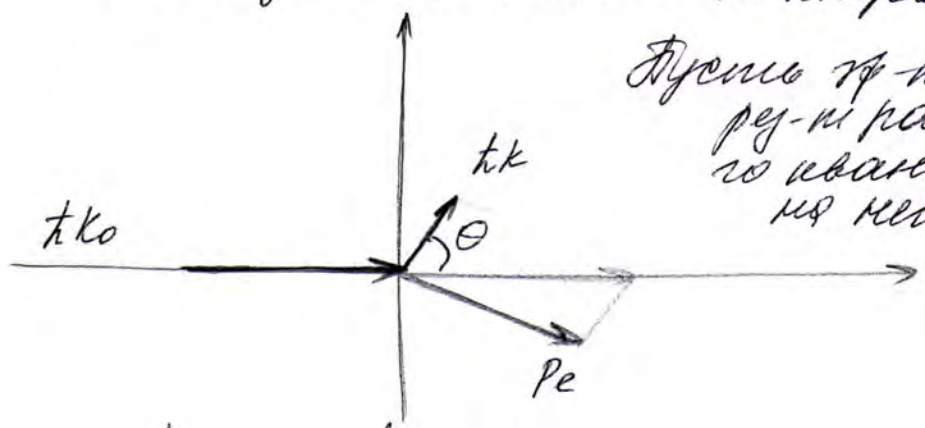
Обнаружено, что независимо от длины волны падающего излучения рассеянное излучение смещается в длинноволновую часть спектра, причем это смещение зависит от угла, под которым носитель рассеянного света

$$\Delta \lambda = \lambda - \lambda_0 = \lambda_C (1 - \cos \theta)$$

λ_0 - длина волны падающего излучения.

λ - длина волны рассеянного излучения.

λ_C - комптоновская длина волны электронов, $\lambda_C = 2.42 \cdot 10^{-10}$ см



Эффект К-и Комптона - результат рассеяния электронов на квантах рентгеновского излучения на неподвижном электроне.

$$3CP: \hbar \omega_0 + mc^2 = \hbar \omega + E_e$$

$\hbar \omega_0$ - энергия кванта до рассеяния.

$\hbar \omega$ - энергия кванта после рассеяния

E_e - энергия электрона после рассеяния

Комплекс фотона: $\vec{p} = \hbar \vec{k}$ ($k = \omega/c$)

Связь энергии и импульса электрона:

$$E_e = \sqrt{p_e^2 c^2 + m^2 c^4}$$

ЗОВ: $\hbar k_0 = \hbar k + p_e$

$$(\hbar \omega_0)^2 + (\hbar \omega)^2 - 2\hbar \omega_0 \hbar \omega \cos \theta = p_e^2 c^2 \quad (*)$$

$\theta = (\vec{k}_0, \vec{k})$ - угол рассеяния фотона

из ЗОВ:

$$(\hbar \omega_0 - \hbar \omega)^2 + 2(\hbar \omega_0 - \hbar \omega) m c^2 = p_e^2 c^2 \quad (*)$$

$$\omega_0 - \omega = \frac{\hbar}{m c^2} \omega \omega_0 (1 - \cos \theta)$$

$$\omega = \frac{2\pi c}{\lambda} \Rightarrow \lambda - \lambda_0 = \frac{2\pi \hbar}{m c} (1 - \cos \theta)$$

$$\lambda_e = 2,42 \cdot 10^{-10} \text{ см}$$

2) Сверхтонкая структура атомных спектров. Правило интервалов Ланде.

Атомное ядро, как и электрон, обладает собств. магнит. моментом как-вз взаимодейств. Он складывается из собств. магнит. моментов (спинов) и орбит. моментов протонов и нейтронов

Спин протона и нейтрона: $I_p = I_n = 1/2$

Спин ядра атома водорода: $I_H = I_p = 1/2$

Спин ядра атома дейтерия: $I_D = 1$

Наличие орбит. взаимодейств протонов в атомном ядре приводит к существованию ненулевого магн. момента атомных ядер.

У ядер есть собств. магн. моменты, связ. со спином:

$$\vec{\mu}_N = g_N \mu_{NB} \vec{I}$$

g-фактор
ядра

$\mu_{NB} = \frac{e\hbar}{2m_p c}$ - ядерный магнетон Бора

$g_p \approx 5,6; g_n \approx -3,8$

Наличие ненулевого магн. момента у электрически нейтрального нейтрона косвенно свидетельствует о наличии у него некоторой пресуп. структуры

Проекция спина ядер на некоторую внеш. ось: $1/2$

Проекция магн. моментов на ту же ось:

$\mu_{pz} = 2,8 \mu_{NB}; \mu_{nz} = -1,9 \mu_{NB}$

Учет вращат. магн. моментов атомного ядра и атомного ядра приводит к возникновению сверхтонкой структуры атомных спектров.

Величина дон. энергии атома, обусловл. браунер. сферич. поля. взаимодейств. с магн. моментом э. оболочки атома:

$$\delta E \sim \frac{\mu_B \mu_N}{a_0^3} \sim \frac{m}{m_p} \alpha^2 R_y \sim 10^{-6} \text{ эВ}$$

Оператор браунер., привод. к сверхтонкой структуре

$$\mu: \quad \hat{V}_{\text{гг}} = B(\hat{J} \hat{I}) \quad (*)$$

\hat{J}, \hat{I} - операторы полного механич. момента э.

оболочки атома и спина ядра

B-константа сверх

Величина энергии (*) зависит от ориентации векторов \hat{J} и \hat{I} в и-ве отливает. друг друга

Число таких ориентаций опред. квант. числом F, определяющим значение суммарного механич. момента атома $\vec{F} = \vec{J} + \vec{I}$

Число компонент сверхтонкого расщепления:

$$\min \{ (2J+1), (2I+1) \}$$

Вопросы №17

① Модель атомов Бор. Правило квантования Бора. Боровский радиус орбиты электрона. Энергия электронов и спектральные серии водородоподобных систем.

① Атом может находиться в определенных, стационарных, состояниях, которые характеризуются дискретными значениями энергии E_1, E_2, E_3, \dots . В этих состояниях атом не излучает.

② Излучение энергии происходит при переходе с одной орбиты на другую, при этом энергия излученного кванта $h\nu$ — разность энергий нач. и конечного атомных состояний.

