

**МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ  
имени М.В.ЛОМОНОСОВА**

**ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ**

**НАУЧНО-ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ИНСТИТУТ  
ЯДЕРНОЙ ФИЗИКИ имени Д.В.СКОБЕЛЬЦЫНА**

**СБОРНИК ЗАДАЧ  
ПО АТОМНОЙ ФИЗИКЕ**

**Москва, 2008**

Настоящий сборник задач является учебным пособием по общему курсу «Атомной физики», читаемому студентам 3-его курса физического факультета МГУ. Сборник включает более 600 задач, предлагавшихся на семинарских занятиях по атомной физике, а также при проведении контроля качества обучения. Очередность содержания задач сборника отражает современную программу лекционного курса «Атомной физики», читаемого на физическом факультете МГУ. Сборник содержит большое число задач, посвященных истории развития квантовых представлений в первой четверти XX века, обсуждению основ математического формализма квантовой теории (координатное представление Шредингера) и анализу в рамках этого формализма строения одно- и многоэлектронных атомов, простейших молекулярных систем, а также изучению проблемы взаимодействия квантовых систем с внешним электромагнитным полем. В каждом разделе содержится определенное число задач повышенной трудности, а также задач, позволяющих познакомиться с современными проблемами атомной физики.

Для студентов физических специальностей университетов.

Авторами данного пособия являются следующие сотрудники кафедры атомной физики, физики плазмы и микроэлектроники физического факультета МГУ: Н.В.Кленов, С.С.Красильников, Е.А.Крылова, Е.М.Малыхин, М.А.Олеванов, А.М.Попов, О.В.Тихонова, В.В.Шорохов

## Содержание

<b>История развития квантовых представлений</b> .....	4
1. Равновесное электромагнитное излучение .....	4
2. Корпускулярные свойства излучения .....	8
3. Волны де Бройля. Соотношения неопределенностей.....	14
4. Модели атомов Томсона и Резерфорда.....	18
5. Модель Бора .....	20
<b>Основы формализма квантовой механики</b> .....	25
6. Основные понятия квантовой механики. Волновая функция. Операторы физических величин. Среднее значение и дисперсия физической величины. Собственные значения и собственные функции операторов физических величин.....	25
7. Стационарное уравнение Шредингера. Одномерные задачи .....	29
8. Туннельный эффект.....	34
9. Движение в центрально симметричном потенциальном поле. Задача Кеплера. Атом водорода.....	38
10. Основы стационарной теории возмущений. Системы из многих частиц .....	43
11. Нестационарное уравнение Шредингера.....	48
12. Нестационарная теория возмущений. Взаимодействие квантовой системы с электромагнитным полем .....	53
<b>Строение электронной оболочки атома</b> .....	59
13. Многоэлектронные атомы. Атомные оболочки и подоболочки. Электронная конфигурация. Сложение угловых моментов. Терм атома. Правила Хунда .....	59
14. Тонкая и сверхтонкая структура атомных спектров.....	64
15. Спектры атомов с одним оптическим электроном.....	69
16. Электромагнитные переходы в атомах. Правила отбора.....	73
17. Рентгеновские спектры .....	79
18. Эффекты Зеемана и Пашена – Бака. Опыт Штерна и Герлаха.....	81
19. Основы физики молекул.....	89
<b>Справочные данные</b> .....	90

## История развития квантовых представлений

### 1. Равновесное электромагнитное излучение.

1. Формула Планка - спектральное распределение плотности энергии равновесного излучения (абсолютно черного тела)

$$\rho_{\omega}(T) = \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3 (\exp(\hbar\omega/kT) - 1)} \left( \frac{\text{эрг} \cdot \text{с}}{\text{см}^3} \right), \quad (1.1)$$

где  $\omega$  - частота излучения,  $T$  - температура,  $k$  - постоянная Больцмана.

2. Спектральная интенсивность равновесного теплового излучения

$$I_{\omega}(T) = \frac{c}{4\pi} \rho_{\omega}(T) = \frac{\hbar\omega^3}{4\pi^3 c^2 (\exp(\hbar\omega/kT) - 1)} \left( \frac{\text{эрг}}{\text{см}^2} \right). \quad (1.2)$$

3. Закон смещения Вина

$$\hbar\omega_{\max} = 2.822 kT \quad (1.3)$$

или

$$\lambda_{\max} T = 0.29 \text{ см} \cdot \text{К} \quad (1.4)$$

где  $\omega_{\max}$  - частота, соответствующая максимуму спектрального распределения (1.1);  $\lambda_{\max}$  - длина волны, соответствующая максимуму спектрального распределения в шкале длин волн.

4. Интегральная по спектру плотность энергии равновесного излучения (закон Стефана - Больцмана)

$$u(T) = \int_0^{\infty} \rho_{\omega}(T) d\omega = \alpha T^4 \left( \frac{\text{эрг}}{\text{см}^3} \right) \quad (1.5)$$

где  $\alpha$  - объемная постоянная Стефана-Больцмана:

$$\alpha = \frac{\pi^2 k^4}{15 c^3 \hbar^3} = 7.57 \cdot 10^{-15} \left( \frac{\text{эрг}}{\text{см}^3 \text{ К}^4} \right). \quad (1.6)$$

5. Плотность потока энергии излучения с поверхности абсолютно черного тела (испускательная способность):

$$S(T) = \frac{c}{4} u(T) = \sigma T^4 \left( \frac{\text{эрг}}{\text{см}^2 \text{ с}} \right), \quad (1.7)$$

где  $\sigma$  - поверхностная постоянная Стефана-Больцмана:

$$\sigma = \frac{\pi^2 k^4}{60 c^2 \hbar^3} = 5.67 \cdot 10^{-5} \left( \frac{\text{эрг}}{\text{см}^2 \text{ с К}^4} \right). \quad (1.8)$$

6. Связь между энергией фотона  $E$ , частотой  $\omega$ , и длиной волны  $\lambda$ :

$$E = \hbar\omega = \frac{2\pi\hbar c}{\lambda} \quad (1.9)$$

1.1. Определить число различных типов колебаний (мод) электромагнитного поля в объеме  $V = L \times L \times L$ , ограниченном зеркальными стенками, в интервале частот  $(\omega, \omega + d\omega)$ .

1.2. (2-7). По теории Планка энергия осциллятора определяется соотношением  $E_n = n\hbar\omega$ ,  $n = 0, 1, 2, \dots$ . Допуская, что распределение осцилляторов по энергиям подчинено закону Больцмана, определить среднюю энергию осциллятора при данной температуре  $T$ .

1.3. Исходя из формулы Планка для спектральной плотности энергии равновесного электромагнитного излучения  $\rho_{\omega}$  получить:

а) зависимость объемной плотности энергии излучения от температуры (закон Стефана - Больцмана, формула (1.5))

б) связь между частотой, соответствующей максимуму  $\rho_{\omega}$ , и температурой (закон смещения Вина, формула (1.3)).

1.4. (2-8). Исходя из формулы Планка для спектральной плотности энергии излучения  $\rho_{\omega}$ , вычислить в законе Стефана-Больцмана постоянные для:

а) интегральной плотности энергии равновесного излучения  $\rho = \alpha T^4$ ;

б) интегральной испускательной способности  $S = \sigma T^4$ .

1.5. Исходя из формулы Планка для спектральной плотности энергии равновесного электромагнитного излучения  $\rho_{\omega}$ , получить связь между температурой излучения и интегральным по спектру числом фотонов в единице объема.

1.6. Найти зависимость средней по спектру энергии фотона от температуры.

1.7. (2-1). Исходя из выражения для спектральной плотности энергии равновесного электромагнитного излучения  $\rho_{\omega}$  в шкале частот, получите выражение для спектральной плотности излучения черного тела в шкале длин волн  $\rho_{\lambda}$ .

1.8. Исходя из формулы Планка для спектральной плотности энергии равновесного электромагнитного излучения  $\rho_{\lambda}$ , получить связь между длиной волны  $\lambda_{\max}$ , соответствующей максимуму  $\rho_{\lambda}$ , и температурой (закон смещения Вина).

1.9. (2-10). Исходя из формулы Планка для функции  $\rho_{\lambda}$ , определить постоянную  $B$  в законе смещения Вина  $\lambda_{\max} T = B$ . Определить также постоянную  $A$  для формулы Вина в шкале частот  $AT = \omega_{\max}$ . Показать,

что частота  $\omega^* = 2\pi c/\lambda_{\max}$ , не соответствует максимуму  $\omega_{\max}$  в шкале частот  $\omega^*/\omega_{\max} \cong 1.76$ . Объяснить причину отличия  $\omega_{\max}$  от  $\omega^*$ .

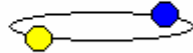
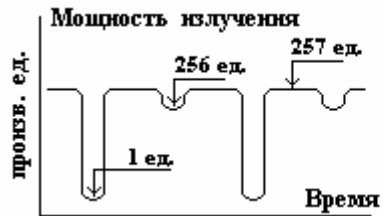
1.10. Найти  $\omega_{\max}$  и  $\omega^*$  (см. задачу 1.9) для равновесного излучения с температурой, соответствующей поверхности Солнца  $T = 5770$  К.

1.11. Радиус Солнца  $R = 7.0 \cdot 10^{10}$  см, а температура его поверхности  $T = 5770$  К. Оценить, используя закон Стефана-Больцмана, величину энергии, излучаемую Солнцем за 1 с.

1.12. Исходя из формулы Планка для спектральной плотности энергии равновесного электромагнитного излучения  $\rho_\omega$ , получить связь между температурой и плотностью потока энергии с поверхности черного тела (формула 1.7).

1.13. Определить солнечную постоянную  $\beta$  (плотность потока энергии солнечного излучения у поверхности Земли). Средний радиус земной орбиты  $r = 1.5 \cdot 10^{13}$  см.

1.14. (2-4). На рисунке изображено изменение мощности излучения двойной звезды в относительных единицах. Звезды имеют одинаковый диаметр и вращаются в плоскости, проходящей через наблюдателя. Мак-



симум мощности излучения темной - звезды приходится на длину волны  $2900 \text{ \AA}$  в распределении  $\rho_\lambda$ . Определите температуры звезд.

1.15. Оценить число фотонов равновесного электромагнитного излучения в единице объема при температуре:

а) 300 К, б) 3 К.

1.16. Оценить количество квантов равновесного электромагнитного излучения с энергией  $\hbar\omega > \hbar\omega_0 = 1$  эВ в единице объема при  $T = 300$  К.

1.17. Исходя из формулы Планка для спектральной плотности энергии равновесного электромагнитного излучения  $\rho_\omega$ , оценить число фотонов в единице объема в фиолетовой части спектра ( $\lambda < 3500 \text{ \AA}$ ). Температура излучения  $T = 1000$  К.

1.18. Оценить число квантов черного излучения в единице объема при температуре  $T = 1$  эВ в диапазоне частот  $\hbar\omega < \hbar\omega_0 = 0.1$  эВ.

1.19. На сколько градусов изменилась температура равновесного теплового излучения, если длина волны, соответствующая максимуму в спектре  $\lambda_{\max}$  увеличилась на  $\Delta\lambda = 260 \text{ нм}$ .

1.20. Как изменится средняя по спектру энергия кванта равновесного теплового излучения, если  $\lambda_{\max}$  уменьшится в 3 раза.

1.21. (2-17). Реликтовое излучение соответствует излучению абсолютно черного тела при температуре  $T = 2.7$  К. Определите:

а)  $\lambda_{\max}$  реликтового излучения;

б) число квантов  $N$  реликтового излучения в единице объема;

в) среднюю длину волны  $\langle\lambda\rangle$  реликтового излучения.

## 2. Корпускулярные свойства излучения.

1. Уравнение Эйнштейна для фотоэффекта:

$$\frac{mv_{\max}^2}{2} = \hbar\omega - A,$$

где  $A$  – работа выхода;  $m$ ,  $v_{\max}$  – масса и максимальная скорость фотоэлектрона.

2. Эффект Комптона.

Изменение длины волны при рассеянии:

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

Где  $\Lambda = 2\pi\hbar/mc = 2.42 \cdot 10^{-10}$  см – комптоновская длина волны электрона;  $\lambda_0$ ,  $\lambda$  – длины волн падающего и рассеянного фотона;  $\theta$  – угол рассеяния фотона.

Энергия рассеянного фотона:

$$E = \hbar\omega = \frac{\hbar\omega_0}{1 + \frac{\hbar\omega_0}{m_0c^2}(1 - \cos\theta)}.$$

Кинетическая энергия электрона отдачи:

$$W = mc^2 - m_0c^2 = \frac{\hbar\omega_0}{1 + \frac{m_0c^2}{\hbar\omega_0}(1 - \cos\theta)}.$$

3. Световое давление (при зеркальном отражении и нормальном падении)

$$p = \frac{I}{c}(1 + r),$$

где  $I$  – интенсивность света,  $r$  – коэффициент зеркального отражения,  $c$  – скорость света.

2.1. (2-18). Сколько солнечных фотонов попадает ежесекундно в зрачок глаза? Зрачок считать абсолютно черным, имеющим радиус  $R = 1$  мм.  $R_{\text{солнца}} = R_c = 7 \cdot 10^{10}$  см, средний радиус орбиты Земли вокруг Солнца  $R_{\text{орбиты}} = 1,5 \cdot 10^{13}$  см (см. задачу (1.13)).

2.2 (2-22). Какой скоростью должен обладать электрон, чтобы его энергия была равна энергии фотона с длиной волны  $\lambda = 912 \text{ \AA}$ ?

2.3. (2-26). Определить длину волны фотона, энергия которого равна энергии покоя электрона.

2.4. (2-20) Какой энергией должен обладать фотон, чтобы его импульс был равен импульсу электрона с кинетической энергией  $W = 100 \text{ эВ}$ ,  $1 \text{ МэВ}$ ?

2.5<sup>1</sup>. (2-24). В спектрах звезд наблюдается гравитационное «красное смещение». Оцените величину смещения линии  $H_{\alpha}$  водорода  $\lambda_0 = 6563 \text{ \AA}$  в спектре звезды сверхгиганта VV Кассиопеи, масса которой  $\tilde{M} = 57M$ , а радиус  $\tilde{R} = 34R$ , где  $M = 2 \cdot 10^{33}$  г,  $R = 7 \cdot 10^{10}$  см – масса и радиус Солнца.

2.6. Оцените угол отклонения фотона при пролете вблизи края Солнца;  $M = 2 \cdot 10^{33}$  г,  $R = 7 \cdot 10^{10}$  см – масса и радиус Солнца. Каким должен быть радиус небесного тела с массой Солнца, находящегося на расстоянии в одну а.е. (астрономическую единицу), чтобы можно было наблюдать звезду, проходящую за этим телом, не теряя ее из виду? Будет ли звезда изменять цвет при прохождении? Радиус земной орбиты  $R_o = 1.5 \cdot 10^{13}$  см.

2.7. (2-25). Звезда сверхгигант VV Кассиопеи А движется с лучевой скоростью  $v = 5 \cdot 10^9$  см/с. Определите величину отношения доплеровского смещения  $\Delta\lambda_{\text{доп}}$  к гравитационному красному смещению –  $\Delta\lambda_{\text{грав}}$  (масса, радиус звезды – смотри задачу 2.5).

2.8. В рамках классической электродинамики оценить среднее по времени значение кинетической энергии электрона, которое он приобретает в поле электромагнитной волны  $E = E_0 \cos\omega t$ . Электрон считать свободным.

2.9. (2-28). Показать, что при рассеянии на свободным электроном фотон не может передать ему всю свою энергию.

2.10. В классической работе А.Г.Столетова “Актино-электрические исследования” (1888г.) впервые были сформулированы основные законы фотоэффекта. Один из экспериментальных выводов звучал так: “Разряжающим действием обладают лучи самой высокой преломляемости, длина волны которых менее  $295 \cdot 10^{-6}$  мм”. Определить работу выхода электрона из металла, с которым работал А.Г.Столетов.

2.11. Известно, что фотоэлектроны, вырывающиеся с поверхности некоторого металла светом с частотой  $\nu = 2.2 \cdot 10^{15} \text{ с}^{-1}$ , полностью задерживаются обратным потенциалом  $U = 6,6 \text{ В}$ , а вырывающиеся светом с частотой  $\nu = 4.6 \cdot 10^{15} \text{ с}^{-1}$  – потенциалом в  $16,5 \text{ В}$ . По этим данным определить постоянную Планка  $h$ .

2.12. (2-23). Красная граница фотоэффекта для цезия равна  $\lambda^* = 6390 \text{ \AA}$ . Чему равна максимальная энергия фотоэлектронов, если падающее на цезиевый фотокатод излучение имеет длину волны  $\lambda^* = 912 \text{ \AA}$ .

<sup>1</sup> В задачах 2.5, 2.6 ввести понятие «массы» фотона  $m_{ph} = \hbar\omega/c^2$ .

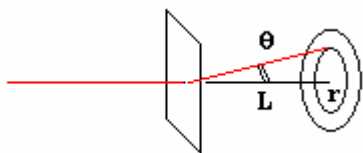
2.13. Когда длину волн света, освещающего поверхность некоторого металла, изменили с 0.35 мкм на 0.54 мкм, максимальная скорость фотоэлектронов уменьшилась в два раза. Найти работу выхода с поверхности этого металла.

2.14. На металлическую поверхность с работой выхода  $A = 3.6$  эВ воздействует электромагнитное поле  $E = E_0(1 + \cos \omega t) \cos \omega_0 t$  ( $E$  - напряженность электрического поля волны). Найти энергию фотоэлектронов, если  $\omega = 4.8 \cdot 10^{15} \text{ с}^{-1}$ ,  $\omega_0 = 6.4 \cdot 10^{15} \text{ с}^{-1}$ .

2.15. Оценить величину фототока с поверхности металла площадью  $S = 1 \text{ см}^2$  (работа выхода  $A = 4$  эВ) под действием излучения Солнца. Спектр излучения Солнца считать близким к спектру излучения черного тела с температурой  $T = 5700 \text{ К}$ . Считать величину квантового выхода фотоэффекта (вероятности вырывания электрона фотоном) не зависящей от длины волны и равной  $\eta = 0.01$ .

2.16. Производится облучение поверхности металла с работой выхода  $A_{\text{вых}} = 3$  эВ. Спектральный состав излучения источника соответствует равновесному тепловому с температурой  $T = 5700 \text{ К}$ . Найти среднюю энергию фотоэлектронов, считая, что вероятность вырывания электрона фотоном не зависит от длины волны излучения.

2.17. В опыте Томсона по наблюдению дифракции электронов на поликристаллической медной фольге радиус первого дифракционного кольца оказался равным  $r = 1 \text{ см}$ ; расстояние до экрана  $L = 10 \text{ см}$  (см. рис.). Рассеяние сопровождается тормозным рентгеновским излучением из мишени. Найти длину волны границы сплошного спектра тормозного излучения  $\lambda^*$ . Период



кристаллической решетки меди принять равным  $d = 3.6 \text{ \AA}$ .