Уравн. для электрона, движущегося по круговой орбите вокруг ядра с зарядом Z :

$$\frac{mv^2}{r} = \frac{Ze^2}{r^2}$$

При движении в центр-симметрич. поле сохран. момент кол-ва движения

Для Z -ядра: $L_z = mvr = \text{const}$

Полная энергия электрона на орбите:

$$E = \frac{mv^2}{2} - \frac{Ze^2}{r} = -\frac{mv^2}{2}$$

Через орбит. момент:

$$L_z = \frac{Ze^2}{v}$$
$$E = -\frac{mZ^2e^4}{2L_z^2}$$

При переходе с одной орбиты на другую изменение энергии и изменение момент. кол-ва движения связаны:

$$\Delta E = \frac{mZ^2e^4}{L_z^3} \Delta L_z$$

Это выражение связано с нулевым квантом $\hbar\omega$:

$$(\omega = \nu/r)$$

$$\Delta E = \hbar\omega = \hbar \frac{v}{r} = \hbar \frac{m \hbar^2 e^4}{L_z^3}$$

Для высоких орбит в силу принципа соотв.:

$$\Delta L_z = \hbar$$

Пусть это верно для многих орбит:

$$L_z = n\hbar + \text{const}$$

$$n \in \mathbb{N}, n \neq 0 \quad \textcircled{0}$$

↓

$$L_z = n\hbar, n = 1, \infty \quad \text{— правило квантования момента}$$

$$r_n = \frac{\hbar^2}{me^2} \frac{n^2}{r} = a_0 \frac{n^2}{r}$$

$$v_n = \frac{e^2}{\hbar} \frac{\hbar}{n}$$

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2} = 5,29 \cdot 10^{-9} \text{ см} \quad \text{— бортовский радиус (размер атома водорода в осн. сост. (n=1))}$$

Энергия электронов в атоме:

$$E_n = -\frac{mv_n^2}{2} = -\frac{me^4 \hbar^2}{2\hbar^2 n^2}$$

$$R_y = \frac{me^4}{2\hbar^2} = 13,6 \text{ эВ} \quad \text{(потенциал ионизации атома водорода)}$$

$$\hbar\omega_{mn} = R_y \hbar^2 \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right), n > m \quad \text{— обобщ. ф-ла Ридберга}$$

Случай $m > n$ соотв. поглощению кванта при переходе

с более низкой н₂ более высоко орбиту

Сериальная закономерности в спектре атома водорода (Z=1)

$$\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right), n=3, 4, 5, \dots \quad \text{— серия Балмера в спектре водорода}$$

R-const. Ридберга

$$R = 109400 \text{ 1/cm}$$

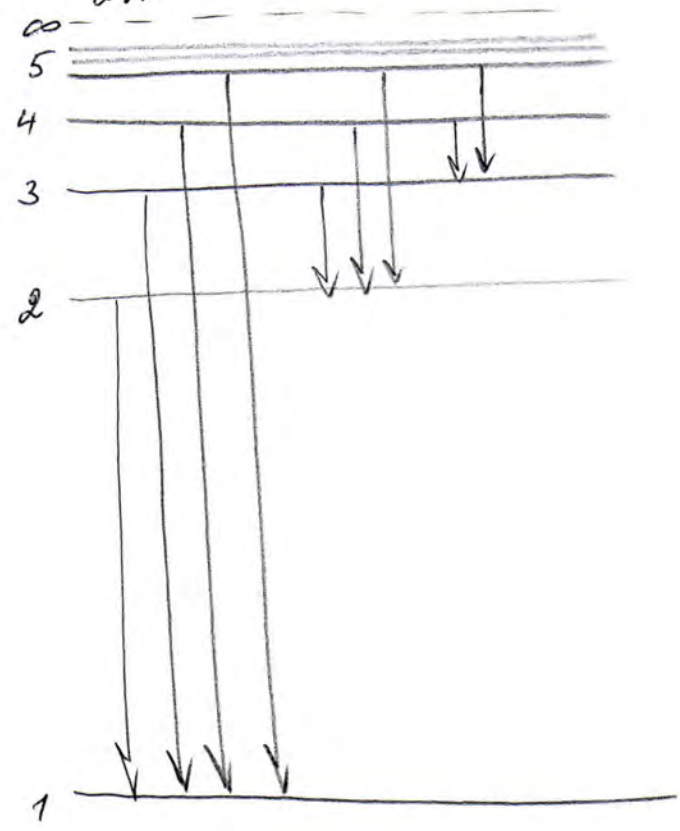
$$\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{1^2} - \frac{1}{n^2} \right), n=2, \infty \quad \text{— серия Лаймана (УФ часть спектра)}$$

$$\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{3^2} - \frac{1}{n^2} \right), n=4, \infty \quad \text{— серия Пашена (ИК часть спектра)}$$

Модель атома Бора коррелирует с эксп. данными:

$$\frac{1}{\lambda_{nm}} = \frac{R_y}{2\pi h c} \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right), n > m$$

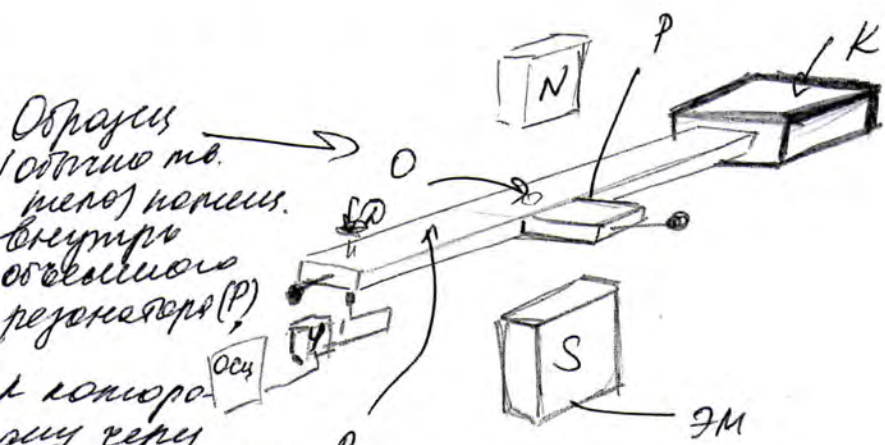
$$R = \frac{R_y}{2\pi h c} = 109400 \text{ 1/cm}$$



Спектр атомарного водорода

② Эксперим. определили магн. моменты атомов. Оттн Штерна и Герлаха. Полный магн. момент атома. Множитель Ланде (g-фактор). ЭПР.

Включив ЭПР замыкается в резонансном положении мощности СВЧ излучения опред. частоты ($10^9 - 10^{12}$ Гц) при его прохождении через парамагнитную среду, помещенную во внешнее одностор. магнитное поле



наводится СВЧ-излучение, создаваемое кистратронным генератором К.

Прошедшая через образец мощность излуч. детектируется. Сигнал с которого через усилитель (У) подается на осциллограф.

Внешнее ^{одностор.} магн. поле создается с помощью ЭМ, при этом напряженность этого поля может измен. в опред. пределах, т.е. обн. выполнено условие резонанса.

Физ. причина вращений. ЭПР.

В слабом магн. поле уровень с наименьшим значением J расщепл. на $2J+1$ компонент по числу вращений угл. магнитного кв. числа M_J

Рассмотрим энергию соседн. комп. уровнями:

$$\Delta E = g \mu_B H$$

Резонансное поглощение происходит на смене

излучения фермиона при совпадении частоты пере-
хода, соотв. $\Delta E = \mu_B \hbar \omega$, с частотой возмущающе-
го излучения

$$\omega = g \frac{\mu_B \hbar}{\hbar} = g \frac{e \hbar}{2 m c}$$

Рассматрив. эффект - комбинированный

квантовая механика - в наличии g-фактора

С точки зрения классич. теории эффект заключается
в развороте вектора магнитного момента, соотв.
с орбит. движением ядра при совпадении частоты
внешнего поля с частотой ларангоровской
процессы орбит. во внешн. магн. поле.