2.18\*. (2-30). Определить энергию электрона отдачи при рассеянии на нем  $\gamma$ -кванта с энергией  $\hbar\omega_0 = 1 \text{ МэВ}$  на угол  $45^\circ$ .

2.19. При облучении вещества рентгеновским излучением обнаружено, что максимальная кинетическая энергия комптоновских электронов  $K_{\text{max}} = 0,511 \text{ МэВ}$ . Определить длину волны  $\lambda$ .

2.20. (2-34). Определить скорость электронов отдачи, если энергия  $\gamma$ -квантов после рассеяния на угол  $60^\circ$  равна  $\hbar\omega = 0,511 \text{ МэВ}$ .

2.21. (2-37). Определить величину комптоновского смещения, если начальная длина волны фотона  $\lambda_0 = 0,0242 \text{ \AA}$ , а скорость электрона отдачи определяется соотношением  $v/c = 0.6$ .

2.22. (2-35). Во сколько раз изменилась энергия  $\gamma$ -кванта, если рассеянный квант имеет наибольшую возможную длину волны? Начальная энергия кванта равна  $\hbar\omega_0 = 1,533 \text{ МэВ}$ .

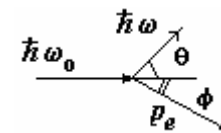
2.23. В опыте Комптона энергия падающего фотона распределяется поровну между рассеянным фотоном и электроном отдачи. Угол рассеяния равен  $\pi/2$ . Найти энергию и импульс рассеянного фотона.

2.24. Показать, что в опытах Комптона по изучению рассеяния рентгеновского излучения различными веществами интенсивность рассеянного излучения определяется электронной подсистемы твердого тела. Сравнить интенсивности света, рассеянного электронной и ядерной подсистемой твердого тела.

2.25. (2-36). Каким будет спектр  $\gamma$ -квантов  $^{60}\text{Co}$  ( $\hbar\omega_0 = 1,25 \text{ МэВ}$ ) после рассеяния на водороде на угол  $\pi/2$ .

2.26. Фотон испытал рассеяние на покоившемся свободном электро-не. Найти импульс налетавшего фотона, если энергия рассеянного фотона равна кинетической энергии электрона отдачи при угле  $90^\circ$  между направлениями их разлета.

2.27. В случае рассеяния кванта на свободном покоящемся электро-не на угол  $\theta$  найти угол вылета электрона  $\phi$  (см. рисунок).



Для случая  $\theta = \pi/2$  рассмотреть варианты  $\hbar\omega \gg mc^2$  и  $\hbar\omega \ll mc^2$ .

2.28. При рассеянии кванта на свободном покоящемся электро-не угол рассеяния кванта  $\theta$  и угол вылета электрона  $\phi$  (см. рисунок) оказались равны, причем  $\theta = \phi = \pi/4$ . Найти энергии квантов до и после рассеяния.

2.29. При рассеянии кванта с энергией  $1.022 \text{ МэВ}$  на свободном покоящемся электро-не угол вылета электрона  $\phi$  (см. рисунок) оказался таким, что  $\text{tg}(\phi) = 1/3$ . Найти угол рассеяния кванта  $\theta$ .

2.30. При рассеянии кванта на свободном покоящемся электро-не угол вылета электрона  $\phi$  (см. рисунок) оказался таким, что  $\text{tg}(\phi) = 1/2$ , а угол рассеяния кванта  $\theta = \pi/2$ . Найти энергию кванта.

2.31. В рамках классической электродинамики определить силу давления, действующую на свободный электрон в поле плоской электромагнитной волны.

2.32. (2-29). Первоначально покоившийся электрон под действием силы светового давления (см. задачу 2.32) начинает двигаться в направлении распространения световой волны. Определить доплеровское смещение при наблюдении под углом  $\theta$  относительно направления распространения волны. Считать скорость электрона  $v \ll c$ . Сравнить полученный результат с формулой Комптона. Длина волны излучения -  $\lambda_0$ .

\* В задачах 2.18 – 2.23 считать, что до рассеяния электрон покоится.

2.33. (2-33). Как изменится длина волны фотона спектральной линии  $Ly_{\alpha}$  ( $\lambda = 1216 \text{ \AA}$ ) атома водорода после рассеяния назад свободным покоящимся электроном?

2.34. (2-31). Определить энергию фотонов, рассеянных покоящимся свободным электроном на угол  $180^\circ$  в двух предельных случаях:

- при большой начальной энергии фотонов  $\hbar\omega \gg mc^2$ ;
- при малой начальной энергии фотонов  $\hbar\omega \ll mc^2$ .

Сделайте численные оценки для энергий фотонов 10 МэВ и 10 эВ.

2.35. (2-32). Определить долю энергии, передаваемой фотоном свободному покоящемуся электрону при комптоновском рассеянии назад. Найдите предел при высоких и низких энергиях фотонов. Сделайте численные оценки при энергиях квантов 255 МэВ, 0.255 МэВ и 10 эВ.

2.36. (2-38). Найти энергию фотона после рассеяния на электроне, двигавшемся навстречу фотону со скоростью  $v_0$ . Рассмотреть предел  $v \rightarrow c$  при рассеянии фотона назад.

2.37. (2-39). При каких начальных условиях в задаче 2.36 (2-38) рассеяние назад не изменяет энергии фотона?

2.38. (2-40). Определить изменение энергии электрона в условиях задачи 2.36 (2-38).

2.39. Излучение  $CO_2$  - лазера ( $\lambda_0 \approx 10 \text{ мкм}$ ) рассеивается на релятивистском электронном пучке с энергией  $E = 5 \text{ ГэВ}$ , движущемся навстречу. Какова длина волны излучения, рассеиваемого назад?

2.40. (2-27). Используя представление о световых квантах, показать, что давление света на освещенное тело определяется соотношением  $P = \rho(1+R)$ , совпадающим с выражением для давления света в классической электродинамике ( $\rho$  - плотность энергии излучения,  $R$  - коэффициент отражения).

2.41. (2-19). Найти силу давления излучения Солнца на Землю, считая, что все излучение поглощается.

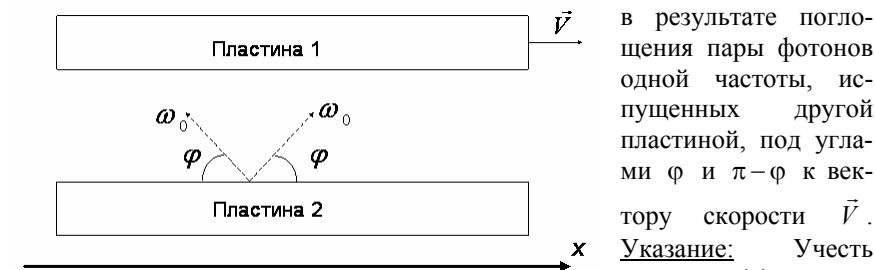
2.42. Какова должна быть плотность фотонов в вертикально распространяющемся световом пучке, чтобы диск массой  $m = 1 \text{ г}$  с зеркальной поверхностью и площадью поперечного сечения  $S = 10 \text{ см}^2$  висел в воздухе в поле тяжести Земли? Длина волны излучения  $\lambda = 5 \cdot 10^{-5} \text{ см}$ .

2.43. В известном опыте П.Н.Лебедева по изучению светового давления, экспериментальный прибор состоял из двух кружков, диаметром 0.5 см, закрепленных на легкой горизонтальной штанге. Штанга подвешивалась на тонкой упругой нити, которая крепилась к центру штанги. Расстояние от центра кружка до оси вращения было 0.92 см. Постоянная  $k$  момента кручения нити ( $M = k\alpha$ ), была равна  $2.2 \cdot 10^{-4} \text{ дин-см/рад}$ . Один из кружков был зачернен, а другой – зеркальный с коэффициентом отраже-

ния света 0.5. В эксперименте при падении света на зачерненный кружок, угол поворота нити был 10 угловых минут. Определить величину светового давления.

2.44. При какой температуре давление излучения термодинамически равновесной водородной плазмы сравняется с газокинетическим давлением? Плотность плазмы  $\rho = 1 \text{ г/см}^3$ .

2.45. В вакууме находятся две плоскопараллельные пластины, каждая из которых нагрета до температуры  $T$ . Пластины движутся с относительной скоростью  $\vec{V}$  (см. рис.) Найти изменение импульса одной из пластин



в результате поглощения пары фотонов одной частоты, испущенных другой пластиной, под углами  $\varphi$  и  $\pi - \varphi$  к вектору скорости  $\vec{V}$ .

Указание: Учет влияния эффекта До-

плера на эффективную частоту фотона, испущенного первой пластиной и «видимого» второй пластиной. Считать  $V/c \ll 1$ .

2.46. Найти выражение для силы бесконтактного трения, действующей между двумя плоскопараллельными пластинами в вакууме, нагретыми до температуры  $T$  и движущимися со скоростью  $V$  относительно друг друга (см. задачу (1.22)). Указание: Провести интегрирование результата, полученного в предыдущей задаче, по спектру излучения и углу вылета фотонов  $\varphi$ .

2.47. При аннигиляции нерелятивистской электрон – позитронной пары образовалось два  $\gamma$  - кванта ( $e^+ + e^- \rightarrow 2\gamma$ ). Определить направления их вылета и длины волн.

### 3. Волны де Бройля. Соотношения неопределенностей.

1. Соотношения де Бройля:

$$\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k} \quad E = \hbar \omega, \quad \lambda = \frac{h}{p} \quad (3.1)$$

где  $\lambda$  - длина волны, соответствующая частице, движущейся с импульсом

$\mathbf{p} = m\mathbf{v} / \sqrt{1 - (v/c)^2}$ , в частности, в нерелятивистском случае  $\mathbf{p} = m\mathbf{v}$ .

2.. Формула Вульфа-Брегга

$$2d \sin(\theta) = n\lambda, \quad (3.2)$$

где  $d$  - расстояние между кристаллическими плоскостями;  $\theta$  - угол скольжения;  $n = 0, 1, 2, \dots$  - порядок интерференции.

3. Соотношения неопределенностей для импульса и координаты частицы:

$$\Delta p_x \cdot \Delta x \geq \hbar, \quad \Delta p_y \cdot \Delta y \geq \hbar, \quad \Delta p_z \cdot \Delta z \geq \hbar; \quad (3.3)$$

для энергии и времени

$$\Delta E \cdot \tau \geq \hbar \quad (3.4)$$

3.1. При каких значениях кинетической энергии электрона его де Бройлевская длина волны меньше комптоновской длины волны?

3.2. При изучении фотоэффекта, оказалось, что де Бройлевская длина волны фотоэлектрона совпадает с длиной волны воздействующего излучения  $\lambda$ . Определить  $\lambda$ , если работа выхода материала  $A = 4$  эВ.

3.3. (2-56) Определить длину волны де Бройля, соответствующую среднеквадратичной скорости атомов гелия He и молекул водорода H<sub>2</sub> при температуре  $T = 5^\circ \text{K}$ .

3.4. (2-58) Определить де-бройлевские длины волн электронов, ускоренных до энергий  $W_1 = 1$  КэВ и  $W_2 = 1$  ГэВ.

3.5. Определить длины волн де Бройля для электронов и протонов с энергией 10 МэВ.

3.6. (2-60) При торможении электронов на антикатоде рентгеновской трубки возникает тормозное рентгеновское излучение; коротковолновая граница его спектра  $\lambda = 1$  Å. Определить де-бройлевскую длину волны электронов.

3.7. Найти разность величин длин волн де Бройля, вычисленных по релятивистским и нерелятивистским формулам для электрона и протона с кинетической энергией, равной удвоенной энергии покоя.

3.8. Выразить длину волны де Бройля  $\lambda_D$  релятивистской частицы через ее кинетическую энергию  $T$ . Нарисовать графики зависимости  $\lambda_D(T)$  в нерелятивистском пределе.

3.9. Выразить длину волны де Бройля  $\lambda_D$  релятивистской частицы через ее кинетическую энергию  $T$ . Нарисовать график зависимости  $\lambda_D(T)$  в ультрарелятивистском пределе.

3.10. Кинетическая энергия протона равна  $E_k = (\sqrt{2} - 1)M_p c^2$ . Какова его де-бройлевская длина волны?

3.11. Выразить длину волны де Бройля  $\lambda_D$  релятивистской частицы через ее полную энергию  $E$ . Нарисовать график зависимости  $\lambda_D(E)$  в ультрарелятивистском пределе.

3.12. В электронном микроскопе энергия пучка электронов  $E_e = 100$  кэВ. Определить его предельно возможную разрешающую способность.

3.13. На какую кинетическую энергию должен быть рассчитан ускоритель протонов, чтобы исследовать структуры с пространственным размером  $l = 1$  фм  $= 10^{-13}$  см.

3.14. Найти пространственно-временную структуру и оценить характерную пространственную ширину в некоторый момент времени  $t^*$  волнового пакета, описывающего состояние свободной нерелятивистской частицы и составленного из плоских волн де Бройля. Считать, что спектр волновых векторов является узким и лежит в малой окрестности  $\Delta k$  вблизи  $k_0$ . Ограничиться первым порядком в дисперсионной зависимости  $\omega(k)$ .

3.15. Используя гипотезу де Бройля, найти фазовую и групповую скорости волнового пакета, характеризующего свободную частицу. Рассмотреть релятивистский и нерелятивистский случаи.

3.16. (2-62) В экспериментах Мелленштедта и Иенсона наблюдалась дифракция пучка электронов на щели. Под каким углом обнаружатся первые дифракционные минимум и максимум, если энергия электронов, нормально падающих на щель шириной  $b = 6 \cdot 10^{-5}$  см, равна  $W = 40$  КэВ?

3.17. (2-63) Пучок электронов, ускоренных разностью потенциалов  $U = 128$  КэВ, дифрагирует на тонкой поликристаллической фольге. Радиус  $r$  первого кольца на экране, отстоящем от фольги на  $L = 10$  см, равен  $r = 0,15$  см. Определить период решетки в материале фольги.

3.18. (2-64) Параллельный пучок атомов натрия из печи с температурой  $T \cong 10^3$  К через коллиматорную щель попадает на экран, расположенный от щели на расстоянии  $L \cong 10^2$  см. Оценить ширину щели  $\ell$ , при которой ширина следа пучка на экране будет минимальной.

3.19. (2-68) Используя соотношение неопределенности, оцените кинетическую энергию частицы, локализованной в пространственной области размером  $L$ . Оцените кинетическую энергию электрона, локализован-



ного в области, имеющей размер атома  $\sim 10^{-8}$  см. Оцените также кинетическую энергию макрочастицы ( $m \sim 1$  г), локализованную в области размером  $L \sim 1$  см.

3.20. Электрон находится в бесконечно глубокой прямоугольной потенциальной яме размером  $a \times b$ . Оценить минимально возможное значение кинетической энергии электрона в случаях:

а)  $a = b = 1$  А; б)  $a = 1$  А,  $b = 1$  см.

3.21. Используя соотношение неопределенностей, оценить кинетическую энергию нуклона в атомном ядре (размер ядра  $R \sim 10^{-12}$  см).

3.22. (2-74) Исходя из соотношения неопределенностей Гейзенберга, доказать невозможность существования электрона внутри атомного ядра (размер ядра  $R \sim 10^{-12}$  см).

3.23. (2-73) Используя соотношение неопределенностей, оценить величину минимальной энергии линейного гармонического осциллятора (энергию нулевых колебаний).

3.24. Исходя из соотношения неопределенностей, оценить минимально возможную область пространственной локализации частицы, находящейся в силовом поле  $\vec{F} = -\beta\vec{r}$ .

3.25. Исходя из соотношения неопределенностей, оценить минимально возможную энергию частицы массы  $m$ , находящейся в потенциале  $V(x) = k/2(x - x_0)^2$ .

3.26. Исходя из соотношения неопределенностей, оценить энергию основного состояния атома водорода.

3.27. Исходя из соотношения неопределенностей, оценить характерный размер водородоподобного иона с зарядом  $Z$ .

3.28. Исходя из соотношения неопределенностей, оценить потенциал ионизации основного состояния водородоподобного иона с зарядом ядра  $Z$ .

3.29. Исходя из соотношения неопределенностей, получить условие, при выполнении которого частица массы  $m$  может удерживаться в прямоугольной сферически симметричной потенциальной яме радиуса  $R$  и глубины  $V_0$ .

3.30. Используя соотношение неопределенностей  $\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \hbar$ , оценить время, за которое ширина волнового пакета, описывающего состояние свободной частицы (электрона), увеличится вдвое. Начальная ширина пакета  $\Delta x_0 = 2$  А.

3.31. Ширина волнового пакета, описывающего состояние свободной частицы (электрона), за время  $\tau = 10^{-15}$  с увеличилась в 10 раз по сравнению

нию с начальной. Используя соотношение неопределенностей  $\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \hbar$ , определить начальную ширину волнового пакета  $\Delta x_0$ .

3.32. Характерная область локализации волнового пакета, описывающего состояние свободного электрона, в начальный момент времени порядка  $a_0$  (боровский радиус). Исходя из соотношения неопределенностей  $\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \hbar$ , определить зависимость ширины волнового пакета от времени на временах  $t \gg 10^{-12}$  с.

3.33. Ширина волнового пакета, описывающего состояние свободной частицы (протона), за время  $\tau = 10^{-15}$  с увеличилась в 2 раза по сравнению с начальной. Используя соотношение неопределенностей  $\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \hbar$ , определить начальную ширину волнового пакета  $\Delta x_0$ .

3.34. (2-53). Оценить размеры волнового пакета по истечении большого времени, если начальные параметры пакета заданы соотношением  $\Delta x_0 \cdot \Delta p_{x0} \sim \hbar$ . Каково время расплывания пакета до размеров порядка атомных, если начальный размер пакета порядка классического радиуса электрона  $r_e = e^2/mc^2$ .

3.35. (2-66). Типичное время жизни атома в обычном возбужденном состоянии порядка  $10^{-8}$  с, а время жизни атома в метастабильном состоянии может достигать величины порядка  $10^{-3}$  с. Оцените естественные ширины спектральных линий в ангстремах в области видимого спектра ( $\sim 6000$  Å) для этих случаев.

3.36. Ширина линии усиления кристалла титаната сапфира ( $Ti : Sapphire$ ) составляет  $\Delta\nu = 2 \cdot 10^{14}$  с $^{-1}$ . Оценить предельную длительность импульса генерации в лазере на кристалле  $Ti : Sapphire$ .

3.37. Длительность импульса излучения титан-сапфирового лазера (длина волны излучения  $\lambda = 800$  нм) составляет  $\tau \sim 10^{-14}$  с. Оценить степень монохроматичности излучения  $\Delta\lambda/\lambda$ .

3.38. Ширина спектра генерации Nd - лазера (длина волны излучения ( $\lambda \approx 1$  мкм) на стекле составляет  $\Delta\lambda = 30$  нм, а Nd - лазера на кристалле иттрий-алюминиевого граната (YAG) -  $\Delta\lambda = 0.7$  нм. Оценить предельно короткие длительности импульсов, которые можно получить в таких системах.

3.39. (2-75) В мезонной теории ядерных сил предполагается, что взаимодействие между нуклонами осуществляется посредством испускания одним из нуклонов и последующим поглощением вторым нуклоном частицы, переносчика взаимодействия, нейтрального или заряженного пиона ( $\pi^0, \pi^\pm$ ). Исходя из соотношения неопределенностей, оцените массу пиона. Радиус действия ядерных сил порядка  $R \approx 1.4 \cdot 10^{-13}$  см.

#### 4. Модели атомов Томсона и Резерфорда.

1. Формула Резерфорда.

Угол рассеяния при кулоновском взаимодействии

$$\operatorname{tg} \theta = \rho_{\perp} / \rho \quad (4.1)$$

где  $\rho = \rho(\theta)$  – прицельный параметр рассеяния на угол  $\theta$ ;

$$\rho_{\perp} (90^{\circ}) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{\mu v^2} \quad (4.2)$$

здесь  $Z_1, Z_2$  – заряды взаимодействующих частиц,  $\mu$  – приведенная масса,  $v$  – относительная скорость.

Дифференциальное сечение рассеяния (в единицу телесного угла  $\Omega$ ):

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{4} \rho_{\perp}^2 \frac{1}{\sin^4(\theta/2)} \quad (4.3)$$

4.1. Найти потенциал взаимодействия (потенциальную энергию) точечного заряда с однородно заряженным шаром радиуса  $R$ .

4.2. (3-1) По Томсону атом водорода представляет собой однородно заряженный шар радиусом  $R \sim 10^{-8}$  см с общим зарядом  $e = +4.8 \cdot 10^{-10}$  ед. заряда СГСЭ, внутри которого находится один электрон (в центре шара, если атом не возбужден). Найти частоту излучения такого атома.

4.3. Влияние классического излучения на траекторию ускоренно движущегося электрона может быть описано действием силы радиационного трения -  $\mathbf{f} = \frac{2e^2}{3c^3} \ddot{\mathbf{r}}$ . Оцените время излучения атома в рамках модели

Томсона.

Томсона.

4.4. Найти закон изменения энергии электрона во времени в рамках модели Томсона с учетом радиационного затухания.

4.5. Считая атом гармоническим осциллятором с частотой  $\omega_0$  (модель Томсона), определить частоты его излучения во внешнем однородном магнитном поле с напряженностью  $H$  (эффект Зеемана). Сделать численную оценку для  $H = 10^5$  Э.

4.6. Оценить максимальный угол рассеяния  $\alpha$  частиц с энергией  $E_{\alpha}$  на положительно заряженном шаре (заряд  $Ze$ ) радиуса  $R$ .  $E_{\alpha} = 5$  МэВ,  $Z=79$ ,  $R = 10^{-8}$  см.

4.7. При лобовом столкновении  $\alpha$ -частицы с энергией  $E = 4.32$  МэВ с однородно заряженным положительным шаром ( $Z=100$ ) угол рассеяния  $\theta$  оказался равным:

а)  $\theta=0$ ; б)  $\theta=\pi$ .

В обоих случаях найти радиус шара  $R$ .

4.8. В рамках классической электродинамики определить спектральную интенсивность тормозного рентгеновского излучения возникающего при рассеянии быстрой заряженной частицы с энергией  $E$  в поле ядра с зарядом  $Z$ . Считать, что  $E \gg Ze^2/b$ ,  $b$  – прицельный параметр.

*Указание:* Траекторию движения частицы можно приближенно считать прямолинейной.

4.9. (2-47) Оценить энергию, передаваемую при столкновении быстрой альфа-частицей покоящемуся электрону в атоме Томсона. Траекторию альфа-частицы считать прямолинейной; смещением электрона за время пролета альфа-частицы пренебречь. Прицельный параметр  $\rho \sim 10^{-8}$  см.

4.10. В опыте Резерфорда производилось облучение тонкой золотой ( $Z = 79$ ) фольги пучком  $\alpha$  частиц с энергией 4.5 МэВ. Экспериментально было установлено, что небольшое число частиц отклоняется на углы  $\geq \pi/2$ . Пользуясь результатом опыта Резерфорда, оцените размер ядра атома.

4.11. (3-2) Протоны,  $\alpha$ -частицы и ядра лития, ускоренные одной и той же разностью потенциалов, проходят через тонкую платиновую фольгу. Какие из этих частиц будут сильнее всего рассеиваться?

4.12. (3-4) При соударении с ядром атома плутония  $\alpha$ -частица с энергией  $W = 1$  МэВ отклоняется на угол  $\theta = \pi/2$ . Определите минимальное расстояние, на которое сблизилась частица.

4.13. Найти вероятность рассеяния “назад” (на углы  $\theta > \pi/2$ )  $\alpha$ -частиц с энергией 4.5 МэВ на золотой фольге толщиной 1 мк.

4.14. (3-8) С каким прицельным параметром  $\rho$  должна лететь  $\alpha$ -частица с энергией  $W = 2.87$  МэВ, чтобы рассеяться на угол  $\theta = \pi/2$ :

а) на бесконечно тяжелом ядре с зарядом  $Z = 20$ ;

б) на ядре  ${}^{40}_{20}\text{Ca}$ ?

4.15. (3-27) Согласно представлениям классической физики, электрон, движущийся вокруг ядра с ускорением, излучает, теряя энергию. Покажите, что энергия, излучаемая электроном за один оборот мала по сравнению с его энергией. Для атома водорода найдите зависимость радиуса орбиты и энергии от времени, а также время падения электрона на ядро. Начальный радиус орбиты считайте заданным и равным  $R_0 \sim 10^{-8}$  см.

## 5. Модель Бора

### 1. Постулаты Бора.

Условие частот Бора

$$\hbar\omega_{mn} = E_m - E_n, \quad (5.1)$$

где  $\omega_{mn}$  - частота перехода  $m \rightarrow n$ ;  $E_m, E_n$  - энергии уровней с квантовыми числами  $m$  и  $n$ .

Условие квантования Бора-Зоммерфельда

$$L = \oint p_i dq_i = 2\pi n_i \hbar \quad (5.2)$$

где  $p_i, q_i$  - обобщенные импульс и координата, интегрирование проводится по периоду движения относительно обобщенной координаты  $q_i$ .

В случае круговых орбит ( $q_i = \varphi, p_i = mvr$  формула (5.2) дает

$$L = mvr = n\hbar \quad (5.3)$$

### 2. Формула Бальмера. Спектральные серии водородоподобного иона в предположении бесконечной массы ядра:

$$\frac{1}{\lambda_{mn}} = Z^2 R \left( \frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right) \quad (5.4)$$

Здесь  $\lambda_{mn}$  - длина волны для перехода  $m \rightarrow n$ ;  $Z$  - заряд ядра;

$R = 109737.31568549 \text{ см}^{-1}$  - постоянная Ридберга.

Спектральные серии :

- $n = 1$  - серия Лаймана,
- $n = 2$  - серия Бальмера,
- $n = 3$  - серия Пашена,
- $n = 4$  - серия Брэкета,
- $n = 5$  - серия Пфунда,
- $n = 6$  - серия Хэмфри,
- $n = 7$  - серия Хансена-Стронга

5.1. Опираясь на планетарную модель атома и принцип соответствия Бора покажите что для водородоподобного иона с зарядом ядра  $Z$  момент импульса кратен постоянной Планка:  $L = mvr = n\hbar$ , а энергии уровней равны  $E_n = -Z^2 Ry/n^2$ .

5.2. Получить **необходимое и достаточное** условие существования круговых орбит (хотя бы одной) в рамках модели Бора в притягивающих потенциалах  $U(r)$  вида:

- а)  $U(r) = kr^2/2$  – гармонический осциллятор ;
- б)  $U(r) = -Ze^2/r$  – кулоновский потенциал;
- в)  $U(r) = kr$ ;
- г)  $U(r) = -U_0 \exp(-r^2/a^2)$ ,  $a$  – радиус действия сил;  $U_0 > 0$ .

5.3. Вычислить напряженность  $\mathcal{E}$  электрического поля на первой боровской орбите в атоме водорода.

5.4. Вычислить напряженность  $\mathcal{H}$  магнитного поля в месте расположения ядра в атоме водорода.

5.5. Найти динамические параметры всех круговых орбит электрона в атоме водорода: радиусы, скорости, энергии, частоты и периоды обращения, релятивистский параметр  $v/c$ . Массу ядра считать бесконечно большой.

5.6. Сравнить  $\omega_n$  - частоту обращения электрона на боровской орбите в атоме водорода с частотой  $\omega_{n+1,n}$  кванта, излучаемого при переходе из состояния  $n+1$  в состояние  $n$ . Рассмотреть случаи:

- а)  $n \gg 1$ ;
- б)  $n \sim 1$ .

5.7. Считая электрон релятивистским вычислить (по Бору) его скорости, радиусы орбит и уровни энергии для водородоподобного иона. Массу ядра считать бесконечно большой.

5.8. Определить релятивистскую поправку к положению энергетических уровней водородоподобного иона с зарядом ядра  $Z$ . Считать  $\alpha Z \ll 1$ .  $\alpha$  - постоянная тонкой структуры.

5.9. Считая массу ядра бесконечной, показать что в спектрах атома H и иона  $\text{He}^+$  есть множество линий равных длин волн.

5.10. Последовательность длин волн линий в спектральной серии некоторого элемента определяется соотношением (серия Пикеринга)

$$\frac{1}{\lambda_n} = R \left( \frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad n = 2.5, 3, 3.5, 4, \dots$$

Определить, что это за элемент, и переходам между какими уровнями соответствует данная серия.

5.11. В излучении газоразрядной трубки с неизвестным газом наблюдается серия спектральных линий с длинами волн, определяемыми соотношением:  $1/\lambda_n = R(1 - 1/n^2)$ , где  $n = 4/3, 5/3, 6/3, 7/3, 8/3, 9/3$  и т. д. Определите, каким газом наполнена трубка.

5.12. Найти для ионов  $\text{He}^+$  и  $\text{Li}^{++}$  радиусы орбиты  $r_n$ , уровни энергии  $E_n$  и длины волн резонансных линий  $\lambda$ :  $n=2 \rightarrow n=1$ . Массу ядра считать бесконечно большой.

5.13. Изобразите на шкале длин волн положение серий Лаймана, Бальмера и Пашена атома водорода. Для этого определите длины волн  $\lambda_\alpha$  головных линий и пределы серий  $\lambda_\infty$  сплошных спектров этих серий.

5.14. Какую скорость и кинетическую энергию приобретает покоящийся атом водорода, испустив квант  $L_{\gamma_\alpha}$ ? Определить длину волны с учетом отдачи атома.

5.15. Найти длины волн квантов, способных фотоионизовать водородоподобный ион  $\text{He}^+$ ; (фотоэффект  $\text{He}^+ + \hbar\omega \rightarrow \text{He}^{++} + e$ )?

5.16. Фотон с длиной волны а)  $\lambda = 500 \text{ \AA}$ , б)  $\lambda = 0.024 \text{ \AA}$  вырывает электрон из атома водорода. Чему равна скорость вырванного электрона?

5.17. В экспериментах определены постоянные Ридберга для водорода  $R_H = 109678.58 \text{ см}^{-1}$  и его изотопа - дейтерия  $R_H = 109708.596 \text{ см}^{-1}$ . Чему равна масса электрона?

5.18. Найти изотопический сдвиг ( в  $\text{\AA}$  ) для  $\alpha$  - линий серии Лаймана ( $Ly_\alpha$ ) трех изотопов водорода, ионов  $^3\text{He}^+$  и  $^4\text{He}^+$ ,  $^{19}\text{Ne}^{9+}$  и  $^{20}\text{Ne}^{9+}$ .

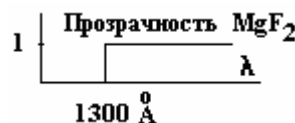
5.19. Найдите предельное значение изотопического расщепления  $\Delta\lambda_n$  спектральных линий серий Бальмера  $n \rightarrow 2$  атомов водорода и дейтерия при  $n \rightarrow \infty$ .

5.20. Найти динамические параметры всех круговых орбит в атоме позитрония: радиусы, скорости, энергии, частоты и периоды обращения, релятивистский параметр  $v/c$ .

5.21. Найти динамические параметры всех круговых орбит в системе протон-антипротон  $p\bar{p}$ : радиусы, скорости, энергии, частоты и периоды обращения, релятивистский параметр  $v/c$ .

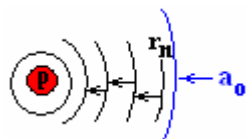
5.22. В полупроводнике электрон и дырка могут объединяться в экситон – электрически нейтральное образование, аналогичное атому водорода (экситон Ванье-Мотта). Определить радиус и энергию первой бордовской орбиты и энергию связи экситона в кремнии (диэлектрическая проницаемость  $\epsilon = 12$ ). Эффективные массы электрона и дырки в кремнии одинаковы  $m^* = 0.25m_e$ .

5.23. Пригоден ли спектрограф с оптическими элементами, изготовленными из  $\text{MgF}_2$ , для наблюдения **полных спектров** атома водорода и атома позитрония  $e^+e^-$ ? Материал  $\text{MgF}_2$  прозрачен для излучения с длинами волн  $\lambda > 1300 \text{ \AA}$ .



5.24. Протон и мюон могут образовывать водородоподобную систему называемую мезоатомом. Масса мюона равна 207 электронным массам, а его заряд равен заряду электрона. Найти (в рамках модели круговых орбит) радиусы, скорости и уровни энергии этой системы.

5.25. Мезоатом  $\mu - p$  (масса мюона  $\mu = 207 m_e$ ) образуется при торможении  $\mu$  - мезона в жидком водороде. Мезон «садится» на орбиту, радиус  $r_n$  которой равен радиусу орбиты электрона в основном состоянии (см. рис.). Затем происходит каскад переходов мезона  $n \rightarrow n - 1 \rightarrow n - 2 \rightarrow \dots \rightarrow 3 \rightarrow 2 \rightarrow 1$ . Найдутся ли среди испущенных при переходах квантов кванты



видимого диапазона с длиной волны  $\lambda \sim 4000 \text{ \AA} - 7000 \text{ \AA}$ ?

5.26. Найти уровни энергии электрона в поле однородно заряженного положительного массивного шара с радиусом  $2a_0$  ( $a_0$  – борковский радиус).

5.27. Сколько уровней энергии может иметь электрон, находясь **внутри** однородно заряженного положительного массивного шара с радиусом  $2a_0$  ( $a_0$  – борковский радиус).

5.28. Какой радиус должно иметь ядро атома водорода, чтобы уровень  $n = 1$  имел энергию, отличную от уровня энергии  $n = 1$  боровского атома.

5.29. Какой заряд  $Z^*$  должно иметь ядро атома, чтобы орбита мюона погрузилась в ядро? Радиус ядра  $R \sim 1.2 \cdot 10^{-13} \cdot A^{1/3}$ ,  $A$  - массовое число, считать  $Z \sim 0.4 \cdot A$ .

5.30. Найти уровни энергии мюона внутри ядра с зарядом  $Z > Z^*$  (см. задачу 5.29).

5.31. Сколько уровней энергии может иметь пара частиц с массами  $m_1$  и  $m_2$ , связанных потенциалом  $U(r) = -U_0 \exp(-r^2/a^2)$ ? Сделайте оценку для дейтрона, считая орбиту круговой и полагая  $U_0 \sim 50 \text{ МэВ}$ ,  $a \sim 10^{-13} \text{ см}$ .

5.32. Найти (приближенно) низший уровень энергии частицы (масса -  $m$ ) на круговой орбите в глубокой потенциальной яме вида  $U(r) = -U_0 \exp(-r^2/a^2)$ , считая  $U_0 \gg \hbar^2/2ma^2$ .

5.33. Найти уровни энергии частицы (масса -  $m$ ) в потенциале  $U(r) = U_0 \cdot r/a$ . Орбиту считать круговой.

5.34. Найти уровни энергии сферически симметричного гармонического осциллятора,  $U(r) = kr^2/2$ .

5.35. Квантование электронных орбит в ионе молекулы водорода  $H_2^+$ . Считая, что электрон движется в плоскости, перпендикулярной отрезку, соединяющему ядра молекулы, и делящей этот отрезок пополам, определить радиусы разрешенных электронных орбит, используя постулат квантования Бора. Определить разрешенные уровни энергии. Для основного энергетического состояния определить расстояние между ядрами, соответствующее минимуму полной энергии молекулы.

5.36. Правила квантования Бора-Зоммерфельда вводят в задачу Кеплера квантовое число  $\ell$  углового момента  $L = \ell \hbar$  и радиальное квантовое число  $n_r$ . Радиальный интеграл после приведения к виду

$$n_r \hbar = \oint p_r(r) dr = 2L \int_0^\pi \left( \frac{1}{r(\varphi)} \frac{dr(\varphi)}{d\varphi} \right)^2 d\varphi$$

$$r(\varphi) \text{ оказывается равным } n_r \hbar = 2\pi L \left( \frac{1}{\sqrt{1-\epsilon^2}} - 1 \right); \epsilon - \text{ эксцентриситет ор-}$$

биты. Выразите энергию допустимых состояний электрона в атоме водорода через квантовые числа  $\ell$  и  $n_r$ .

5.37. Найти наименьшее  $r_{min}$  и наибольшее  $r_{max}$  удаление электрона от ядра в атоме водорода для эллиптической орбиты  $n \gg 1$  и моментом импульса, равным  $\ell \hbar$ .

5.38. Найти наименьшее  $r_{min}$  и наибольшее  $r_{max}$  удаление электрона от ядра в атоме водорода для эллиптической орбиты  $n \gg 1$  и моментом импульса, равным  $\hbar$ .

5.39. Найти наименьшее  $r_{min}$  и наибольшее  $r_{max}$  удаление электрона от ядра в атоме водорода для эллиптической орбиты  $n \gg 1$  и моментом импульса, равным  $(n-1)\hbar$ . Определите величину изменения радиуса  $\Delta r = r_{max} - r_{min}$ .

5.40. Считая что электрон в атоме излучает классически, найдите время «падения» электрона на ядро. Сравнить полученное время с периодом обращения электрона по орбите. Заряд ядра  $-Z$ , начальный радиус  $-a_0 n^2$ .

5.41. Используя решение задачи 4.15, найдите время «падения» электрона из состояния с главным квантовым числом  $n_1$  в состояние  $n_2$ . Считайте, что  $n_1 \gg n_2 \gg 1$ . Заряд ядра  $-Z$ . Это время может служить оценкой вероятности перехода в единицу времени.

5.42. Оценить время «падения» мюона на ядро в мюоном атоме водорода, считая, что мюон находится на орбите с номером  $n$ . Сравнить полученное время с периодом обращения электрона по орбите и временем жизни мюона  $\tau_\mu \cong 2.2 \text{ мкс}$ .