Условие резонанса: $\omega = \frac{e \hbar}{2 m c}$

$$g = 1 + \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)} - \begin{matrix} \text{атомный } g \text{ фактор} \\ \text{(фактор Ланде)} \end{matrix}$$

Опыт Штерна-Герлаха

Учтено наличие спинового момента и магнитно-
го момента я. отклоняются атомы

Рассм. особенности расщепления атомного пучка
в зав-ти от величины напряженности магн. поля.

В сложных полях \vec{L} и \vec{S} связаны спин-орбит. взаимодей. в
конкрет. состоянии $\vec{J} \Rightarrow$ с внешней магн. полем взаимодей.
эффект. момент \vec{J} ит.

Сила, действ. на пучок атомов в неоднор. магнитном
поле (оx направлено вдоль градиента магн. поля):

$$F_z = g M_J \mu_B \frac{\partial H}{\partial z}$$

Если $g \neq 0$, пучок атомов расщепится на $2J+1$ компо-
ненту по числу различных значений квант. числа

При пролете атомного пучка через область сильного неоднород. магн. поля спин-орбит. связь оказывается, и с внешней полем неравновесно друг от друга. Св. магнитные моменты, обусловл. орбит. и спиновым движением атомных электронов

$$F_z = (M_L + 2M_S) \mu_B \frac{\partial \epsilon}{\partial x},$$

т.е. пучок расщепится на компоненты $M_L + 2M_S$.

Тема 18

① Принцип суперпозиции. Разложение волновой ф-ции по собств. ф-циям эрмитового оператора. Фу. имеет конт-ное разложение.

$$\psi = \sum_n C_n \psi_n$$

Набор ф-ций $\{\psi_n\}$ всегда можно взять набор ортонормированных:

$$\int \psi_m^* \psi_n d\tau = \delta_{mn}, \quad \delta_{mn} = \begin{cases} 0, & m \neq n \\ 1, & m = n \end{cases} \leftarrow \begin{array}{l} \text{Для опера-} \\ \text{тора } \hat{A} \text{ с} \\ \text{дискр. спект.} \end{array}$$

В случае непрерыв. спектра: $\psi = \int C_a \psi_a da$

$$\int \psi_a^* \psi_{a'} d\tau = \delta(a - a')$$

$W_n = |C_n|^2$ — вероятность того, что при измерении фу. величина, соотв. оператору \hat{A} , будет измерено значение A_n , соотв. сф ψ_n

Если речь идет о фу. величине, спектр оператора которой явл. непрерывным, то величину $dW = |C_a|^2 da$ следует трактовать как вероятность при измерении величины A обнаружить ее значение в $(a, a + da)$

Кэф-ты C_n или C_a (амплитуды вер-ти) определ. по известной волновой ф-ции:

$$C_n = \int \psi \psi_n^* d\tau$$

$$C_a = \int \psi \psi_a^* d\tau$$

Тема № 18

② Тонкая структура атомных спектров. Правило интервалов Ланде.

Спин-орбит. взаимодействие приводит к появлению тонкой структуры, мерой расщепл. на группу состоян.

Оператор спин-орбит. взаимодействия:

$$\hat{V}_{LS} = A(\hat{L} \hat{S})$$

A - константа связи, явл-ся некоторым оператором в проств-ве радиальных волновых ф-ций многоатом.

Условие теорему коммутативности:

$$\hat{V}_{LS} = \frac{A}{2}(\hat{J}^2 - \hat{L}^2 - \hat{S}^2)$$

Квантовые числа L, S и J заданы можно опред. значения орбитального спинового и полного момента атома, вычисляя матричный элемент от оператора спин-орбит. взаимодействия:

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

Расщепление энергии соседними квант. состояниями:

$$\delta E_J = E_J - E_{J-1} = AJ - \text{правило интервалов Ланде}$$

$A > 0$: мультиплет нормальный

$A < 0$: мультиплет обратный.

① Операторы фич. величины. СВ и СВ операторов x и p_x . Среднее значение и дисперсия фич. величины. Проблема одновремен. измерений фич. величины. Принцип неопредел.

$$\hat{x} \psi(\vec{r}, t) = x \psi(\vec{r}, t)$$

$$\hat{p}_x \psi(\vec{r}, t) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \psi(\vec{r}, t)$$

Общий случай оператора импульса:

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

Оператор кинетич. энергии:

$$\hat{T} = \frac{\hat{p}^2}{2m} = \frac{\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2$$

Оператор потенц. энергии:

$$\hat{U} \psi(\vec{r}, t) = U(\vec{r}, t) \psi(\vec{r}, t)$$

Оператор полной энергии (гамильтониан):

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{U} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(\vec{r}, t)$$

Оператор момента кол-ва движения:

$$\vec{L} = [\vec{r} \times \vec{p}]; \quad \hat{L} = -i\hbar [\vec{r} \times \nabla]$$

$$\begin{aligned} \hat{L}_x &= -i\hbar (y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y}) \\ \hat{L}_y &= -i\hbar (z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z}) \\ \hat{L}_z &= -i\hbar (x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x}) \end{aligned}$$

Если некоторой фич. величине A поставлен в соотв. оператор \hat{A} , то среднее значение фич. величины A в некотором квант. сост., описыв. $\psi(\vec{r}, t)$, можно определить:

$$\langle A(t) \rangle = \int \psi^*(\vec{r}, t) \hat{A} \psi(\vec{r}, t) d^3r$$

Дисперсия величины A , характеру разбросу результатов измерений относ. среднего значения, можно вычислить: $D_A = \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2$

СЗ и СФ оператора импульсов:

$$\hat{p}_x \psi_p = p \psi_p$$

и p "указыв. на принадлежность ψ_p СЗ, равному p

$$\psi_p = \exp\left(\frac{i}{\hbar} p x\right) - \text{плоская волна де Бройля}$$

Согласн. соот. оператора импульсов - волна де Бройля

Соотношение неопределенностей Гейзенберга:

$$\Delta p_x \Delta x \approx \hbar$$

Если все частицы обладают волновыми св-ствами, то состояние частицы может быть адекватно описано предположено в виде волнового пакета

Одномерный случай:

$$\psi(x, t) = \int \phi(p) \exp\left[-\frac{i}{\hbar}(E_p t - p x)\right] \frac{dp}{2\pi}$$

Если в момент времени $t=0$ проведено измерение, ограничивающее $\psi(x, t)$ по координате $\Delta x \approx d$, то, как следует из свойства преобраз. Фурье, пакет будет иметь спектральную ширину $\frac{\Delta p}{\hbar} \approx \frac{1}{d}$, т.е. $\Delta p \Delta x \approx \hbar$

Аналогичные соотнош. будут иметь место в 3-мерном случае:

$$\Delta p_x \Delta x \approx \hbar; \Delta p_y \Delta y \approx \hbar; \Delta p_z \Delta z \approx \hbar$$

а также по времени: $\Delta E_p \Delta t \approx \hbar$

Вопросы №17

① Модель атомов Бор. Правило квантования Бора. Боровский радиус орбиты электронов. Энергия электронов и спектральные серии водородоподобных систем.