5.43. Воспользовавшись условием квантования Бора – Зоммерфельда, определить уровни энергии частицы в одномерной бесконечно глубокой прямоугольной потенциальной яме шириной  $a$ .

5.44. Воспользовавшись условием квантования Бора – Зоммерфельда, определить уровни энергии частицы в одномерном гармоническом потенциале  $V = m\omega^2 x^2 / 2$ .

5-45. Воспользовавшись условием квантования Бора - Зоммерфельда, найти уровни энергии упруго подпрыгивающего шарика с массой  $m$  в поле тяготения Земли. Сделайте численную оценку для нейтрона.

### Основы формализма квантовой механики

**6. Основные понятия квантовой механики. Волновая функция. Операторы физических величин. Среднее значение и дисперсия физической величины. Собственные значения и собственные функции операторов физических величин.**

1. Состояние микросистемы характеризуется волновой функцией  $\psi(\vec{r}, t)$ .

Величина  $\rho(\vec{r}, t)d^3r = |\psi(\vec{r}, t)|^2 d^3r$  есть вероятность обнаружить частицу в объеме  $d^3r$  вблизи точки с координатой  $\vec{r}$  в момент времени  $t$ .

2. Волновая функция, описывающая какое-либо состояние частицы, нормирована согласно условию:

$$\int |\psi(\vec{r}, t)|^2 d^3r = 1.$$

3. Эволюция состояния во времени определяется нестационарным уравнением Шредингера

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

4. В квантовой механике каждой физической величине  $A$  по некоторому закону ставится в соответствие оператор  $\hat{A}$ . Измеряемые в эксперименте значения величины  $A$  принадлежат спектру собственных значений оператора  $\hat{A}$ .

5. Среднее значение и дисперсия величины  $A$  в состоянии  $\psi(\vec{r}, t)$ :

$$\langle A \rangle = \int \psi^*(\vec{r}, t) \cdot \hat{A} \psi(\vec{r}, t) d^3r,$$

$$D_A = \langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle = \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2$$

6. Операторы некоторых физических величин:

координаты  $\hat{r} = \vec{r}$ , т.е.  $\hat{r} \psi(\vec{r}, t) = \vec{r} \psi(\vec{r}, t)$ ;

импульса  $\hat{p} = -i\hbar \nabla$ , т.е.  $\hat{p} \psi(\vec{r}, t) = -i\hbar \nabla \psi(\vec{r}, t)$ ;

момента импульса  $\hat{L} = [\hat{r} \times \hat{p}] = -i\hbar [\vec{r} \times \nabla]$ ;

оператор квадрата момента импульса  $\hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2 = -\hbar^2 \Delta_{\text{угл}}$ , ( $\Delta_{\text{угл}}$  - угловая часть оператора Лапласа);

оператор  $z$  - проекции момента импульса (в сферической системе координат)  $\hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}$ ;

$$\hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi};$$

кинетической энергии  $\hat{T} = \hat{p}^2 / 2m = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2$ ;

потенциальной энергии  $\hat{V}(\vec{r}, t) = V(\vec{r}, t)$ ;

полной энергии (гамильтониан)  $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\vec{r}, t)$ .

7. Коммутатором  $[\hat{A}, \hat{B}]$  двух операторов  $\hat{A}$  и  $\hat{B}$  называется оператор  $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$ .

6.1. В некоторый момент времени состояние электрона характеризуется волновой функцией

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{a\sqrt{\pi}}} \exp\left(-\frac{1}{2}(x/a)^2\right).$$

Определить средние значения и дисперсии координаты и импульса электрона.

6.2. Решить предыдущую задачу для состояния частицы, описываемого волновой функцией

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{a\sqrt{\pi}}} \cdot \exp(ik_0x) \cdot \exp\left(-\frac{1}{2} \frac{(x-x_0)^2}{a^2}\right).$$

6.3. Волновая функция основного состояния атома водорода имеет вид  $\psi(r) = A \exp(-r/a_0)$ ,  $A$  - нормировочная константа,  $a_0$  - боровский радиус. Определить средние значения потенциальной и кинетической энергии электрона этом состоянии.

6.4. Основное состояние частицы в потенциале одномерного гармонического осциллятора  $V(x) = m\omega^2 x^2/2$  описывается волновой функцией  $\psi(x) = A \exp(-\frac{1}{2}(x/a)^2)$ , где  $A$  - нормировочная константа,  $a = \sqrt{\hbar/m\omega}$ . Определить средние значения кинетической и потенциальной энергии частицы.

6.5. Определить собственные значения и собственные функции операторов импульса  $\hat{p}_x = -i\hbar \frac{d}{dx}$  и  $z$ - проекции момента количества движения  $\hat{L}_z = -i\hbar \frac{d}{d\varphi}$ .

6.6. Определить собственные значения и собственные функции оператора кинетической энергии  $\hat{T}_x = \hat{p}_x^2/2m$ .

6.7. Записать волновую функцию, описывающую состояние свободной частицы с точно определенными значениями энергии и импульса. Рассмотреть одномерный случай.

6.8. Записать волновую функцию, описывающую состояние свободной частицы с точно определенным значением энергии, не являющуюся собственной функцией для оператора  $\hat{p}_x$ . Чему равно среднее значение  $p_x$  в этом случае? Рассмотреть одномерный случай.

6.9. Вычислить значения следующих коммутаторов:  $[\hat{x}, \hat{p}_x]$ ,  $[\hat{x}, \hat{p}_y]$ .

6.10. Доказать справедливость следующих коммутационных соотношений для оператора момента количества движения

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar \hat{L}_z, [\hat{L}_y, \hat{L}_z] = i\hbar \hat{L}_x, [\hat{L}_z, \hat{L}_x] = i\hbar \hat{L}_y, [\hat{L}^2, \hat{L}_z] = 0.$$

6.11. Доказать, что в центрально симметричном потенциале можно найти стационарные состояния, которые характеризуются точно определенными значениями квадрата  $L^2$  и  $z$ - проекции  $L_z$  момента количества движения.

6.12. Может ли так быть, что в одном и том же состоянии импульс и полная энергия имеют точно определенные значения?

6.13. Показать, что в системе с аксиальной симметрией (например, электронная подсистема двухатомной молекулы) стационарные состояния можно характеризовать определенным значением проекции орбитального момента на ось системы.

6.14. Показать, что для гауссова волнового пакета произведение дисперсий импульса и координаты минимально.

6.15. Состояние частицы определяется волновой функцией

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{a\sqrt{\pi}}} \cdot \exp(ik_0x) \cdot \exp\left(-\frac{1}{2} \frac{(x-x_0)^2}{a^2}\right).$$

Определить плотность вероятности распределения по импульсу  $W(p)$ .

6.16. Волновая функция состояния некоторой квантовой системы, как функция полярного угла, имеет вид ( $B$  - нормировочная константа):

а)  $\psi(\varphi) = B \cos \varphi$ ,

б)  $\psi(\varphi) = B \sin^2 3\varphi$ ,

в)  $\psi(\varphi) = B \cos^4 \varphi$ .

Какие значения  $z$ -проекции момента количества движения  $L_z$  могут быть измерены в этом состоянии? Каковы вероятности их измерения и среднее значение  $L_z$ ?

6.17. Волновая функция некоторой системы в сферических координатах определяется выражением ( $A$  - нормировочная константа):

а)  $\psi(r, \theta, \varphi) = AR(r) \sin \theta \cos \varphi$ ,

б)  $\psi(r, \theta, \varphi) = AR(r) \sin(2\theta) \cos(\varphi)$ ,

$$в) \psi(r, \theta, \varphi) = AR(r) \cos(\theta)(1 + \sin(\theta) \sin(\varphi)),$$

$$г) \psi(r, \theta, \varphi) = AR(r)(1 + \cos(\theta)),$$

$$д) \psi(r, \theta, \varphi) = AR(r) \sin^2 \theta \sin 2\varphi,$$

$$е) \psi(r, \theta, \varphi) = AR(r) (\sin^2 \theta \cos^2 \varphi - \cos 2\theta),$$

причем  $\int_0^{\infty} R^2(r) r^2 dr = 1$ . Какие значения квадрата и  $z$ -проекции момента

импульса  $L^2$  и  $L_z$  могут быть измерены в этом состоянии? Каковы вероятности их измерения и средние значения?

6.18. Волновая функция некоторой системы в сферических координатах определяется выражением

$$\psi(r, \theta, \varphi) = R(r, \theta) \cdot \frac{\sin \varphi}{\sqrt{\pi}}.$$

Какие значения  $z$ - проекции момента количества движения и с какой вероятностью могут быть измерены в этом состоянии? Каковы среднее значение и дисперсия величины  $L_z$ ?

6.19. В сферической системе координат  $(r, \theta, \varphi)$  волновая функция электрона имеет вид

$$\psi(r, \theta, \varphi) = R(r) \cdot \sqrt{3/4\pi} \cdot \sin \theta \cdot \cos \varphi.$$

Какие и с какой вероятностью значения  $z$ -проекции момента количества движения и квадрата момента количества движения могут быть измерены в этом состоянии? Определить среднее значение и дисперсию величин  $L_z$  и  $L^2$ .

6.20. При измерении  $L_z$  в некотором состоянии получили средние значения а)  $\langle L_z \rangle = \hbar/2$ ; б)  $\langle L_z \rangle = 3\hbar/7$ ; в)  $\langle L_z \rangle = -\hbar/2$ ; г)  $\langle L_z \rangle = -4\hbar/5$ . Напишите хотя бы одну волновую функцию, которая описывала бы такое состояние системы.

## 7. Стационарное уравнение Шредингера. Одномерные задачи.

1. Стационарное уравнение Шредингера (дискретный энергетический спектр):

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \varphi_n(\vec{r}) + V(\vec{r}) \varphi_n(\vec{r}) = E_n \varphi_n(\vec{r}),$$

где  $E_n$  - энергия стационарного состояния, а потенциал  $V(\vec{r})$  полагается независимым от времени.

Общий вид волновой функции, описывающей эволюцию стационарного состояния во времени:

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

где  $\varphi_n(\vec{r})$  - координатная часть волновой функции.

2. Волновая функция произвольного состояния системы  $\Psi(\vec{r})$  может быть представлена в виде линейной комбинации стационарных состояний системы

$$\Psi(\vec{r}) = \sum_n C_n \varphi_n(\vec{r}).$$

3. Энергетические уровни и волновые функции стационарных состояний одномерного гармонического осциллятора:

$$E_n = \hbar\omega(n + 1/2), \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

$$\varphi_n(x) = N_n H_n(x/a) \exp\left(-\frac{1}{2} \left(\frac{x}{a}\right)^2\right)$$

где  $a = \sqrt{\hbar/m\omega}$ ,  $H_n(\zeta)$  - полином Эрмита,  $N_n = (2^n n! a \sqrt{\pi})^{-1/2}$  - нормировочная константа.

7.1. (4-2) Определить уровни энергии и волновые функции стационарных состояний частицы в одномерной бесконечно глубокой прямоугольной потенциальной яме шириной  $a$ . Определить среднее значение координаты частицы в  $n$ -м стационарном состоянии.

7.2. (4-11) Определить координаты наиболее вероятного и наименее вероятного местонахождения частицы внутри бесконечно глубокой одномерной прямоугольной потенциальной ямы (см. задачу 7.1) в состояниях с  $n = 1, 2$  и  $3$ .

7.3. Частица находится в основном состоянии в одномерной бесконечно глубокой потенциальной яме. Определить значения дисперсий координаты  $D_x$  и импульса  $D_p$ . Найти произведение дисперсий. Результат сравнить с (6.12).



7.4. (4-3). Определить уровни энергии и волновые функции стационарных состояний в одномерной прямоугольной потенциальной яме конечной глубины  $V_0$  шириной  $a$ . Рассмотреть случай  $E < V_0$ .

7.5. Частица находится в одномерной прямоугольной потенциальной яме ширины  $a$  глубины  $V_0$ . Найти энергию основного состояния в случаях а)  $2mV_0a^2/\hbar^2 \ll 1$  и б)  $2mV_0a^2/\hbar^2 \gg 1$ .

7.6. Определить число уровней в одномерной прямоугольной потенциальной яме глубиной  $V_0$  и шириной  $a$  при условии  $V_0a^2 = \hbar^2/m$ .

7.7. Частица находится в одномерной симметричной потенциальной яме глубиной  $V_0$  и шириной  $a$ . Определить условие возникновения  $n$ -го стационарного состояния в таком потенциале. Нарисовать распределение  $|\psi(x)|^2$  для этого состояния.

7.8. Частица находится в одномерной симметричной потенциальной яме глубиной  $V_0$  шириной  $a$ . Определить условия существования  $n$  стационарных состояний с отрицательной четностью в таком потенциале. Нарисовать распределение  $|\psi(x)|^2$  для любого из них.

7.9. Частица находится в одномерной симметричной потенциальной яме глубиной  $V_0$  шириной  $a$ . Определить условия существования  $n$  стационарных состояний с положительной четностью в таком потенциале. Нарисовать распределения  $|\psi(x)|^2$  для любого из них.

7.10. Электрон находится в одномерной прямоугольной бесконечно глубокой потенциальной яме  $V(x) = \begin{cases} \infty, & |x| \geq a/2, \\ 0, & |x| < a/2. \end{cases}$  Написать выражение и найти значение вероятности обнаружить частицу в интервале  $(-a/2, a/4)$  в случае, если частица находится на уровне  $n = 2$ .

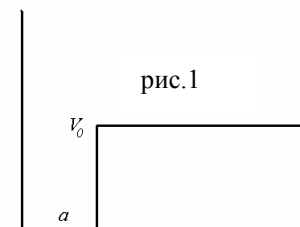
7.11. Частица находится в одномерной симметричной глубокой прямоугольной потенциальной яме, содержащей более  $N=100$  уровней:

$$V(x) = \begin{cases} V_0, & 0 < x, x > a, \\ 0, & 0 < x < a. \end{cases}$$

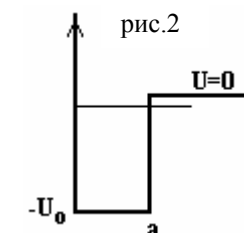
Написать выражение и оценить значение вероятности обнаружить частицу в интервале  $(a/8, a/4)$  в случае, если частица находится на уровне  $n = 4$ .

7.12. Найти предельное значение дисперсии координаты частицы в бесконечно глубокой одномерной потенциальной яме при  $n \rightarrow \infty$ .

7.13. Частица находится в одномерном потенциале с параметрами  $V_0$  и  $a$  (см. рис.1). Найти условие возникновения  $n$ -го стационарного состояния в таком потенциале. Нарисовать распределения  $|\psi(x)|^2$  для этого состояния.

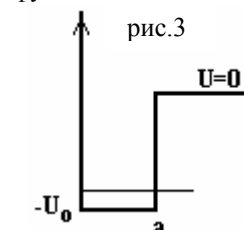


7.14. Частица в одномерной яме конеч-



ной глубины с бесконечно высокой стенкой занимает единственный слабосвязанный уровень (см. рис.2) с известной энергией связи  $E_{св} \ll U_0$ . Сравните (приблизительно) наиболее вероятное значение координаты  $x_{н.в.}$  и среднее значение координаты  $\langle x \rangle$  в этом состоянии. Нарисуйте волновую функцию.

7.14. Частица в одномерной яме конечной глубины с бесконечно высокой стенкой занимает единственный слабосвязанный уровень (см. рис.2). Среднее значение координаты  $\langle x \rangle = \alpha a$ ,  $\alpha \gg 1$ . Оцените энергию связи. Нарисуйте волновую функцию.

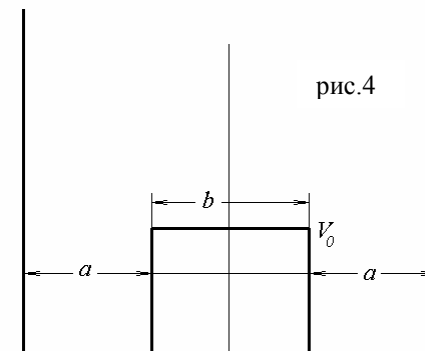


7.15. Частица в «глубокой» одномерной яме (конечной глубины) с бесконечно высокой стенкой занимает низший уровень энергии (рис.3). Оцените, насколько отличается энергия связи от глубины ямы. Нарисуйте волновую функцию.

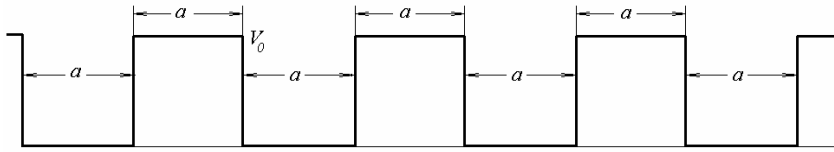
7.16. Простейшая модель электронной подсистемы молекулы: электрон находится в двумерном потенциале, представленном на рис. 4. Считая, что  $2mV_0a^2/\hbar^2 \gg 1$  и  $2mV_0b^2/\hbar^2 \gg 1$ , определить уровни энергии и волновые функции двух нижних стационарных состояний.

Нарисовать график зависимости электронной энергии от расстояния между центрами потенциальных ям  $R = a + b$ .

7.17. Найти волновую функцию электрона, находящегося в произвольном периодическом одномерном потенциале  $V(x)$ , если известен период этого потенциала  $a$  (Теорема Блоха).



7.16. Рассмотреть движение электрона в одномерной бесконечной кри-



сталлической решетке, считая потенциальную энергию  $V(x)$  равной нулю при  $na < x < (n+1)a$  и  $V_0$  при  $(n+1)a < x < (n+2)a$  ( $n$  -- целое). Пусть  $a = 2 \times 10^{-8}$  см,  $V_0 = 5$  эВ. Найти границы разрешенных и запрещенных энергетических зон.

7.17. Найти уровни энергии и волновые функции стационарных состояний в  $\delta$ -потенциале  $V(x) = \frac{\hbar^2}{m} V_0 \delta(x)$ . Считать, что  $V_0 < 0$ .

7.18. Найти границы разрешенных и запрещенных энергетических зон для электрона в потенциале, образованном периодической последовательностью дираковских дельта-функций  $V(x) = \frac{\hbar^2}{m} V_0 \delta(x)$ , расстояния между которыми равны периоду решетки  $a$  (Дираковская гребенка). Считать, что  $V_0 < 0$ .

7.19. Электрон находится в одномерной прямоугольной бесконечно глубокой потенциальной яме шириной  $a$ . Найти число энергетических уровней  $dN$ , приходящееся на малый энергетический интервал  $(E, E+dE)$ . Найти плотность состояний  $(dN/dE)$ . Сделать численную оценку для  $a=1$  см.

7.20. Найти волновые функции и энергии стационарных состояний частицы в двумерной прямоугольной бесконечно глубокой потенциальной яме размером  $a \times b$ .

7.21. Найти волновые функции и энергии стационарных состояний частицы в трехмерной прямоугольной бесконечно глубокой потенциальной яме размером  $a \times b \times c$ .

7.22. Электрон находится в двумерной прямоугольной бесконечно глубокой потенциальной яме, ширина и длина которой равны  $a$ . Найти число состояний  $dN$ , приходящееся на малый энергетический интервал  $(E, E+dE)$ , полагая, что уровни расположены густо  $((dN/dE) \cdot dE \gg 1)$ .

7.23. Электрон находится в трехмерной прямоугольной бесконечно глубокой потенциальной яме, ширина, длина и высота которой равны  $a$ . Найти число состояний  $dN$ , приходящееся на малый энергетический ин-

тервал  $(E, E+dE)$ , полагая, что уровни расположены густо  $((dN/dE) \cdot dE \gg 1)$ .

7.24. Частица массы  $m$  находится в одномерной прямоугольной яме конечной глубины шириной  $a$ . Волновая функция основного состояния в середине ямы в два раза больше, чем на краях ямы. Найти энергию этого состояния.

7.25. Показать, что в произвольном стационарном состоянии одномерного гармонического осциллятора средние значения потенциальной и кинетической энергии равны.

7.26. Для одномерного гармонического осциллятора найти среднее значение кинетической и потенциальной энергии в нижнем стационарном состоянии с нечетной волновой функцией.

7.27. Частица находится в основном состоянии в одномерном гармоническом осцилляторном потенциале. Определить плотность вероятности измерить значение импульса  $p$ .

7.28. Волновая функция частицы, находящейся в одномерном осцилляторном потенциале  $V = m\omega^2 x^2 / 2$  имеет вид

$$а) \psi(x) = Ax^2 \exp\left(-\frac{1}{2}(x/a)^2\right); \text{ б) } \psi(x) = Ax^3 \exp\left(-\frac{1}{2}(x/a)^2\right); \quad a = \sqrt{\hbar/m\omega}.$$

Определить, какие значения энергии в этих состояниях могут быть измерены.

7.31. Определить среднее значение координаты  $\langle x \rangle$  и дисперсию координаты  $D_x$  в  $n$ -ном стационарном состоянии гармонического осциллятора.

7.32. Измерения энергии в некотором состоянии гармонического осциллятора привели к следующим средним значениям: а)  $\langle E \rangle = 2/3 \hbar \omega$ ; б)  $\langle E \rangle = 3/4 \hbar \omega$ ; в)  $\langle E \rangle = 4/3 \hbar \omega$ ; д)  $\langle E \rangle = 4/5 \hbar \omega$ . Напишите хотя бы одну волновую функцию, которая описывала бы такое состояние системы.

7.33. Частица находится в одномерной прямоугольной бесконечно глубокой потенциальной яме и в некоторый момент времени характеризуется волновой функцией  $\psi(x) = \alpha \psi_n(x) + \beta \psi_k(x)$ , где  $\psi_k, \psi_n$  - волновые функции стационарных состояний с энергиями  $E_k$  и  $E_n$ , а  $\alpha$  и  $\beta$  - некоторые комплексные числа, причем  $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$ . Определить средние значения  $\langle E \rangle$ , координаты  $\langle x \rangle$  и квадрата координаты  $\langle x^2 \rangle$  в этот момент времени.

### 8. Туннельный эффект.

1. Волновая функция удовлетворяет уравнению непрерывности:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div}(\vec{j}) = 0$$

где  $\rho(\vec{r}, t) = |\psi(\vec{r}, t)|^2$  - плотность вероятности,  $\vec{j} = \frac{\hbar}{2mi}(\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*)$  - плотность потока вероятности.

2. Прозрачность потенциального барьера с профилем  $V(x)$  в квазиклассическом приближении ( $D \ll 1$ ):

$$D \approx \exp\left(-\frac{2}{\hbar} \int \sqrt{2m(V(x) - E)} dx\right),$$

где  $E$  - полная энергия частицы, а интеграл берется по области классически запрещенного движения.

8.1. (4-1) Определить плотность потока вероятности для частицы, характеризующейся волновой функцией  $\psi(x) = A \exp(ikx)$ . В чем физический смысл такой волновой функции?

8.2. Определить величину плотности тока вероятности для состояния  $\psi(x) = A \exp(ikx) + B \exp(-ikx)$ .

8.3. Найти величину плотности тока вероятности для следующих волновых функций:

а)  $\psi(x) = A(\exp(ikx) + \exp(ikx))$

б)  $\psi(x) = A(\exp(ikx) - \exp(ikx))$

в)  $\psi(x) = A(\exp(ikx) + i \exp(ikx))$ ,

г)  $\psi(x) = A(\exp(ikx) - \exp(ikx))$

д)  $\psi(x) = A(\exp(ikx) + 0.5 \cdot \exp(ikx))$

ж)  $\psi(x) = A(\exp(ikx) - 0.5 \cdot \exp(ikx))$ .

Нарисовать пространственные распределения плотности вероятности и плотности тока вероятности.

8.4. Поток частиц с энергией  $E$  рассеивается на прямоугольной потенциальной ступеньке  $V(x) = \begin{cases} 0, & x < 0, \\ V_0, & x \geq 0. \end{cases}$  Определить вероятности прохождения и отражения при различных соотношениях  $E$  и  $V_0$ . Нарисовать графики зависимости  $|\psi(x)|^2$  для случаев «подбарьерного»  $E < V_0$  и «надбарьерного»  $E > V_0$  движения.

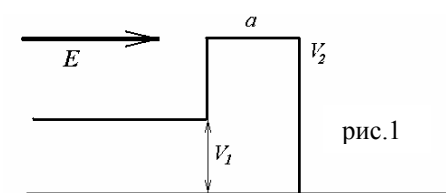
8.5. Поток частиц с энергией  $E$  рассеивается на прямоугольной потенциальной ступеньке высоты  $V_0$ :  $V(x) = \begin{cases} 0, & x < 0, \\ V_0, & x \geq 0. \end{cases}$  Определить зависимость коэффициентов прохождения и отражения от энергии частиц. Рассмотреть случаи  $V_0 > 0$  и  $V_0 < 0$ .

8.6. Поток частиц с энергией  $E$  движется через прямоугольный потенциальный барьер ширины  $a$  и высоты  $V_0$ . Определить коэффициенты прохождения  $T$  и отражения  $R$  в случае  $E = V_0$ . Нарисовать графики функций  $T(a)$  и пространственного распределения плотности вероятности  $|\psi(x)|^2$ .

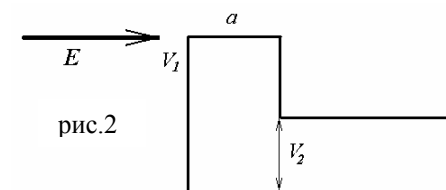
8.7. Поток частиц с энергией  $E$  рассеивается на прямоугольном потенциальном барьере ширины  $a$  и высотой  $V_0$  ( $E = V_0$ ). Определить разность фаз волновой функции (плоской волны), набираемую при прохождении волной потенциального барьера. Объяснить физический смысл этой разности фаз.

8.8. Поток частиц с энергией  $E$  рассеивается на прямоугольном потенциальном барьере ширины  $a$  и высотой  $V_0$  ( $E < V_0$ ). Общее решение для волновой функции внутри прямоугольного потенциального барьера имеет вид  $\psi(x) = A \exp(-\kappa x) + B \exp(\kappa x)$ , где  $\kappa = \sqrt{2m(V_0 - E)/\hbar^2}$ , а  $A$  и  $B$  - некоторые комплексные числа. Записать выражение для плотности потока вероятности в области подбарьерного движения.

8.9. Поток частиц налетает слева на потенциальный барьер, причем энергия частиц равна высоте барьера  $E = V_2$  (см. рис.1). Определить коэффициент прохождения и нарисовать распределение плотности вероятности  $|\psi(x)|^2$  во всем пространстве.

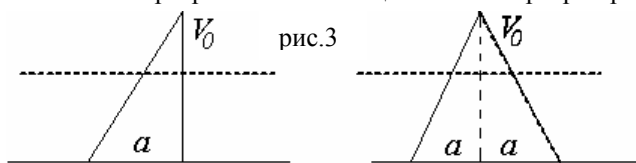


8.10. Поток частиц налетает слева на потенциальный барьер, причем энергия частиц равна высоте барьера  $E = V_1$  (см. рис.2). Определить коэффициент прохождения и нарисовать распределение плотности вероятности  $|\psi(x)|^2$  во всем пространстве.



8.11. Поток частиц с энергией  $E$  налетает на потенциальный барьер треугольной формы, имеющий высоту  $V_0$  и ширину у основания  $a$ . Оценить коэффициент прохождения  $D$  в случае  $E < V_0$ . Как зависит величина  $D$  от положения вершины барьера.

8.12. Найти зависимость прозрачности потенциального барьера треугольной формы от энергии налетающего потока частиц в следующих случаях (см. рис.3).

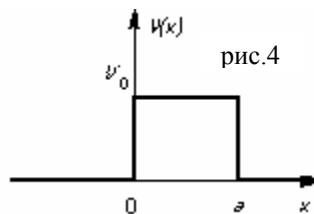


8.13. Поток частиц с энергией  $E$  налетает на потенциальный барьер треугольной формы, имеющий высоту  $V_0$  и ширину у основания  $a$ ,  $E < V_0$ . При каком положении вершины барьера коэффициент прохождения  $D$  окажется а) минимальным; б) максимальным.

8.14. Для частицы массы  $m$  и энергии  $E$  рассчитать вероятность туннелирования через потенциальный барьер в виде дельта-функции Дирака

$$V(x) = \frac{\hbar^2}{m} V_0 \delta(x), \quad V_0 > 0.$$

8.15. Поток частиц с энергией  $E$  пролетает через потенциальный барьер высотой  $V_0$  и шириной  $a$ , причем  $E > V_0$ . (см. рис.4) Определить энергии, при которых коэффициент отражения от барьера  $R$  равен нулю. Построить график  $D(E/V_0) = 1 - R$ .

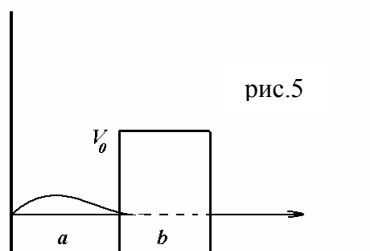


8.16. (4-8). Предполагая, что  $\alpha$  - распад атомного ядра с зарядом  $Z$  есть результат туннелирования  $\alpha$  - частицы через кулоновский барьер, созданный ядром-остатком ( $Z_1 = Z - 2$ ) определить зависимость вероятности  $\alpha$  - распада от энергии образующейся  $\alpha$  - частицы.

8.17. Оценить время полураспада для  $\alpha$  - радиоактивных ядер перечисленных элементов. Энергии  $E_\alpha$  вылетающих  $\alpha$  - частиц соответственно равны: а)  ${}^{238}_{92}\text{U}$  ( $E_\alpha=4.2$  МэВ); б)  ${}^{242}_{94}\text{Pu}$  ( $E_\alpha=4.8$  МэВ); в)  ${}^{212}_{83}\text{Bi}$  ( $E_\alpha=6.2$  МэВ); г)  ${}^{222}_{86}\text{Rn}$  ( $E_\alpha=6.6$  МэВ);

8.18. (4-17). Определить зависимость тока холодной эмиссии с поверхности металла от величины электрического поля  $E$ .

8.19. Частица массы  $m$  находится в потенциальной яме, отделенной прямоугольным потенци-



альным барьером от области инфинитного движения (см. рис.5), причем выполнены условия  $2mV_0a^2 / \hbar^2 \gg 1$ ,  $2mV_0b^2 / \hbar^2 \gg 1$ . Показать, что вероятность обнаружить частицу внутри ямы будет убывать по экспоненциальному закону  $W \sim \exp(-\gamma t)$  и найти величину  $\gamma$  - вероятность туннелирования в единицу времени.

8.20. Электрон находится в основном стационарном состоянии в прямоугольной потенциальной яме конечной глубины (глубина ямы -  $V_0$ , ширина -  $a$ ), причем  $2mV_0a^2 / \hbar^2 \gg 1$ . Оценить скорость (вероятность в единицу времени) туннелирования электрона из ямы при помещении системы в однородное постоянное электрическое поле с напряженностью  $\varepsilon$ .

8.21. Оценить скорость ионизации атома в низкочастотном электромагнитном поле. Указание: Решить задачу (8.20) в предположении, что электрическое поле зависит от времени по закону  $\varepsilon = \varepsilon_0 \sin \omega t$ , и провести усреднение по периоду колебаний.

### 9. Движение в центрально симметричном потенциальном поле.

#### Задача Кеплера. Атом водорода.

1. Волновые функции стационарных состояний в произвольном центрально-симметричном поле

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

где  $R_{n\ell}(r)$  - радиальная волновая функция,  $Y_{\ell m}(\theta, \varphi)$  - сферическая функция, причем

$$\ell = 0, 1, 2, \dots, n-1;$$

$$m = -\ell, -(\ell-1), \dots, 0, \dots, \ell-1, \ell.$$

Приняты следующие обозначения

$$\ell = 0, 1, 2, 3, 4, 5, 6, \dots$$

$$s, p, d, f, g, h, i, \dots$$

2. Кеплерова задача:  $V(r) = -Ze^2/r$ .

Дискретные уровни энергии:

$$E_n = -Z^2 \frac{m e^4}{2 \hbar^2} \frac{1}{n^2} = -Z^2 \frac{Ry}{(n_r + \ell + 1)^2}.$$

Общее представление для радиальной волновой функции:

$$R_{n\ell}(r) = r^\ell \exp\left(-\frac{Zr}{n a_0}\right) (b_0 + b_1 r + b_2 r^2 + \dots + b_{n_r} r^{n_r}),$$

$n_r = n - (\ell + 1)$  - число узлов радиальной волновой функции. В частности,

$$R_{10}(\xi) = 2 \exp(-\xi),$$

$$R_{20}(\xi) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(1 - \frac{1}{2} \xi\right) \exp(-\xi/2), \quad R_{21}(\xi) = \frac{1}{2\sqrt{6}} \xi \exp(-\xi/2),$$

$$R_{30}(\xi) = \frac{2}{3\sqrt{3}} \left(1 - \frac{2}{3} \xi + \frac{2}{27} \xi^2\right) \exp(-\xi/3),$$

$$R_{31}(\xi) = \frac{8}{27\sqrt{6}} \xi \left(1 - \frac{1}{6} \xi\right) \exp(-\xi/3), \quad R_{32}(\xi) = \frac{4}{81\sqrt{30}} \xi^2 \exp(-\xi/3).$$

Здесь  $\xi = Zr/a_0$

9.1. Показать, что в центрально-симметричном потенциале  $V(r)$  положение энергетических уровней определяется одномерным уравнением Шредингера для радиальной волновой функции с потенциалом  $V_{\text{eff}}(r) = V(r) + \hbar^2 \ell(\ell+1)/2mr^2$ , где  $\ell$  - орбитальное квантовое число,  $m$  -

масса частицы. Определить кратность вырождения уровня с заданным значением орбитального момента  $\ell$ .

9.2. Для частицы, находящейся в произвольном центрально-симметричном поле, записать общий вид волновых функций с орбитальным квантовым числом  $\ell$  и  $z$  - проекцией орбитального момента  $L_z = \hbar m$ .

9.3. Частица массы  $m$  находится в центрально-симметричном потенциале  $V(\vec{r}) = V(|\vec{r}|)$ . Написать общее выражение для волновой функции состояния с точно определенным значением  $z$ - проекции момента количества движения. Может ли такое состояние быть стационарным (нестационарным)?

9.4. Частица массы  $m$  находится в центрально-симметричном потенциале  $V(\vec{r}) = V(|\vec{r}|)$ . Написать общее выражение для волновой функции состояния с точно определенным значением квадрата момента количества движения. Может ли такое состояние быть стационарным (нестационарным)?

9.5. (4-4). Определить энергии  $s$ -состояний в трехмерной сферически симметричной прямоугольной яме бесконечной глубины.

9.6. Определить энергии  $s$ -состояний в трехмерной сферически симметричной прямоугольной яме конечной глубины.

9.7. Определить условие существования хотя бы одного связанного  $s$  - состояния частицы в сферически симметричной прямоугольной потенциальной яме радиусом  $R$  и глубиной  $V_0$ . Полученный результат сравнить с оценкой по соотношению неопределенностей (см. задачу (3.29)).

9.8. Показать, что волновая функция системы из двух взаимодействующих частиц может быть представлена в виде произведения волновых функций, описывающих их относительное движение и движение центра масс. Считать, что взаимодействие частиц является центральным.

9.9. Аппроксимируя взаимодействие протона и нейтрона в дейтроне сферически-симметричной прямоугольной потенциальной ямой с радиусом  $R = 2 \cdot 10^{-13}$  см, найти глубину этой ямы, если известно, что в ней существует единственное связанное состояние с энергией связи  $E_{\text{св}} \approx 2$  МэВ. Оценить среднее значение расстояния между протоном и нейтроном.

9.10. Определить энергии и волновые функции стационарных  $s$  - состояний частицы в потенциале  $V = m\omega^2 r^2/2$  (трехмерный изотропный гармонический осциллятор).

9.11. Определить энергетический спектр и волновые функции стационарных состояний трехмерного изотропного гармонического осцилля-

тора  $V = m\omega^2 r^2 / 2$ . Указание: Задачу удобнее решать в декартовой системе координат.

9.12. Состояние частицы в сферически симметричном (трехмерном) гармоническом осцилляторном потенциале  $V = m\omega^2 r^2 / 2$  задается функциями

$$\text{а) } \psi(x, y, z) = Axy \exp(-r^2/2a^2),$$

$$\text{б) } \psi(x, y, z) = Ayz \exp(-r^2/2a^2),$$

$$\text{в) } \psi(x, y, z) = Ax^2 \exp(-r^2/2a^2),$$

где  $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$ ,  $a = \sqrt{\hbar/m\omega}$ . Определить какие значения энергии, квадрата момента и величины  $z$  - проекции момента могут быть измерены в этом состоянии.

9.13. Стационарные состояния пространственного гармонического осциллятора в декартовой системе координат характеризуются тремя квантовыми числами:  $n_x, n_y, n_z$ . Для состояния  $\psi(n_x = 0, n_y = 1, n_z = 0)$  найти, какие значения квадрата момента импульса  $L^2$  и  $z$ -проекции момента  $L_z$  могут быть измерены и с какой вероятностью.

9.14. Стационарное состояние электрона в атоме водорода характеризуется волновой функцией  $\psi_{n\ell m}$  с квантовыми числами  $n = 3, l = 2, m = -2$ . Какие физические величины принимают в этом состоянии точное значение и чему они равны?

9.15. Написать волновую функцию для электрона атома водорода, находящегося в состоянии с  $n = 2$ , орбитальным моментом  $|L| = \hbar\sqrt{2}$  и  $z$ -проекцией орбитального момента не равной нулю. Найти во сколько раз среднее значение потенциальной энергии электрона в этом состоянии отличается от среднего значения потенциальной энергии в основном состоянии.