① Атом может находиться в определенных, стационарных, состояниях, которые характеризуются дискретными значениями энергии E_1, E_2, E_3, \dots . В этих состояниях атом не излучает.

② Излучение энергии происходит при переходе с одной орбиты на другую, при этом энергия излучения $h\nu$ — разность энергий нач. и конечного атомных состояний.

Уравнение для электронов, движущихся по круговой орбите вокруг ядра с зарядом Z :

$$\frac{mv^2}{r} = \frac{Ze^2}{r^2}$$

При движении в центр-симметричном поле сохраняется момент импульса

Для Z -ядра: $L_z = mvr = \text{const}$

Полная энергия электронов на орбите:

$$E = \frac{mv^2}{2} - \frac{Ze^2}{r} = -\frac{mv^2}{2}$$

Через орбит. момент:

$$L_z = \frac{Ze^2}{v}$$
$$E = -\frac{mZ^2e^4}{2L_z^2}$$

При переходе с одной орбиты на другую изменение энергии и изменение момента импульса связаны соотношением:

$$\Delta E = \frac{mZ^2e^4}{L_z^3} \Delta L_z$$

Это выражение связано с нулевым квантом $\hbar\omega$:

$$(\omega = \frac{v}{r})$$

$$\Delta E = \hbar\omega = \hbar \frac{v}{r} = \hbar \frac{m \cancel{r}^2 e^4}{L_z^3}$$

Для высших орбит в силу принципа соотв.:

$$\Delta L_z = \hbar$$

Пусть это верно для любых орбит:

$$L_z = n\hbar + \text{const}$$

$$n \in \mathbb{Z}, n \neq 0 \quad \textcircled{0}$$

↓

$$L_z = n\hbar, n = 1, \infty \quad \text{— правило квантования момента}$$

$$r_n = \frac{\hbar^2}{me^2} \frac{n^2}{r} = a_0 \frac{n^2}{r}$$

$$v_n = \frac{e^2}{\hbar} \frac{r}{n}$$

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2} = 5,29 \cdot 10^{-9} \text{ см} \quad \text{— бортовский радиус (размер атома водорода в осн. сост. (n=1))}$$

Энергия электронов в атоме:

$$E_n = -\frac{mv_n^2}{2} = -\frac{me^4 r^2}{2\hbar^2 n^2}$$

$$R_y = \frac{me^4}{2\hbar^2} = 13,6 \text{ эВ} \quad \text{(потенциал ионизации атома водорода)}$$

$$\hbar\omega_{mn} = R_y \frac{1}{r} \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right), n > m \quad \text{— обобщ. ф-ла Ридберга}$$

Случай $m > n$ соотв. поглощению кванта при переходе

с более низкой н₂ более высоко орбиту

Серия Лангмюра в спектре атома водорода (Z=1)

$$\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right), n=3, 4, 5, \dots \quad \text{— серия Балмера в спектре водорода}$$

R-const. Ридберга

$$R = 109400 \text{ 1/cm}$$

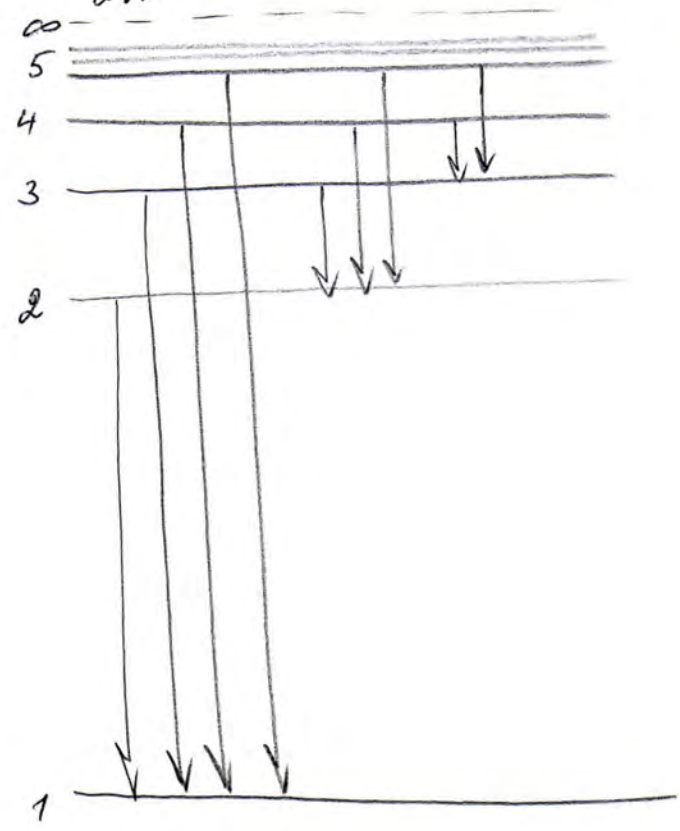
$$\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{1^2} - \frac{1}{n^2} \right), n=2, \infty \quad \text{— серия Лангмюра (УФ часть спектра)}$$

$$\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{3^2} - \frac{1}{n^2} \right), n=4, \infty \quad \text{— серия Пашена (ИК часть спектра)}$$

Модель атома Бора коррелирует с эксп. данными:

$$\frac{1}{\lambda_{nm}} = \frac{R_y}{2\pi h c} \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right), n > m$$

$$R = \frac{R_y}{2\pi h c} = 109400 \text{ 1/cm}$$



Спектр атомарного водорода

Виллиш N20

② Сложение моментов кол-ва движущихся в многоэлектр. атоме. Приближение LS и JJ-связей.

Термы. Типичная структура термов

Орбит. и спиновый моменты сов-ти атомн. терм:

$$\vec{L} = \sum_i \vec{l}_i \quad ; \quad \vec{S} = \sum_i \vec{s}_i \quad \text{— приближение LS-связи}$$

Но такая схема построения атомных термов реально не всегда.

Сравним по порядку величины энергии $n|em$ и спин-орбит. взаимодей. моментов в атоме

Энергия $n|em$ взаимодей. в атоме гелия:

$$E_{so} \sim Z^2 Ry$$

Лин. зав-ть от заряда ядра свертая с тем, что с увел. Z радиусы n орбит уменьшаются, т.е. моменты скаж. ближе друг к другу

Энергия спин-орбит. взаимодей. в атоме:

$$E_{LS} \sim Z^4 \frac{1}{2} Ry$$

При $Z \gg Z^* \approx 2^{-2/3} \approx 27$ термы спин-орбит. взаимодей. уже больше, чем термы $n|em$ взаимодей. \Rightarrow при изучении спектров n оболочек атома надо сначала учитывать спин-орбит. взаимодействие, а затем - $n|em$.

Средняя оценка справедлива для гелиеподобного иона: содержится 2 нейтрона

В многоэлектр. системах за счет частичной экранировки ядра нейтронами внутр. оболочек термы спин-орбит. взаимодей. скаж. меньше оцененной нами величиной.