9.16. Найти среднее значение кинетической энергии для электрона в атоме водорода в состоянии с  $n = 3, |L| = \hbar\sqrt{6}$  и максимально возможным значением  $L_z$ .

9.17. Какую минимальную энергию может иметь электрон в ионе  $\text{He}^+$ , имеющий орбитальное квантовое число  $\ell = 3$ ?

9.18. Каким может быть наибольшее значение орбитального квантового числа  $\ell$  электрона в атоме водорода, имеющего энергию связи  $-Ry/16$ ?

9.19. Энергия электрона в ионе  $\text{He}^+$  равна  $E = -Ry$ . Какими могут быть значения орбитального квантового числа  $\ell$ ?

9.20. Какую минимальную энергию может иметь в атоме водорода  $d$ -электрон?

9.21. (4-9). Сравнить вероятности захвата электронов с  $K$ - и  $L$ -оболочек тяжелым ядром с зарядом  $Z$ .

9.22. Определить среднее и наиболее вероятное удаление электрона от ядра в основном состоянии атома водорода.

9.23. Определить среднее и наиболее вероятное удаление электрона от ядра в основном состоянии водородоподобного иона с зарядом  $Z$ .

9.24. Определить среднее и наиболее вероятное удаление электрона от ядра в атоме водорода в состоянии  $2s$  и  $2p$ .

9.25. Найти дисперсию удаления электрона от ядра в атоме водорода в состояниях  $2s$  и  $2p$ .

9.26. Вычислить среднее значение кинетической и потенциальной энергии для электрона в атоме водорода в состоянии  $3p, m = 0$ .

9.27. Найти средние значения величин  $\langle r \rangle, \langle 1/r \rangle, \langle r^2 \rangle$  в состоянии  $3d$  атома водорода.

9.28. Изобразить радиальную часть волновой функции  $R_{nl}(r)$  и плотность вероятности найти электрон на заданном удалении от ядра  $\rho_{nl}$  в атоме водорода в состояниях: а)  $5s \dots 5g$ ; б)  $4s \dots 4f$ ; в)  $3s \dots 3d$ .

9.29. Найти среднее  $\langle r \rangle$  и наиболее вероятное  $r_{n,\ell}$  удаление электрона от ядра в состояниях в состояниях  $n, \ell = n - 1$ .

9.30. В сферической системе координат электрон в атоме водорода характеризуется волновой функцией

$$\text{а) } \psi(r, \theta, \varphi) = 1/\sqrt{2} (\psi_{2,1,1} + \psi_{2,1,-1}), \quad \text{б) } \psi(r, \theta, \varphi) = \left( \frac{1}{\sqrt{3}} \psi_{1,0,0} + \sqrt{\frac{2}{3}} \psi_{3,1,0} \right),$$

$$\text{в) } \psi(r, \theta, \varphi) = 1/\sqrt{3} (\psi_{2,1,0} + \psi_{2,1,1} + \psi_{2,1,-1}),$$

$$\text{г) } \psi(r, \theta, \varphi) = \left( \frac{1}{\sqrt{6}} \psi_{2,1,1} + \frac{1}{\sqrt{6}} \psi_{2,1,-1} + \sqrt{\frac{2}{3}} \psi_{2,0,0} \right).$$

где  $\psi_{n,l,m}$  - волновая функция стационарного состояния с квантовыми числами  $n, l, m$ . Какие, и с какой вероятностью значения энергии и  $z$ - проекции момента количества движения могут быть измерены в этом состоянии?

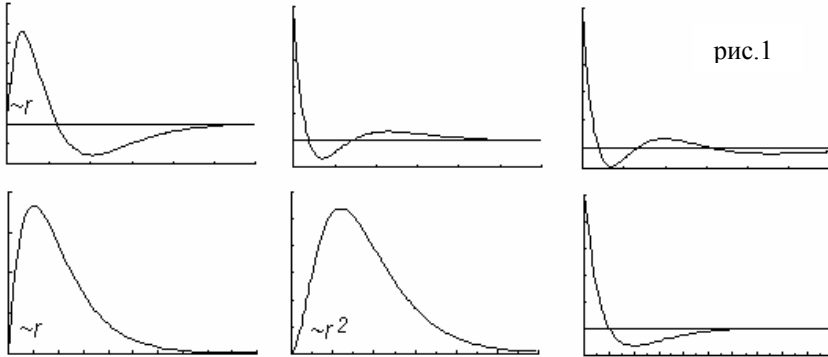
9.31. Определить средние значения  $x$  и  $z$  - проекций координаты, импульса и момента импульса электрона в состояниях  $1s, 2p, m = 1, 3d, m = 2$  водородоподобного иона с зарядом  $Z$ .

9.32. Водородоподобный ион с зарядом  $Z$  находится в основном состоянии. Определить вероятность обнаружить электрон на расстоянии  $r > a_0/Z$  от ядра ( $a_0$  – боровский радиус).

9.33. Водородоподобный ион с зарядом  $Z$  находится в основном состоянии. Определить вероятность обнаружить электрон на расстоянии  $r < a_0/Z$  от ядра ( $a_0$  – боровский радиус).

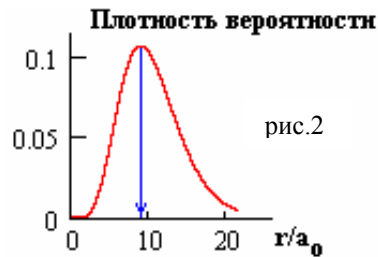
9.34. Частица находится в центрально-симметричном потенциале  $V(r) = kr^2/2$ ,  $k > 0$  в состоянии с точно определенным значением  $z$ - проекции орбитального момента  $\ell_z = 4\hbar$ . Определите минимально возможное значение квадрата момента импульса частицы в этом состоянии и зависимость волновой функции от азимутального угла  $\varphi$ .

9.35. На рис.1 представлены радиальные волновые функции некоторых стационарных состояний электрона в атоме водорода. Определить



квантовые числа  $n$  и  $\ell$ .

9.35. На рис.2 изображено распределение плотности вероятности по радиусу для электрона в атоме водорода; максимум распределения расположен на радиусе  $r_{\max} = 9a_0$ ,  $a_0$  – радиус первой боровской орбиты. Определите состояние – квантовые числа  $n$  и  $\ell$ .



9.36.(4-6). Определить электростатический потенциал, создаваемый в пространстве атомом водорода в состоянии  $1s$ .

9.37. Определить энергии стационарных состояний заряженной бесспиновой частицы в кулоновском потенциале  $V(r) = -e^2/r$  при наложении внешнего однородного магнитного поля.

## 10. Основы стационарной теории возмущений. Системы из многих частиц.

1. Теория возмущений.

Пусть  $\varepsilon_n, \varphi_n$  – собственные значения и ортонормированные собственные функции гамильтониана  $\hat{H}_0$ , т.е.

$$\hat{H}_0 \varphi_n = \varepsilon_n \varphi_n,$$

причем

$$\int \varphi_m^* \varphi_n d\tau = \delta_{mn}.$$

Тогда собственные значения и собственные функции гамильтониана  $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$  ( $\hat{V}$  – «малое» возмущение) в первом порядке теории возмущений записываются в виде

$$E_n \cong \varepsilon_n + \langle \varphi_n | \hat{V} | \varphi_n \rangle,$$

$$\Phi_n \cong \varphi_n + \sum_{m \neq n} \frac{\langle \varphi_m | \hat{V} | \varphi_n \rangle}{\varepsilon_n - \varepsilon_m} \varphi_m.$$

Здесь  $\langle \varphi_m | \hat{V} | \varphi_n \rangle = \int \varphi_m^* \hat{V} \varphi_n d\tau$  – матричный элемент оператора  $\hat{V}$ .

2. Формула тонкой структуры (Дирака) характеризует смещение уровня энергии в водородоподобном ионе с зарядом  $Z$ , обусловленное релятивистскими эффектами:

$$\Delta E_{n\ell} = \frac{\alpha^2 Z^2}{n} \cdot E_n \cdot \left( \frac{1}{j+1/2} - \frac{3}{4n} \right),$$

где  $E_n = -Z^2 Ry/n^2$ ,  $\alpha = e^2/\hbar c$  – постоянная тонкой структуры,  $j$  – квантовое число полного момента количества движения.

3. Волновая функция системы из двух электронов должна быть антисимметрична относительно их перестановки местами (принцип Паули):

$$\psi(\tau_1, \tau_2) = -\psi(\tau_2, \tau_1)$$

где  $\tau_1, \tau_2$  – совокупности координат, пространственных и спиновых, определяющих состояние электрона.

В случае если гамильтониан системы не содержит слагаемых, зависящих одновременно от пространственных и спиновых переменных, волновая функция электрона представима в виде произведения координатной и спиновой частей:

$$\psi(\tau) = \varphi(\vec{r})\chi(\sigma).$$

Поэтому в случае двухэлектронной волновой функции принципу Паули удовлетворяют следующие комбинации:

а) пространственная волновая функция симметрична:

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \psi(\vec{r}_2, \vec{r}_1),$$

спиновая - антисимметрична (полный спин  $S = 0$ ):

$$\chi(\sigma_1, \sigma_2) = -\chi(\sigma_2, \sigma_1),$$

б) пространственная волновая функция антисимметрична:

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = -\psi(\vec{r}_2, \vec{r}_1),$$

спиновая - симметрична (полный спин  $S = 1$ ):

$$\chi(\sigma_1, \sigma_2) = \chi(\sigma_2, \sigma_1).$$

Для системы из двух **невзаимодействующих** электронов координатная часть волновой функции (симметричная (+) и антисимметричная (-) функции) имеет вид:

$$\begin{aligned} \psi_{\pm}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) &= \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_1(\vec{r}_1)\psi_2(\vec{r}_2) \pm \psi_1(\vec{r}_2)\psi_2(\vec{r}_1)] = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_1(\vec{r}_1)\psi_2(\vec{r}_2) + (-1)^S \psi_1(\vec{r}_2)\psi_2(\vec{r}_1)], \end{aligned}$$

$\psi_1, \psi_2$  - одноэлектронные волновые функции.

10.1. Заряженная частица находится в гармоническом потенциале  $\hat{H}_0 = \hat{T} + m\omega^2 x^2/2$ . Как изменятся энергии стационарных состояний при включении слабого однородного электрического поля?

10.2. Воспользовавшись теорией возмущений, определить поправку к энергиям стационарных состояний одномерного гармонического осциллятора  $V(x) = kx^2/2$ , обусловленную малым изменением постоянной упругой связи  $k$  ( $|\delta k| \ll k$ ). Полученный результат сравнить с точным решением задачи.

10.3. Частица находится в ангармоническом потенциале  $V(x) = m\omega^2 x^2/2 + \alpha x^4/4$ . Найти поправку к уровню энергии а)  $n=0$  б)  $n=1$  в первом порядке теории возмущений.

10.4. Оценить изменение энергии уровней и среднего значения координаты заряженной частицы, находящейся в одномерной бесконечно глубокой прямоугольной потенциальной яме, при медленном включении слабого однородного электрического поля. Начало отсчета координаты - в середине ямы. Определить дипольный электрический момент и поляризуемость системы.

10.5. (4-15). Найти поправку к энергии основного состояния водородоподобного иона, обусловленную конечным размером ядра, заряд кото-

рого  $Ze$  считать равномерно распределенным внутри сферы с радиусом  $R \ll a_0/Z$ .

10.6. Оценить поправки к энергиям  $2s$  и  $2p$  состояний водородоподобного иона с зарядом  $Z$ , связанную с конечным размером атомного ядра. Считать, что заряд по ядру распределен равномерно.

10.7. Оценить величину энергетического сдвига основного состояния атома водорода при его помещении в постоянное однородное электрическое поле (эффект Штарка).

10.8. В рамках первого порядка теории возмущений по межэлектронному взаимодействию, определить энергию основного состояния и потенциал ионизации атома гелия и однократно заряженного иона лития. Показать, что в этом приближении существование отрицательного иона водорода  $H^-$  невозможно.

10.9. В приближении самосогласованного поля Хартри каждый из электронов в атоме движется в электростатическом поле, создаваемом ядром с зарядом  $Z$  и совокупностью  $Z-1$  электронов. Считая, что плотность заряда, создаваемая в пространстве электроном есть  $e|\psi(r,t)|^2$ , получить уравнение для волновой функции электронов в основном состоянии атома гелия.

10.9. В рамках приближения Хартри получить систему уравнений для волновой функции, описывающей  $1s2p$  конфигурацию атома гелия.

10.10. Используя формулу тонкой структуры найти отношение энергий тонкого расщепления  $4p$  и  $4f$  уровней атома водорода.

10.11. Используя формулу тонкой структуры найти отношение энергий тонкого расщепления  $2p$  и  $3p$  уровней атома водорода.

10.12. Вычислить величину тонкого расщепления головной линии  $^2P \rightarrow ^2S$  иона  $Li^{++}$ .

10.13. Мюон ( $m_{\mu} \cong 207m_e$ ) находится в поле тяжелого атомного ядра ( $Z = 92, A = 238$ ). Определить приближенный вид волновой функции основного состояния и оценить потенциал ионизации такой системы. Считать распределение заряда в пределах ядра равномерным. Радиус ядра связан с его массовым числом соотношением  $R \cong 1.2 \cdot 10^{-13} \cdot A^{1/3}$  см.

10.14. Оценить потенциал ионизации водородоподобного иона с зарядом  $Z \gg 1$ , взяв за основу модель атома Томсона. Размер области положительного заряда  $R_0 = 1 \text{ \AA}$ .

10.16. Определить энергетический спектр и волновые функции стационарных состояний системы связанных линейных гармонических осцилляторов с гамильтонианом  $\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2 + \alpha(x_1 - x_2)^2$ , где



$\hat{H}_i = \hat{T}_i + m\omega_0^2 x_i^2 / 2$  - гамильтониан гармонического осциллятора с частотой  $\omega_0$ ,  $\alpha$  - константа связи.

10.17. Используя теорию возмущений, найти энергию и волновую функцию основного состояния системы из двух связанных линейных осцилляторов, описываемую гамильтонианом  $\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2 + \alpha(x_1 - x_2)^2$ . Результат сравнить с точным решением (см. задачу 10.16).

10.18. Найти энергию и волновую функцию основного состояния системы из двух связанных линейных осцилляторов, описываемую гамильтонианом  $\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2 + \alpha(x_1 - x_2)^2$ , в приближении самосопряженного поля Хартри. Результат сравнить с точным решением (см. задачу 10.17).

10.19. В атоме трития ядро  ${}^3_1H$  испытывает  $\beta$  - распад с образованием ядра  ${}^3_2He$ . Определить вероятность того, что образующийся водородоподобный ион гелия будет находиться в основном состоянии. Какова будет вероятность его возбуждения в  $2s$  и  $2p$  состояния? Указание: Поскольку образующийся при  $\beta$  - распаде электрон является быстрым, изменение заряда ядра можно считать мгновенным.

10.20. Частица массы  $m$  находится в основном состоянии в одномерном гармоническом потенциале с частотой  $\omega$ . В результате некоторого внешнего мгновенного воздействия частица приобретает среднее значения импульса  $p_0$ . Определить вероятность обнаружить частицу в  $n$ -ном стационарном состоянии и полную вероятность возбуждения.

10.21. (4-12). В одномерной бесконечно глубокой прямоугольной потенциальной яме основной уровень занят одним электроном. На какие уровни можно поместить второй электрон с той же проекцией спина?

10.22. (4-13). В одномерной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками на уровнях с квантовыми числами  $n=1$  и  $n=2$  находятся два электрона. Для случаев полного спина  $S=0$  и  $S=1$  постройте пространственную двухэлектронную волновую функцию, соответственно, антисимметричную и симметричную относительно перестановки электронов. Укажите (приблизительно) координаты наиболее вероятного расположения электронов. Взаимодействием электронов пренебречь. Найдите для этих случаев пространственное распределение плотности электрического заряда.

10.23. (4-14). При условиях предыдущей задачи найдите средний квадрат расстояния между электронами в состояниях с полным спином  $S=0$  и  $1$ .

10.24. Пренебрегая межэлектронным взаимодействием, построить волновые функции двухэлектронной конфигурации  $1s2p$ . Найти средние

значения расстояния между электронами в синглетном и триплетном состояниях.

10.25. В потенциальной яме трехмерного изотропного гармонического осциллятора  $V = m\omega^2 r^2 / 2$  находятся восемь одинаковых ферми-частиц. Пренебрегая их взаимодействием между собой, определить энергию основного состояния такой системы. Как изменится эта энергия при добавлении еще одной такой же частицы?

10.26. (11-1). Воспользовавшись соотношением неопределенностей, оцените среднюю энергию электронов в вырожденном электронном газе с плотностью  $N_e \sim 10^{23} \text{ см}^{-3}$ . Взаимодействием электронов пренебречь.

10.27. (11-2). Оцените величину давления идеального вырожденного электронного газа с плотностью  $N_e \sim 10^{23} \text{ см}^{-3}$ .

10.28. Показать, что для вырожденного электронного газа степень его идеальности возрастает с увеличением плотности.

10.29. (11.3). В модели Томаса-Ферми многоэлектронный атом представляет собой систему, в которой давление вырожденного электронного ферми-газа уравнивается силами кулоновского притяжения к ядру. Определить зависимость размера атома от заряда  $Z$ .

10.30. Белый карлик – звезда, в которой давление вырожденного электронного газа уравнивает гравитационные силы. Полагая распределение плотности по радиусу звезды однородным, оценить равновесный размер такой системы. Массу звезды считать равной массе Солнца  $M = 2 \cdot 10^{33} \text{ г}$ .

10.31. В нейтронной звезде давление вырожденного нейтронного газа уравнивает гравитационные силы. Полагая распределение плотности по радиусу звезды однородным, оценить равновесный размер такой системы. Массу звезды считать равной массе Солнца  $M = 2 \cdot 10^{33} \text{ г}$ .

10.32. Соотношение неопределенностей и предельный размер звезды: Исходя из соотношения неопределенностей, оценить предельную массу звезды, удерживаемую давлением вырожденного ферми-газа нуклонов от гравитационного коллапса («предел Chandrasekara»).

### 11. Нестационарное уравнение Шредингера.

1. Волновая функция системы  $\psi(\vec{r}, t)$  удовлетворяет нестационарному уравнению Шредингера:

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

2. В случае если потенциал  $V(\vec{r})$  не зависит от времени, общее решение уравнения (1) может быть записано в виде

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

где  $\varphi_n$  и  $E_n$  - собственные значения и собственные функции гамильтониана  $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r})$ . Коэффициенты разложения  $C_n$  определяются как

$$C_n = \int \psi_0(\vec{r}) \varphi_n^*(\vec{r}) d^3 r,$$

где  $\psi_0(\vec{r}) = \psi(\vec{r}, t = 0)$  - волновая функция в начальный (нулевой) момент времени.