В тяжелых многоэлектр. атомах спин-орбит. взаимодей. уже нельзя рассматривать как малую поправку к гамильтонику

Другая сторона построения атомных термов, реализуется при $E_{LS} \gg E_{ee}$

В таком случае термы $n/\ell m$ атомной оболочки электронов можно пренебречь \Rightarrow состояние каждого из электронов конфигурации характеризуется квант. числами j, m_j

В случае, если заданы значения квант. числа j всей совокупности атомных электронов в заданной конфигурации ($j = 1, \dots, N$), то говорят, что заданы термы в приближении jj -связи

Обозначается: $\{j_1, \dots, j_N\}$

Исследующий учет термов атомной оболочки приводит к расщеплению термов на группу состояний, число которых определ. количеством значений квант. числа J , заданного возможным значением полного мех. момента электронной оболочки атома

$$\vec{J} = \sum_i \vec{J}_i$$

Состояние в приближении jj -связи обозначается: $\{j_1, \dots, j_N\} J$

Спин-орбит. взаимодействие: взаимодействие, приводящее к появлению тонкой структуры термов: термы расщепл. на группу состояний — мультиплет, число компонент которого определ. числом возможных ориентаций векторов \vec{L} и \vec{S} в пространстве, т.е. числом возможных значений квант. числа J , заданного величиной механич. момента всей n -оболочки атома \Rightarrow термы в заданной конфигурации — сов-ть состояний с заданными значениями L и S :

$$2S+1 L_J$$

Билет 21

① Крест. ур-е Шрэд. Дифф опер по времени.
Частицу см опис. с помощью нем. волн подв.
Частица с шир p соотв. волна:

$$\psi(x,t) = \exp\left(\frac{i}{\hbar}(px - Et)\right) = \exp(i(kx - \omega t)).$$

связь ω и k : $E = \frac{p^2}{2m}$ $\hbar\omega = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ дифф оди раз $\psi(x,t)$
повр. и дватгн по

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = -i\omega \psi, \quad \frac{\partial \psi}{\partial x^2} = -k^2 \psi \Rightarrow \left| \cdot \frac{i}{\hbar} \right| \cdot \frac{-\hbar^2}{2m} \text{ коорд} \Rightarrow$$

$$\left. \begin{aligned} -i \cdot i \frac{\partial \psi}{\partial t} &= \hbar\omega \psi \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} &= \frac{\hbar^2 \psi^2}{2m} \psi \end{aligned} \right\} \Rightarrow i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} - \text{ур-Шр.}$$

$$\Rightarrow \text{крест. ур. Шр: } \cancel{i\hbar} \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi$$

при наших потенц коло: $\Rightarrow i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + V(\vec{r}, t) \psi(\vec{r}, t)$

Дифф. по времени.

С течен времени сред. знач динам. перем, изменяются.

Диф. обе части кер-ва $\langle \hat{A} \rangle = \int \psi^* \hat{A} \psi dV \Rightarrow$

$$\frac{d}{dt} \langle A \rangle = \int \psi^* \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \psi dV + \int \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \hat{A} \psi dV + \int \psi^* \hat{A} \frac{\partial \psi}{\partial t} dV.$$

$$\text{т.к. } -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H} \psi; \quad \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi^*}{\partial t} = \hat{H} \psi^* \Rightarrow$$

$$\frac{d}{dt} \langle A \rangle = \int \psi^* \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \psi dV + \frac{i}{\hbar} \int (\hat{H} \psi^*) (\hat{A} \psi) dV - \frac{i}{\hbar} \int \psi^* \hat{A} \hat{H} \psi dV. \Rightarrow$$

$$\frac{d}{dt} \langle A \rangle = \int \psi^* \left\{ \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} (\hat{H} \hat{A} - \hat{A} \hat{H}) \right\} \psi dV.$$

Т.о. произв от сред значений динамич перем. предст. как среднее знач от немог оператора

Итоговым выведем

Пусть оператор \hat{A} имеет динамический закон эволюции от времени и координат, следовательно \Rightarrow .

$$\frac{d\hat{A}}{dt} = 0 \quad \text{В этом смысле } \langle \hat{A} \rangle \text{ от времени не изм.,}$$

$$\text{т.к.} \quad \frac{d}{dt} \langle \hat{A} \rangle = 0 \quad \text{, т.е. среднее значение этой координаты const.}$$

Билет. 21

② Характер рентгеновского излуч. Закон Мозли, Закон Мие.

Переход, связь с изл. составл. атомных эл-нов. В этом сл. возникает рентген. излуч. Рентгеновские спектры разл. элементов похожи друг на друга. Это связано с тем, что изл. кол-ва ϵ во внешней оболочке / сдвиг на энергию спектра сист. Для опис. энергии спектра внутр. атомных ϵ исп. приближ. эфф. заряда: $E_n = -\frac{Ry}{n^2} Z_{eff}^2 = -\frac{Ry}{n^2} (Z - \sigma_n)^2$

При переходе к оболочкам ^{ш. иван. ч. ш. иван. ч. ш. иван. ч.} с l, m -оболочками \uparrow пост. экранир.

величина пост. экранирования возрастает за счет увелич. числа внутр. электронов, ~~чем~~ ^{причем тем сильнее, чем больше} зная орбит. момента рассл. электрона. Нам важно, чтобы было выполн. $\sigma_n \ll Z$.

Пусть на K -оболочке был удал. электрон. Тогда возможен перех. на K с более выс. ~~у~~ атом. обол. K -серии рентг. изл.

Общ. выпр. для частот ивантов хар-го изл.

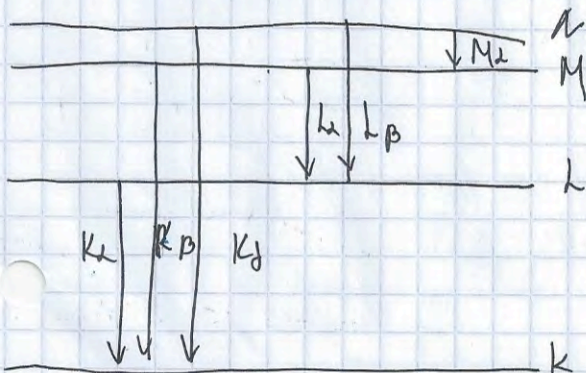
$$\hbar \omega = Ry \left(\frac{(Z - \sigma_1)^2}{n_1^2} - \frac{(Z - \sigma_2)^2}{n_2^2} \right)$$

Энергия рентгеновского иванта $K\alpha$ -линии есть

$$\hbar \omega_{K\alpha} = \frac{3}{4} Ry \cdot (Z - \sigma_K)^2$$

Для $L\alpha$ рентгеновского излуч:

$$\hbar \omega_{L\alpha} = \frac{5}{36} Ry \cdot (Z - \sigma_L)^2$$



Закон Мозли: $\sqrt{\omega} = k_1 (Z - \sigma)^2 \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right)$

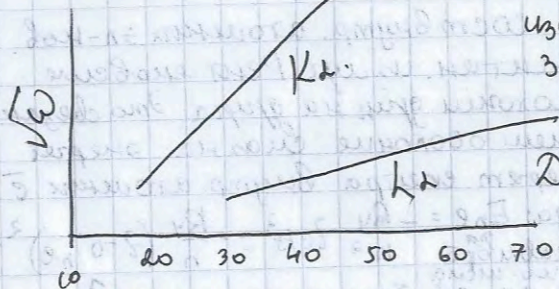
перепишем

$$\sqrt{\omega} \sim (Z - \sigma)$$

, т.е. корень из частоты излучения зависит от заряда атом. ядра

Эта зависимость Мозли при анализе экс. спектров

Диаметр Мозли - зависит от частоты головных линий рентген серии от поряд. номера элем в таблице



Эффект Оже

Энергия и.б. передана одному или нескольким электронам, на выш. иер. атом. оболочках

В рез-те этот электрон покидает атом, унося с собой энергию, кот могла бы быть излучена при эл/м переходе. - Эффект Оже

Сами e^- , кот испускаются, "заряд" поком с вакансией на одной из внутр атом. оболочек - Оже-электрон

При этом один из зарядов электронов становится двойным зарядом.

Э-ны, и справа вверх их по-во: $1s^2 2s^2 2p^3$.

Заполн атоэлектронами.

В многоэл. атомах энергии одноэл. еост емьно зав от знак орбит ив мсла. Сост с шав ив мсло м, n и мувьши знак орб. мом, "пробавив" выизтан, что энергии ояз, меньше чем энергии сл-сост, соотв. в мсло. n-1. Эта законом. летит воснове правил заполн:

- 1) из двух п/обол. мите по энергии распота, дм кот в-на n+l оказ меньшей
 - 2) если две кашх либо 2-х п/обол. знак сумм n+l совпад, то мите по энергии летит п/обол с меньшим знак n.
- Т.о. под/обол 4s и 5s должит зап равные чем 3d и 4d. На качеств уровне спр-ть указ выше пороуда зап. п/обол. подтв. перевод з-ном менделеева. Поемольму захим св-ва элементв от вет ввнешних не полностью зап оболочек, то по изв хим. св-вам того или иного эл-та можно судить о его электр. строении. Энергии электр в 4s и 3d п/обол близки. Поэтому дмь руда эл-тов при ох "перепрыг" в из 4s в 3d. Такие особен. распр в по близку расп. п/обол. можно предсказ только в рез-те кол-х и в атомех расчетов.

Правило Хунда. Осн терм атомов.

Для опр. осн терма исп правило Хунда:

- 1) мите по энергии летит тот терм, у кот мультиплетность макс.
- 2) при рав-ве мультип-ей двух и более термов min энергией обл. терм, стях знак сумм орбит мом. конфигураци

Физ смтсн: в сост. стях знак S и L эл-нов локализоб. дальше друг от друга => их энергии электрост. в оудм. оказ min. => **соответ. терм оснвным.**

Для опред. оснвн. еост. в терме исп правило Ланде, соотасно которому если атомная обол. заполнена менее чем половина, то мин. энергию имеет сост. с min знак J (норм. мул-т) если же атом. п/обол. заполнена более чем половина, то мин. энергию имеет сост. с max J (обрату мул-т)

Бишет 22

① Воли. св-ва частот. Опити Дт-Дт и Томс.
Корпускулярно св-ва прояв при вз-е
света св-вом.

Св-ва фотона как (частот) (енерг Е и имп р)
связаны с его волн св-вами (частот и λ)

$$h = 6,63 \cdot 10^{-34} \text{ Дж}\cdot\text{с}. \quad E = h\nu, \quad p = h\nu / c = h/\lambda.$$

Согласно де-Бройлю, катоду телу массой m , с и v

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

$$E_e = h\nu_\phi = \frac{hc}{\lambda_\phi} = m_\phi c^2.$$

в об. орбиты
используемое шло э. волн

$$\lambda_\phi = \frac{h}{m_\phi c} = \frac{h}{p_\phi}$$

$m_e v_n r_n = h \frac{1}{n}$ - кр-ло
убавл
бора.

$$\underbrace{2\pi r_n}_{\text{дл. эл. орбиты}} = n\lambda \Rightarrow h \frac{h}{m_e v_n}$$

дл. эл. орбиты

Длина волны эл-на на первой орбите.

$$\lambda_{n1} = \frac{h}{m_e v} = 3,3 \cdot 10^{-10} \text{ м}.$$

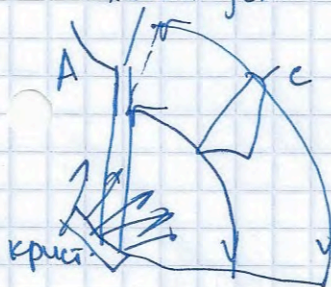
Длина эл. орбиты: $2\pi r_1 = 3,3 \cdot 10^{-10} \text{ м}.$

В эл-ти микромира имеют как волн. так и
корпус. св-ва.

$$\lambda = \frac{h}{mv} = \frac{2\pi h}{mv} \text{ - осн. ур-е квант волн дин.}$$

Опыт Дев. и Дт. Томсона

Схема уст:



пучок эл.-нов. в пучке (A) и ускор
разностью потенц V падает на
кристалл под углом θ . Детектор
(C) измеряет интенсивность
расс. пучка вз-ти от
угла рассеяния и энергии
ускор электронов. Показ макс
в спектре отраж отирист

Найдено: $2d \cos \theta = n\lambda$. d - раст м/д у н-ти λ - ди. волн.

$$\lambda = h / \sqrt{2meV} \Rightarrow$$

полот max при рас. нуля доитно
удовл. $\sqrt{V} \cos \theta = A \cdot n$, $A = \text{const.}$ (2.27)

Полот max оказ соот в (2.27). Т.е нулю
эл-нов вей себе как волн. поле,
хар-се ди. волн де Бройля!

Томсон проверил прав. ур-е $\lambda_{эл} = \frac{h}{mev}$.

Он разогне эл-ны до дост большой энергии
эл. поле / $0,3 \text{ В}$.

$$p_e = \sqrt{2meU}$$

$$\lambda_{\lambda} = \frac{h}{p_e} = \frac{h}{\sqrt{2meU}} = 0,1226 \text{ \AA} = \lambda_p.$$

Бишет 22. Перевод. електрон. №

(2) Многоэл. атом. Запомни атом. сост. электр. Атом обол. и подобол. Электр. конфиг. Гла. Хунда,

Многоэл. атом рассматривают в приближении самосост. поле Хартри. Осн. идея этого подхода: состояние атома из электр. опис. своей вол. ф-ей $\Psi_i(\vec{r}_i)$; кот. опред. из одночастич. ур-я Шредингера, описывающей движение i -го эл-на в самосост. потенциале, созд. ядром, + всей совокуп. электронов. При этом суще-но, что самосост. потенциал сохр. уектр. симметрию, поэтому одна возм. выделенная чл. вол. ф-и. и введ. кв. чисел n, l, m е, кроме того, спин. сост. \vec{s} хар-е квантовым числом m_s .