3. Среднее значение и дисперсия физической величины  $A$  в состоянии  $\psi(\vec{r}, t)$ :

$$\langle A \rangle = \int \psi^*(\vec{r}, t) \cdot \hat{A} \psi(\vec{r}, t) d^3 r,$$

$$D_A = \left\langle (A - \langle A \rangle)^2 \right\rangle = \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2.$$

11.1. Частица массы  $m$  находится в одномерной бесконечно глубокой прямоугольной потенциальной яме, шириной  $a$  в основном состоянии. Записать выражение для волновой функции частицы  $\psi(x, t)$  в произвольный момент времени.

11.2. Частица массы  $m$  находится в одномерной прямоугольной потенциальной яме конечной глубины  $a$  в основном состоянии. Глубина ямы такова, что в ней находится три уровня. Записать выражение для волновой функции частицы  $\psi(x, t)$  в произвольный момент времени. Собственные функции оператора Гамильтона считать известными.

11.3. Линейный гармонический осциллятор находится в основном состоянии. Записать выражение для волновой функции частицы  $\psi(x, t)$  в произвольный момент времени.

11.4. Показать, что для частицы, движущейся в потенциальном поле  $V(x, t)$ , справедливо утверждение (теорема Эренфеста)

$$\frac{d\langle p_x \rangle}{dt} = -\left\langle \frac{\partial V(x, t)}{\partial x} \right\rangle.$$

Здесь  $p_x$  -  $x$ -проекция импульса частицы, а скобки означают усреднение по квантовому состоянию.

11.5. Показать, что для частицы, движущейся в потенциальном поле  $V(x)$ , среднее по квантовому состоянию значение импульса удовлетворяет соотношению  $\langle p_x \rangle = m \frac{d\langle x \rangle}{dt}$ . Здесь  $\langle x \rangle$  - среднее значение координаты,  $m$  - масса частицы.

11.6. Частица массы  $m$  находится в поле постоянной силы  $F_0$  и в начальный момент времени имеет средние значения координаты и импульса, равные  $x_0$  и  $p_0$  соответственно. Определить средние значения импульса и координаты в последующие моменты времени.

11.7. Показать, что для частицы, движущейся в гармоническом потенциале  $V = m\omega^2 x^2/2$ , изменение во времени среднего значения координаты  $\langle x(t) \rangle$  определяется классическим законом движения.

11.8. Заряженная частица массы  $m$  находится в основном состоянии в осцилляторном потенциале  $V = m\omega^2 x^2/2$ . В некоторый момент времени «включается» однородное постоянное электрическое поле с напряженностью  $E_0$ . Определить среднее по квантовому состоянию значение координаты частицы в зависимости от времени.

11.9. Состояние свободной частицы (электрона) в начальный момент времени  $t = 0$  характеризуется волновой функцией

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{a\sqrt{\pi}}} \cdot \exp(ik_0 x) \cdot \exp\left(-\frac{1}{2} \frac{(x - x_0)^2}{a^2}\right).$$

В этот момент времени «включается» однородное постоянное электрическое поле с напряженностью  $\mathcal{E}$ . Найти среднее значение координаты частицы, как функцию времени  $\langle x(t) \rangle$ . Результат сравнить со случаем свободного движения частицы.

11.10. В начальный момент времени состояние частицы в одномерном гармоническом потенциале задается волновой функцией  $\psi(x, t = 0) = (\varphi_0(x) + \varphi_1(x))/\sqrt{2}$ . Здесь  $\varphi_0(x)$  и  $\varphi_1(x)$  - волновые функции двух нижних стационарных состояний. Определить временные зависимости пространственного распределения плотности вероятности, а также среднего значения координаты и дисперсии координаты частицы.

11.11. В начальный момент времени состояние частицы в одномерном гармоническом потенциале задается волновой функцией  $\psi(x, t = 0) = (\varphi_0(x) + \varphi_2(x)) / \sqrt{2}$ . Здесь  $\varphi_0(x)$  и  $\varphi_2(x)$  - волновые функции двух нулевого и второго возбужденного стационарных состояний. Определить временные зависимости пространственного распределения плотности вероятности, а также среднего значения координаты и дисперсии координаты частицы.

11.12. Волновая функция частицы, находящейся в осцилляторном потенциале, в момент времени  $t = 0$  определяется выражением

$$\phi(x) = \sqrt{2/3} \cdot \frac{1}{\sqrt{a\sqrt{\pi}}} \cdot (1 + x/a) \cdot \exp\left(-\frac{1}{2}(x/a)^2\right),$$

где  $a^2 = \hbar / m\omega$ . Определить среднее значение координаты и дисперсии координаты частицы, как функцию времени.

11.13. Волновая функция частицы, находящейся в одномерной прямоугольной бесконечно глубокой потенциальной яме шириной  $a$  (точка  $x = 0$  находится в центре ямы) в момент времени  $t = 0$  определяется выражением

$$\phi(x) = A \cdot \cos(\pi x/a)(1 + \sin(\pi x/a)),$$

$A$  - нормировочная константа. Определить среднее значение координаты частицы, как функцию времени.

11.14. В начальный момент времени ( $t = 0$ ) волновая функция частицы, находящейся в осцилляторном потенциале с частотой  $\omega$ , имеет вид  $\psi(x) = (\psi_0 - 2\sqrt{2}\psi_2) / 3$ . Найти распределение плотности вероятности  $\rho = |\psi(x, t)|^2$ , а также средние значения координаты  $\langle x \rangle$  и энергии состояния  $\langle E \rangle$  в произвольный момент времени. Здесь  $\psi_n(x), n = 0, 1, 2, \dots$  - собственные функции оператора Гамильтона в осцилляторном потенциале.

11.15. В бесконечно глубокой прямоугольной одномерной потенциальной яме волновая функция в начальный момент времени имеет вид  $\psi(x, t = 0) = (\phi_1(x) + \phi_3(x)) / \sqrt{2}$ . Как изменяются во времени среднее значение координаты частицы  $\langle x(t) \rangle$  и дисперсия координаты; каково среднее значение энергии  $\langle E(t) \rangle$ ?  $\phi_n(x)$  - собственные функции,  $E_n$  - соответствующие собственные значения оператора Гамильтона,  $n = 1, 2, 3, \dots$ .

11.16. В бесконечно глубокой прямоугольной одномерной потенциальной яме среднее значение координаты частицы  $\langle x(t) \rangle$  осциллирует с частотой  $\omega = 3E_1 / \hbar$ . Напишите выражение для волновой функции и плотности вероятности в произвольный момент времени.  $E_1$  - энергия низшего

уровня. Как изменяется во времени дисперсия координаты  $D_x(t) = \langle x^2(t) \rangle - \langle x(t) \rangle^2$ ?

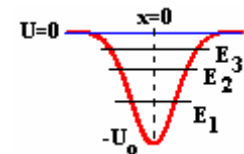
11.17. В начальный (нулевой) момент времени волновая функция линейного гармонического осциллятора имеет вид  $\psi(x) = (\alpha\psi_0(x) + \beta\psi_1(x))$ , здесь  $\psi_n(x)$  - волновая функция стационарного состояния осциллятора,  $\alpha, \beta$  - действительные числа, причем  $\alpha^2 + \beta^2 = 1$ . Какие, и с какой вероятностью значения энергии могут быть измерены в этом состоянии? Как зависит от времени распределение плотности вероятности обнаружить частицу в различных точках пространства?

11.18. Одномерная симметричная ( $U(-x) = U(x)$ ) потенциальная яма содержит всего три уровня. Среднее значение координаты частицы осциллирует с некоторой частотой  $\omega$ :  $\langle x(t) \rangle = A \cos(\omega t)$ ;  $A = \text{const}$ . Уровни энергии  $E_{1,2,3}$  и собственные функции  $\phi_{1,2,3}(x)$  оператора Гамильтона считать известными. Определить возможные значения частоты; написать возможные выражения волновых функций в произвольный момент времени.

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

11.20. Одномерная симметричная ( $U(-x) = U(x)$ ) потенциальная яма содержит всего три уровня. Среднее значение координаты частицы:  $\langle x(t) \rangle = 0$ . Дисперсия координаты осциллирует  $D_x = c_1 + c_2 \cos(\omega t)$ ;  $c_1, c_2$  - постоянные. Уровни энергии  $E_{1,2,3}$  и собственные функции  $\phi_{1,2,3}(x)$  оператора Гамильтона считать известными. Найти частоту и написать возможное выражение волновой функции в произвольный момент времени.

11.21. Пусть в одномерной потенциальной яме  $U(x) = -U_0 \exp(-x^2/a^2)$  содержится всего 3 уровня (см. рис). Энергии уровней  $E_{1,2,3}$  и волновые функции  $\phi_{1,2,3}(x)$  - известны. Какие значения частоты (частот) осцилляций среднего значения координаты  $\langle x(t) \rangle$  можно наблюдать в такой системе? Нарисуйте качественный вид волновых функций  $\phi_{1,2,3}(x)$ .



11.22. Состояние частицы в одномерном гармоническом потенциале в начальный момент времени характеризуется некоторой функцией  $\phi(x)$ . Найти временной закон изменения квантовых средних  $\langle x \rangle$  и  $\langle x^2 \rangle$ , вычисляемых по нестационарной волновой функции  $\psi(x, t)$ , полученной из решения нестационарного уравнения Шредингера.

11.23. Написать волновую функцию состояния атома водорода, в котором среднее значение энергии равно  $-Ry/2$ . Как в этом состоянии плотность вероятности  $|\psi|^2$  зависит от времени?

11.24. Написать волновые функции хотя бы двух различных состояний атома водорода, в которых среднее значение энергии равно  $-Ry/4$ . Как в этих состояниях плотность вероятности  $|\psi|^2$  зависит от времени? Может ли состояние с такой средней энергией быть нестационарным?

11.25. В начальный (нулевой) момент времени состояние электрона в атоме водорода задано волновой функцией  $\psi(\vec{r}) = (\psi_{2s} + \psi_{2p,m=0})/\sqrt{2}$ , здесь  $\psi_{2s}$  и  $\psi_{2p,m=0}$  - волновые функции стационарных состояний. Какие, и с какой вероятностью значения энергии могут быть измерены в этом состоянии? Как зависит от времени радиальное распределение плотности вероятности обнаружить частицу в различных точках пространства и среднее значение  $z$  - проекции координаты  $\langle z(t) \rangle$  (дипольный электрический момент)?

11.26. В начальный (нулевой) момент времени состояние электрона в атоме водорода задано волновой функцией  $\psi(\vec{r}) = (\psi_{1s} + \sqrt{2}\psi_{2s})/\sqrt{3}$ , здесь  $\psi_{1s}$  и  $\psi_{2s}$  - волновые функции стационарных состояний. Какие, и с какой вероятностью значения энергии могут быть измерены в этом состоянии? Как зависит от времени распределение плотности вероятности обнаружить частицу в различных точках пространства, а также средние значения энергии  $\langle E \rangle$  и  $z$  - проекции координаты  $\langle z(t) \rangle$  (дипольный электрический момент)?

11.27. Волновая функция электрона в кулоновском потенциале имеет вид:  $\psi(\vec{r}, t) = C \exp\left(-\frac{r}{r_1} - \frac{iE_1 t}{\hbar}\right)$ . Найти константы  $C$ ,  $r_1$ ,  $E_1$ , если известно, что потенциал создан точечным неподвижным зарядом  $Ze$ .

## 12. Нестационарная теория возмущений. Взаимодействие квантовой системы с электромагнитным полем.

1. В электрическом дипольном приближении оператор взаимодействия атомной системы с полем электромагнитной волны записывается как

$$\hat{W}(\vec{r}, t) = -(\vec{d}\vec{\varepsilon}(t)),$$

где  $\vec{d}$  - электрический дипольный момент системы,  $\vec{\varepsilon}$  - электрическое поле волны, полагаемое пространственно однородным.

2. Амплитуда вероятности перехода за время  $t$  из некоторого начального стационарного состояния  $\phi_i$  атомного гамильтониана  $\hat{H}_0$  в конечное состояние  $\phi_f$ , обусловленного внешним воздействием на систему  $\hat{W}(\vec{r}, t)$ , в первом порядке теории возмущений есть

$$C_{fi}(t) = -\frac{i}{\hbar} \int_{t^*}^t \langle \phi_f | \hat{W}(\vec{r}, t) | \phi_i \rangle \exp(i\omega_{fi}t) dt = -i \frac{\vec{d}_{fi}}{\hbar} \int_{t^*}^t \vec{\varepsilon}(t) \exp(i\omega_{fi}t) dt,$$

где  $\omega_{fi} = (E_f - E_i)/\hbar$  - частота перехода,  $d_{fi}$  - матричный элемент оператора дипольного момента,  $t^*$  - некоторый начальный момент времени.

Во втором порядке:

$$C_{fi}^{(2)}(t) = \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \sum_n \int_{t^*}^t dt' \langle \phi_f | \hat{W}(\vec{r}, t') | \phi_n \rangle \exp(i\omega_{fn}t') \int_{t^*}^{t'} dt'' \langle \phi_n | \hat{W}(\vec{r}, t'') | \phi_i \rangle \exp(i\omega_{ni}t''),$$

где суммирование проводится по всем промежуточным состояниям системы.

3. Коэффициент Эйнштейна вынужденного перехода определяется таким образом, что  $B_{fi}I_\omega$  - вероятность вынужденного (индуцированного) перехода  $i \rightarrow f$  в единицу времени;  $I_\omega$  - спектральная интенсивность излучения на частоте перехода.

4. Спонтанные переходы. Коэффициент Эйнштейна спонтанного перехода из начального состояния  $\phi_i$  в состояние  $\phi_f$ :

$$A_{fi} = \frac{4\omega^3}{3\hbar c^3} |d_{fi}|^2.$$

Здесь  $\omega = (E_i - E_f)/\hbar$  - частота перехода.

5. Связь между коэффициентами Эйнштейна

$$A_{ji} = \frac{1}{\pi^2} \frac{\hbar \omega^3}{c^2} B_{ji}$$

6. Естественная ширина линии перехода  $2 \rightarrow 1$

$$\Delta\nu \cong 1/\tau = A_{12},$$

$\tau$  - среднее время жизни атома на уровне 2.

7. Сечение фотопоглощения монохроматического излучения с частотой  $\omega$  в центре линии перехода  $1 \rightarrow 2$ , характеризующейся лоренцевым контуром с шириной  $\gamma$

$$g(\omega) = \frac{\gamma/2\pi}{(\omega - \omega_0)^2 + \gamma^2/4};$$

$$\sigma_{21} = \left(\frac{\lambda}{2\pi}\right)^2 \frac{A_{12}}{\delta\nu}$$

здесь  $\delta\nu = \gamma$  - ширина спектральной линии,  $\lambda = 2\pi c/\omega$ . В случае, если

$$\text{ширина является естественной } \delta\nu = A_{12}, \text{ и } \sigma_{21} = \left(\frac{\lambda}{2\pi}\right)^2.$$

8. Столкновительное уширение приводит к лоренцевой форме линии с шириной  $\gamma \approx \nu$ ,  $\nu$  - частота столкновений.

12.1. Электрон находится в бесконечно глубокой прямоугольной потенциальной яме в основном состоянии. В первом порядке теории возмущений определить вероятность возбуждения лазерным импульсом прямоугольной формы с интенсивностью  $P$  и длительностью  $\tau$ . Считать, что частота излучения удовлетворяет условиям  $\omega_0\tau \gg 1$ ,  $|\omega_{21} - \omega_0|/\omega_0 \ll 1$ . Здесь  $\omega_{21} = (E_2 - E_1)/\hbar$  - частота перехода между основным и нижним возбужденным состояниями.

12.2. Решить задачу 12.1 в предположении гауссовой формы лазерного импульса  $E = E_0 \exp\left(-\frac{t^2}{2\tau^2}\right) \cos(\omega_0 t)$ . Считать, что  $\omega_0\tau \gg 1$ ,

$|\omega_{21} - \omega_0|/\omega_0 \ll 1$ . Как и почему вероятность возбуждения зависит от длительности лазерного импульса?

12.3. Электрон находится в бесконечно глубокой прямоугольной потенциальной яме в основном состоянии. Во втором порядке теории возмущений оценить вероятность возбуждения лазерным импульсом прямоугольной формы с интенсивностью  $P$  и длительностью  $\tau$ . Считать, что

частота излучения удовлетворяет условиям  $\omega_0\tau \gg 1$ ,  $|\omega_{31} - \omega_0|/\omega_0 \ll 1$ . Здесь  $\omega_{31} = (E_3 - E_1)/\hbar$  - частота перехода между состояниями  $|1\rangle$  и  $|3\rangle$ .

12.4. Определить вероятность фотоионизации атома водорода в состоянии  $1s$  линейно поляризованным импульсом излучения гауссовой формы  $E = E_0 \exp\left(-\frac{t^2}{2\tau^2}\right) \cos(\omega_0 t)$ . Считать, что  $\omega_0\tau \gg 1$  и  $\hbar\omega \gg |E_{1s}|$ .

Указание: Состояния электрона в континууме аппроксимировать плоской волной де Бройля.

12.5. Для двухуровневого атома найти волновую функцию и дипольный момент  $\langle d \rangle = e\langle z \rangle$  при воздействии на него линейно поляризованного поля с частотой  $\omega_0$ . В начальный момент времени система невозбуждена. Рассмотреть случаи мгновенного и адиабатически плавного включения поля. При адиабатически плавном включении поля считать, что напряженность электрического поля изменяется по закону

$$\varepsilon(t) = \begin{cases} \varepsilon_0 e^{\lambda t} \cos \omega_0 t, & t < 0, \quad \lambda \rightarrow 0 \\ \varepsilon_0 \cos \omega_0 t, & t > 0. \end{cases}$$

12.6. Электрон находится в гармоническом потенциале с частотой  $\omega_0$  в состоянии с минимальной энергией. Определить средний по квантовому состоянию дипольный момент системы в электромагнитном поле с частотой  $\omega \neq \omega_0$ . Сравнить результаты квантового и классического решения задачи в случае мгновенного и адиабатически медленного включения поля.

12.7. Определить поляризуемость среды, разреженного газа с концентрацией атомов  $N$ , в электромагнитном поле с частотой  $\omega$  близкой к частоте атомного перехода  $\omega \approx \omega_0$ . Считать атомы среды гармоническими осцилляторами с частотой  $\omega_0$ . Полученный результат сравнить с классическим решением задачи. Считать, что поле включается адиабатически медленно. В отсутствие поля атомы находятся в основном состоянии.

12.8. Определить поляризуемость среды, разреженного газа, состоящего из невозбужденных атомов водорода, в низкочастотном электромагнитном поле  $\hbar\omega \ll I$  ( $I$  - потенциал ионизации), концентрация атомов -  $N$ . Считать, что поле включается адиабатически медленно.

12.9. Показать, что для произвольной квантовой системы с центрально-симметричным потенциалом квадратичная восприимчивость равна нулю.

12.10. Атом водорода находится в основном состоянии  $1s$ . В какие возбужденные состояния  $|nlm\rangle$  в дипольном приближении разрешены переходы в линейно поляризованном электромагнитном поле? Тонкую структуру спектра не учитывать. Указание: Ось квантовая орбитального момента направить вдоль вектора электрического поля волны.