Двух эл. атом: пусть сост. \vec{e} опис. $\Psi_1(\vec{r}_1)$, второму $\Psi_2(\vec{r}_2)$
 \Rightarrow электрост. потенциал. $\varphi_1(\vec{r}) = \int \frac{\rho_1(\vec{r}_1)}{|\vec{r} - \vec{r}_1|} d^3r_1$,

$\varphi_2(\vec{r}) = \int \frac{\rho_2(\vec{r}_2)}{|\vec{r} - \vec{r}_2|} d^3r_2$, $\rho_i(\vec{r}_i) = e/|\Psi_i(\vec{r}_i)|^2$ - плот. зар, созд. в пр-ве катодов из \vec{e} . \Rightarrow самосост. пот, в кот. двит. катоды из электронов имеет вид:

$$V_1^{\text{eff}}(\vec{r}_1) = -\frac{ze^2}{r_1} + e\varphi_2(\vec{r}_1) \quad V_2^{\text{eff}}(\vec{r}_2) = -\frac{ze^2}{r_2} + e\varphi_1(\vec{r}_2).$$

Полн. волн. ф-е двух эл.: $\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \Psi_1(\vec{r}_1)\Psi_2(\vec{r}_2)$
не евл. ни сим., ни антисим. отн-но перестановки электронов.

Атом. оболочки и подоболочки. Электронная конфиг.

Атомной оболочкой (слоем) - совокупность \vec{e} с одним значением глав. кв. числа. Оболочка, соотв. $n=1, k$ -оболочка. Атомной подобол. - совокупность \vec{e} в атоме с одним знач. глав. кв. числа и орбит. кв. числа. Число медет в подобол.

опред. набором квант. чисел m_s где $2\vec{e} = 2(2l+1)$.

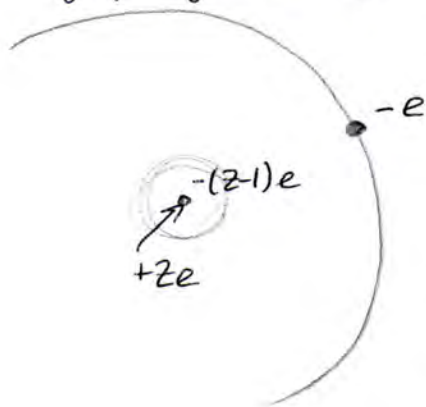
Электроны, кот. нах. в подобол. наз. эквивалентными. Распред. \vec{e} по обол. подобол. - электронная конфиг. Обозн. эл. конфиг.: запись. обозн. подобол., в кот. имеются

Билет №23

① Уравнение Шредингера с центрально-симметр. потенциалом. Атомар целочи металл. Квантовый эффект

Целочити металл: Li, Na, K, Rb, Cs (I группа табл. Менделеева)
 Момент по отношению к центру во внешней оболочке атома

Внешний электрон находится достаточно далеко по сравнению с основной электронной оболочкой атомного ядра. В первом приближении можно считать, что внешний электрон движется в поле ядра, состоящего из заряда Z и $(Z-1)$ атомных электронов



Полный заряд ядра - единичн, но не свл. точечным, а распределен по размеру ядра

На расстояниях, превыш. радиус атомного ядра, потенциал совпадает с потенциалом точечного заряда

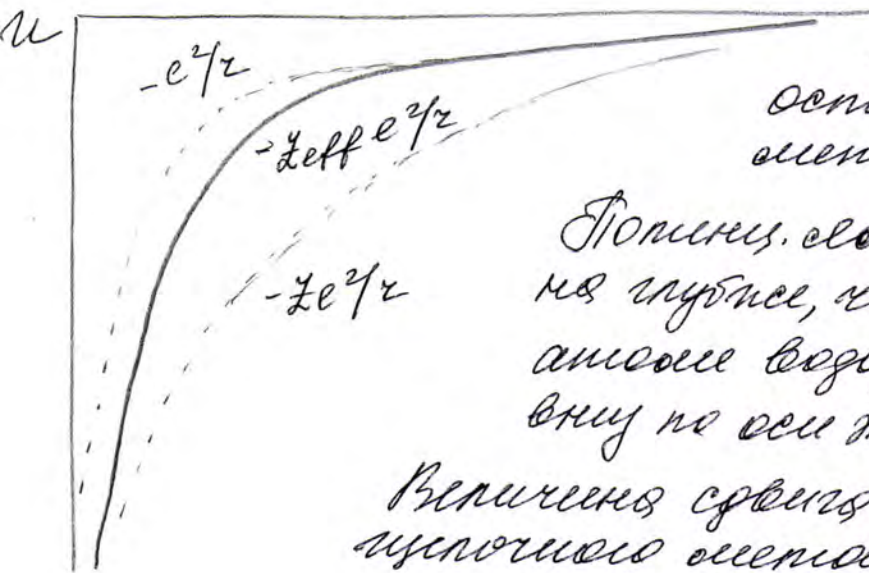
Вблизи атомного ядра проницает и потенциал определяется зарядом атом. ядра Z

$$U(r) = - \frac{Z_{eff}(r)e^2}{r}$$

Z_{eff} - эффективн. заряд, числов. степень экранировки ядра атомными электронами

Вид ф-ции $Z_{eff}(r)$ определяется распределением заряда по атомному ядру, однако, при r распредел. заряда она должна удовлетвор.

$$Z_{eff}(r) \rightarrow \begin{cases} 1, & r \rightarrow \infty \\ Z, & r \rightarrow 0 \end{cases}$$



Эффективн. потенциал, создаваемый атомными остовом в атоме щелоч. металла

Потенц. яма для тлго электрона глубже, чем для электрона в атоме водорода \Rightarrow уровни смест. вниз по оси энергии

Величина сдвига уровней в атоме щелочного металла:

$$\delta E_{nl} = \int R_{nl}(r) \delta U(r) r^2 dr$$

n, l - квант. числа внешнего электрона

$$\delta U = - \frac{(Z_{eff}(r) - 1)e^2}{r}$$

Наибольший поправк к энергии будет наст. для s -состояний, т.к. для них отсутств. центробеж. потенц. барьер, и электрон с наибол. вероятностью может оказаться внутри остова

По мере увелич. орбитального квант. числа центробеж. потенциал возрастает \Rightarrow уменьш. вер-те найти электрон внутри остова

В результате повышение уровня сдвиг. все большее к вырожденно аналог. уровня в атоме водорода

Полож. энергич. уровней в атомах щелоч. мет.:

$$E_{nl} = - \frac{R_y}{(n - \Delta_{nl})^2}$$

Δ_{nl} - квантовый дефект, зависящий от квант. чисел n и l

Полученный спектр водородоподобен

Следует учесть еще поляризацию атомного остова внешним электроном

Поляризация атома приводит к появлению у него наведенного дипольного момента и к дон. вращению типа "заряд-диполь"

С учетом э-тэ поляризации вращение потенциала в атомном атоме: $U(r) = -\frac{e^2}{r} - C_1 \frac{a_0 e^2}{r^2}$

C_1 определяет величину наведенного дипольного момента

Радиальное ур. Шредингера для ф-ции $u_{nl}(r) = r R_{nl}(r)$:

$$\frac{d^2 u_{nl}}{dr^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U_{\text{eff}}(r)) u_{nl} = 0 \quad (*)$$

$$U_{\text{eff}}(r) = -\frac{e^2}{r} - C_1 \frac{a_0 e^2}{r^2} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}$$

Поляризация добавляет к эффект. потенциалу не сфер. его вид

Поэтому, вводя эффект. орбитальное кв. число l^* , мы сможем записать его эф. потенциал:

$$U_{\text{eff}}(r) = -\frac{e^2}{r} + \frac{\hbar^2 l^*(l^*+1)}{2mr^2}$$

$$l^*(l^*+1) = l(l+1) - dC_1$$

Отсюда: $l^* = -\frac{1}{2} + \frac{1}{2} \sqrt{(2l+1)^2 - dC_1} \approx l - \frac{C_1}{l+1/2}$

Решение (*): $E_{nl} = -\frac{R_y}{(n_r + l^* + 1)^2}$

n_r - радиальное квант. число

Введем квантовый дефект в соотв. с $\Delta_l = \frac{C_1}{l+1/2} \Rightarrow$

\Rightarrow выражение для термич. спектра

$$E_{nl} = -\frac{R_y}{(n - \Delta_l)^2}$$

Существенное орбит. смещение величины кв. дефекта парад., и в пред. больших l мы переходим к спектру атома водорода

$\bar{\mu}_z$ и $\bar{\mu}_s$ прецессируют вокруг $\bar{J} \Rightarrow \bar{\mu}_z$ прецессирует вокруг \bar{J} .

Частота прецессии $\Omega = \frac{V_{hs}}{\hbar} \sim \frac{\lambda^2 R_y}{\hbar} \sim \lambda^2 \omega_{at}$ (радиоч. диапазон)

Это значит, что при воздействии атома слабым полем с ними взят усредненный по времени атомный маг. мом $\bar{\mu}_{eff} = -g \mu_B \bar{J}$

или g - атом g -фактор (Ландэ)

$$g = \frac{1}{\mu_B} \frac{(\bar{\mu}_{eff} \bar{J})}{\bar{J}^2} = \frac{1}{\mu_B} \frac{(\bar{\mu}_z \bar{J})}{\bar{J}^2}, \text{ выполнимая,}$$

что

$$\bar{\mu}_z = \bar{\mu}_L + \bar{\mu}_S = -\mu_B (\bar{L} + 2\bar{S}) = -\mu_B (\bar{J} + \bar{S}) \Rightarrow$$

$$g = \frac{(\bar{J} + \bar{S}, \bar{J})}{\bar{J}^2} = 1 + \frac{(\bar{S}, \bar{J})}{\bar{J}^2}$$

$$g = 1 + \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)}, \text{ в слабом маг. поле}$$

сост $2S+1$, расщепл.

по энергии на $2J+1$.

$g=0$ $\bar{\mu}_{eff}=0$ распол. взаимно \perp .

$g=1$ ($S=0$) $J=L$ - симметрич. сост.

Эффект Зеймана: расщепление линий излучения атома во внеш. М.П. $\Omega = \frac{eH}{2mc}$ - норм. эфф. Зеймана



$\omega_0 - l$ ω_0 $\omega_0 + l$

Три вет. Лоренца

Теорема: (слабое поле)

симметрич. переход $L_1 S_1 J_1$ и $L_2 S_2 J_2$.

энергии ат. сост ($E_{01} < E_{02}$) тогда

частота ат. перехода в отсутствие МП есть $\omega_0 = \frac{E_{02} - E_{01}}{\hbar}$. При

наличии МП каждое из сост расщепл. на $2J_1+1$ и $2J_2+1$.

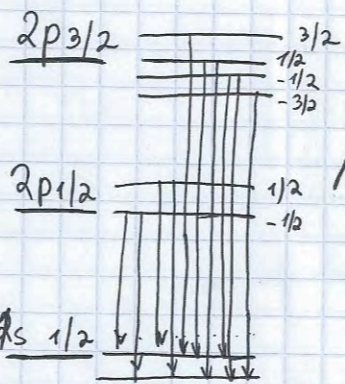
Энергии сост. подуровней опред.

$$\left. \begin{aligned} E_1 &= E_{01} + g_1 M_{J_1} \mu_B H \\ E_2 &= E_{02} + g_2 M_{J_2} \mu_B H \end{aligned} \right\} \Rightarrow \omega = \omega_0 + \frac{\mu_B H}{\hbar} (g_2 M_{J_2} - g_1 M_{J_1})$$

2

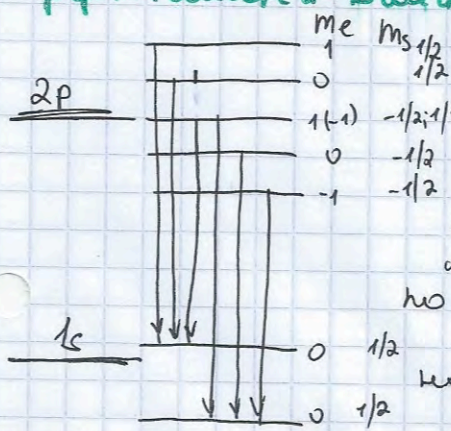
Бшмет 11 (прод)

полное число компонент $(g_2 M_{J_2} - g_1 M_{J_1})$
 правило отбора $\Delta M_y = M_{J_2} - M_{J_1} = 0; \pm 1$.
 \rightarrow при $g_1 = g_2 = 1$ - норм эфф. (переход м/ду сгнетерия)
 \rightarrow несоблюд. правил отбора для орбит и спин
 дивит $\vec{e} \Rightarrow$ фактомал. эфф.



для линии водорода H_α
 линии $2p_{1/2} \rightarrow 1s_{1/2}$
 расщеплены на 4 компонента,
 а линии $2p_{3/2} \rightarrow 1s_{1/2}$ - на
 6 компонент
 Общее число комп $n = 10$.

Эфф. Памена-Бамо



любая спектральная
 линия расщ. на нормал.
 триплет Лоренца, т.е. всегда
 Набл. норм эфф Зеймана -
 Эффр. Пам-Бамо
 где частота перехода в снл.
 магн. поле $\hbar\omega = \hbar\omega_0 + \mu_B H (\Delta M_l + 2\Delta M_s)$
 по прав отбора: $\Delta M_l = 0; \pm 1; \Delta M_s = 0$.
 $\Rightarrow \omega = \omega_0, \omega_0 \pm \Omega$, т.е.
 норм. триплет Лоренца

эфф П-Б на H_α - линии атом водорода Посломлю
 в-на того расщепи дидлето $2p_{1/2}; 3/2$
 сост $\frac{\Delta^2 R_y}{16}$, то эфф П-Б будет наблюд

$$\mu \gg \mu^{\alpha} = \frac{\Delta^2 R_y}{16 \mu_B} = 70^4 \text{ Э.}$$