12.11. Атом водорода находится в основном состоянии  $1s$ . В какие возбужденные состояния  $|nlm\rangle$  в дипольном приближении разрешены переходы в циркулярно поляризованном электромагнитном поле? Тонкую структуру спектра не учитывать. Указание: Ось квантовая орбитального момента направить вдоль волнового вектора поля волны.

12.12. Квантовая система с центрально-симметричным потенциалом подвергается воздействию поля электромагнитной волны с линейной поляризацией. Сформулировать правила отбора для переходов, разрешенных во втором порядке теории возмущений.

12.13. В дипольном приближении определить вероятности спонтанных переходов между стационарными состояниями частицы с зарядом  $e$  в гармоническом потенциале.

12.14. В дипольном приближении определить вероятности спонтанных переходов между различными стационарными состояниями электрона в трехмерной бесконечно глубокой прямоугольной потенциальной яме размером  $a \times a \times a$ .

12.15. Определить время спонтанного перехода  $2p \rightarrow 1s$  в водородоподобном ионе с зарядом ядра  $Z$ . Как время жизни зависит от заряда ядра?

12.16. Оценить естественную ширину головной линии серии Лаймана в спектре атома водорода.

12.17. Оценить время спонтанного перехода между компонентами сверхтонкой структуры основного состояния атома водорода. (Длина волны перехода  $\lambda = 21$  см). Указание: Данный переход является магнитно-дипольным, поэтому в выражении для вероятности перехода вместо матричного элемента электрического дипольного момента стоит матричный элемент магнитного дипольного момента системы.

12.18. Оценить время жизни  $2p$  состояния атома лития относительно спонтанного распада. Длина волны перехода  $2p \rightarrow 2s$  составляет  $\lambda = 6707$  А.

12.19. Оценить характерное время жизни возбужденного атомного ядра относительно излучения  $\gamma$ -кванта. Считать, что  $E_\gamma \approx 1$  МэВ, и  $\gamma$ -переход разрешен в электрическом дипольном приближении.

12.20. Показать, что в атоме гелия в электрическом дипольном приближении переходы между синглетными и триплетными состояниями запрещены (запрет интеркомбинаций).

12.21. (9-2.) Сравните газокинетическое сечение атома натрия  $\sigma \approx 6 \cdot 10^{-16}$  см<sup>2</sup> с сечением фотопоглощения его резонансной линии  $\lambda = 5890$  Å. Атом считать изолированным и неподвижным.

12.22. (9-3.) Излучение с “белым” спектром проходит через кювету длиной  $L = 10$  см, заполненную парами натрия с плотностью  $N = 10^{19}$  см<sup>-3</sup> при температуре 500 К. Каким будет соотношение интенсивностей в центрах линий поглощения (см. рис.1) резонансного дублета  $3s \rightarrow 3p$ ?

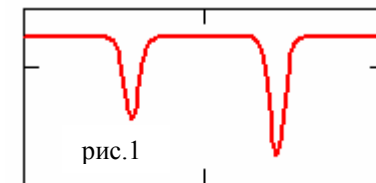


рис.1

Уширение линий считать столкновительным. Время жизни обоих верхних уровней дублета  $\tau = 2 \cdot 10^{-8}$  с.

12.23. (9-4.) Оптический резонатор состоит из двух параллельных плоских зеркал (коэффициенты отражения –  $r_1 = 0.95$ ,  $r_2 = 0.98$ ), между которыми находится оптически активное вещество. Каким должен быть его коэффициент усиления  $k$ , чтобы излучение после одного обхода резонатора (см. рис.2) вернулось бы в исходную точку (\*) с интенсивностью, не меньшей, нежели была при старте. Длина резонатора  $L = 100$  см.

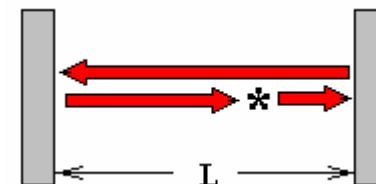


рис.2

12.24. (9-5.) Чему равна пороговая инверсная населенность  $\Delta N$  в рубиновом лазере с длиной волны излучения  $\lambda = 6943$  Å, если его резонатор длиной  $L = 10$  см имеет зеркала с коэффициентами отражения  $r_1 = 1$ ,  $r_2 = 0.98$ ? Ширина спектральной линии  $\Delta k = 11.2$  см<sup>-1</sup>, время жизни верхнего уровня  $\tau \approx 3 \cdot 10^{-3}$  с.

12.25. (9-6.) Определить коэффициент поглощения излучения  $k$  на частоте  $\omega$ , полагая, что: а) атомы газа могут находиться только в двух энергетических состояниях:  $E_1$  - основном и  $E_2$  - возбужденном;  $E_2 - E_1 = \hbar\omega$  (см. рис.3); б) уровни невырождены; в) распределение их по уровням – бальцовское; г) при прохождении излучения через вещество имеет место лишь поглощение фотонов и индуцированное излучение.

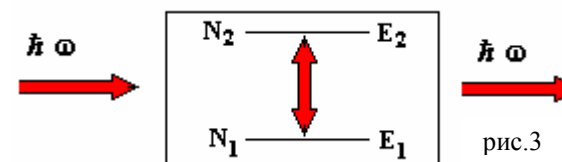


рис.3

12.26. (9-7.) Можно ли, возбуждая излучением двухуровневые атомы (см. задачу 12.21), создать инверсную населенность?

12.27. (9-8.) Полагая, что расходимость лазерного пучка в основном обусловлена дифракционными эффектами, оцените плотность мощности  $W$  лазерного излучения вблизи фокуса идеальной собирающей линзы (фокусное расстояние  $f = 10$  см). Мощность лазера  $P = 1$  МВт, диаметр его пучка  $d = 1$  см, длина волны излучения  $\lambda = 1$  мкм.

12.28. (9-10.) Для создания стандартов частоты (длины) необходимо иметь излучение неподвижных и невзаимодействующих атомов. Одним из способов создания такого “вещества” является остановка пучка атомов встречным излучением лазера, настроенного на частоту резонансного перехода в атоме (эффект Доплера компенсируется перестройкой частоты излучения лазера). Поглощая встречные кванты излучения лазера и спонтанно испуская их в произвольном направлении при обратном переходе, атомы замедляются до весьма малых скоростей. Сколько квантов должен поглотить атом массой  $M$  и начальной скоростью  $v$  до полной остановки? Какой должна быть интенсивность излучения лазера ( $\text{Вт}/\text{см}^2$ ), чтобы остановить атомы за минимальное время и на минимальной длине? Какова величина ускорения атома? Оценки произведите для атомов натрия с начальной скоростью  $10^5$  см/с. Эффективное сечение индуцированного излучения примите равным  $\sigma = (\lambda/2\pi)^2$ ;  $\lambda = 5890$  Å. Время жизни возбужденного состояния  $\tau = 2 \cdot 10^{-8}$  с.

### Строение электронной оболочки атома

**13. Многоэлектронные атомы. Атомные оболочки и подоболочки. Электронная конфигурация. Сложение угловых моментов. Терм атома. Правила Хунда.**

1. Состояние электрона в центрально-симметричном потенциале в многоэлектронном атоме определяется четырьмя квантовыми числами эти числа суть:

$n$  - главное квантовое число;

$\ell$  - квантовое число орбитального момента импульса;

$m_\ell$  - проекция орбитального момента на выделенное направление;

$m_s$  - проекция спина электрона на выделенное направление;

Вместо последней пары чисел могут быть введены:

$j$  - квантовое число полного момента импульса электрона;

$m_j$  - проекция полного момента импульса электрона на выделенное направление.

2. **Принцип Паули:** В физической системе, состоящей из многих ферми-частиц, в одном состоянии не может находиться более одного фермиона. Его альтернативная формулировка: Волновая функция системы фермионов должна изменять знак (быть антисимметричной) при перестановке двух фермионов.

3. **Оболочка** - совокупность электронов с одинаковым значением главного квантового числа  $n$ .

4. **Подоболочка** - совокупность электронов с одинаковыми значениями главного и орбитального квантовых чисел  $n$  и  $\ell$ . Электроны одной подоболочки называются **эквивалентными**.

Орбитальный момент электрона обозначается буквой в соответствии со схемой:

Момент	$\ell =$	0	1	2	3	4	5	6	...
Обозначение состояния		s	p	d	f	g	h	i	...

5. **Электронная конфигурация** - распределение электронов по оболочкам и подоболочкам - квантовым числам  $n$  и  $\ell$ .

Обозначение группы из  $k$  электронов с квантовым числом орбитального момента  $\ell$  и главным квантовым числом:

$$n\ell^k,$$

число  $\ell$  обозначается буквой в соответствии с приведенной выше схемой.

6. Число электронов в заполненной подоболочке (число состояний в подоболочке) равно  $2(2\ell+1)$ .

7. Число электронов в заполненной оболочке (число состояний в оболочке) равно:

$$\sum_{\ell=0}^{n-1} 2(2\ell+1) = 2n^2$$



8. Общее правило сложения моментов импульса. Квантовое число суммарного момента импульса  $\mathbf{J} = \mathbf{j}_1 + \mathbf{j}_2$  принимает следующие значения:

$$J = |j_1 - j_2|, |j_1 - j_2| + 1, \dots, j_1 + j_2 - 1, j_1 + j_2.$$

### 9. Типы связей моментов в атоме.

Нормальная LS –связь:  $\vec{L} = \sum \vec{l}_i$ ;  $\vec{S} = \sum \vec{s}_i$ ;  $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$ ;

$$jj\text{-связь: } \vec{j}_i = \vec{l}_i + \vec{s}_i; \quad \vec{J} = \sum \vec{j}_i;$$

суммирование проводится по всем электронам конфигурации, квантовые числа суммарных моментов находятся по общему правилу. Ниже везде, за исключением специально оговоренных случаев, будем иметь в виду LS –связь.

10. Заполнение одноэлектронных состояний регламентируется следующим правилом:

а) энергия одноэлектронных состояний  $n\ell$  возрастает вместе с ростом  $(n+\ell)$ ;

б) в группе состояний с одинаковым значением суммы  $n+\ell$  энергия одноэлектронных состояний  $n\ell$  возрастает вместе с ростом  $n$ .

11. В заданной электронной конфигурации квантовые числа  $L$  и  $S$  определяют ее **терм**.

Обозначение термина: заглавной буквой обозначается квантовое число  $L$  в соответствии со схемой (сравн. с обозначением одноэлектронных состояний):

Момент	L=	0	1	2	3	4	5	6	...
Обозначение термина		S	P	D	F	G	H	I	...

Слева вверху указывается мультиплетность термина, равная, **по определению**,  $2S+1$ . Таким образом, **обозначение термина** есть:  $^{2S+1}L$

Терм характеризуется также **четностью** конфигурации, которой он принадлежит; она равна

$$P = (-1)^{\sum \ell_i};$$

алгебраическое суммирование по всем электронам конфигурации.

12. Правила Хунда – правила, позволяющие определить основной терм (терм с наименьшей энергией) в заданной электронной конфигурации.

1) Среди термов, принадлежащих к одной конфигурации, наиболее глубоким (имеющим наименьшую энергию) является терм с наибольшим возможным в этой конфигурации значением полного спина  $S$ ;

2) Среди термов с одинаковым спином  $S$  наиболее глубоким является терм с наибольшим значением полного орбитального момента  $L$ .

13.1. (7-1.) Найдите значения суммарного орбитального момента в следующих электронных конфигурациях

$$ns\ n's, sp, sd, np\ n'p, pd, pf, df.$$

13.2. (7-2.) Найдите значения суммарного орбитального момента в трехэлектронной конфигурации pdf. Сравните различные последовательности сложения  $pd(L')f$ ,  $pf(L')d$ ,  $df(L')p$ ,  $L'$  - квантовое число промежуточного момента - суммарного орбитального момента первых двух электронов.

13.3. (7-5.) Найдите термы двухэлектронной конфигурации pd; укажите четность термов.

13.4. (7-6.) Найдите термы трехэлектронной конфигурации pdf; укажите четность термов (см. задачу 13.2.).

13.5. (7-7.) Найдите термы двух неэквивалентных p–электронов; укажите четность термов.

13.6. (7-8.) Сколько эквивалентных p–электронов, d–электронов и f–электронов могут находиться в одной оболочке? Каковы главные квантовые числа этих оболочек?

13.7. (7-9.) Определите термы заполненной подоболочки и заполненной оболочки.

13.8. (7-10.) Найдите терм конфигурации, состоящей из единственного электрона поверх заполненной подоболочки. Например:  $s^2p$ ;  $d^{10}s$ ;  $s^2f$ .

13.9. (7-11.) Составьте конфигурацию почти заполненной подоболочки p – электронов - заполненной подоболочки с одной дыркой - вынутым электроном. Какие элементы периодической системы имеют такие конфигурации наружных электронов? Найдите термы такой подоболочки. Сделайте то же самое для подоболочек d- и f- электронов.

13.10. (7-12.) Найдите термы конфигураций эквивалентных электронов  $p^2$  (атомы C, Si, Ge, Sn) и  $d^2$  (атомы Ti, Zr, Gf) (сравн. с задачей 13.5).

13.11. (7-13.) Сравните термы двухэлектронных конфигураций  $p^2$  и  $d^2$  с термами двухдырочных конфигураций  $p^4$  и  $d^8$  (см задачу 13.10).

13.12. (7-14.) Найдите низшие термы (имеющие наименьшую энергию) конфигураций  $p^2$  и  $d^2$  (см задачу 13.10).

13.13. (7-15.) Найдите низшие термы двухдырочных конфигураций  $p^4$  и  $d^8$ , сравните их с термами двухэлектронных конфигураций  $p^2$  и  $d^2$  (см задачу 13.12).

13.14. (7-16.) Найдите электронную конфигурацию и низший терм возбужденного атома азота ( $Z=7$ ).

13.15. (7-17.) Найдите низший терм электронной конфигурации  $d^3$  (атомы ванадия V, тантала Ta, нильсбория Ns).

13.16. (7-18.) Найдите термы возбужденного атома углерода; возбужденный электрон находится в одном из состояний ns, np, или nd,  $n>2$ . Укажите четность термов.

13.17. (7-19). Найдите термы возбужденного атома азота; возбужденный электрон - в одном из состояний ns, np, или nd,  $n > 2$ . Укажите четность термов. Сначала найдите *терм атомного остатка* (иона), состоящего из эквивалентных электронов - *родительский терм*, затем сложите моменты возбужденного электрона с моментами родительского терма.

13.18. (7-26). Показать, что механические, а, следовательно, и магнитные моменты  $L$ ,  $S$ ,  $J$ ,  $\mu_L$ ,  $\mu_S$ ,  $\mu_J$  замкнутых оболочек и подоболочек равны нулю.

13.19. (7-29). Один из электронов атома гелия имеет главное квантовое число  $n=2$ . Записать возможные электронные конфигурации и термы.

13.20. (7-30). Показать, что терм  $^3S_1$  атома He не может быть основным.

13.21. (7-31). Определить основное состояние атома марганца (электронная конфигурация  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^5 4s^2$ ) и иона  $Mn^{++}$  (удалены 4s электроны).

13.22. (7-32). Построить основные электронные конфигурации двухзарядного иона аргона и атома кальция.

13.23. (7-33). Записать конфигурации и определить основные состояния атомов цинка и стронция.

13.24. (7-34). Определите основное состояние атома хрома, электронная конфигурация которого  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^5 4s$ .

13.25. (7-35). Определите основной терм атомов, электронная конфигурация незаполненной оболочки которых  $d^3$  и  $d^7$ .

13.26. Найти основной терм и основное состояние атома в электронных конфигурациях  $d^5$ ,  $f^7$ .

13.27. Найти основной терм и основное состояние атома в электронной конфигурации  $d^6$ ,  $f^8$ .

13.28. (7-36). Найти основной терм атома, электронная конфигурация незаполненной оболочки которого  $4f^6 6s^2$  (самарий Sm).

13.29. (7-37). Установите основной терм атома, электронная конфигурация незаполненной оболочки которого  $4f^7 5d 6s^2$  (гадолиний Gd).

13.30. Напишите электронные конфигурации первых десяти элементов таблицы Менделеева. Воспользовавшись правилами Хунда, определите их основные термы.

13.31. Напишите электронные конфигурации элементов таблицы Менделеева с  $Z=11-20$ . Воспользовавшись правилами Хунда определите их основные термы.

13.32. Среди первых двадцати элементов таблицы Менделеева выделите элементы, у которых основной терм является синглетом. Запишите соответствующие электронные конфигурации.

13.33. Среди первых двадцати элементов таблицы Менделеева выделите элементы, у которых основным является S - терм. Запишите соответ-

ствующие электронные конфигурации. Определите мультиплетность термина.

13.34. В атоме углерода один из электронов из 2p-подоболочки находится в состоянии с главным квантовым числом  $n = 3$ . Записать все возможные электронные конфигурации и соответствующие им термы.

13.35. Определить все возможные термы возбужденного атома лития с электронной конфигурацией  $1s^1 2s^1 3s^1$ . Какой терм в данной конфигурации имеет наименьшую энергию?

13.36. В приближении  $LS$  связи определить термы, принадлежащие конфигурации  $np^3$ .

13.37. (7-3.) Известно, что число состояний данной электронной конфигурации не зависит от типа связи. Покажите это на примере  $np\ n'd$  - конфигурации для LS- и  $jj$ - связей. Запишите соответствующие спектроскопические обозначения.

13.38. В изoeлектронной последовательности гелиеподобных ионов ( $He, Li^+, Be^{2+}, \dots, U^{90+}$ ) определить заряд ядра  $Z$ , при котором нормальная  $LS$  связь сменяется  $jj$  связью.

13.39. Определить возможные термы и состояния, принадлежащие электронным конфигурациям  $np, n'p$  и  $np^2$ , в приближении  $LS$  и  $jj$  связей.

13.40. (7-4.) В сильно возбужденных состояниях атомов встречается так называемая  $j\ell$ - связь. Порядок сложения моментов определяемый взаимодействиями в атоме, следующий:

$$\mathbf{J} = (\mathbf{j} + \mathbf{l}) + \mathbf{s} = \mathbf{K} + \mathbf{s}.$$

Здесь  $\mathbf{J}$  - момент импульса атома,  $\mathbf{j}$  - атомного остатка,  $\mathbf{l}$  - орбитальный момент возбужденного электрона  $\mathbf{s}$  - его спин,  $\mathbf{K}$  - промежуточный момент. Найдите значение  $J$  для возбужденного p -электрона если  $j = 3/2$ .

**14. Тонкая и сверхтонкая структура атомных спектров.**

1. Если не учитывать спин-орбитальное взаимодействие, все уровни одного термина, имеющие разные значения полного момента импульса, **вырождены**. Спин-орбитальное взаимодействие расщепляет терм в мультиплет в соответствии с правилом Ланде:

- если подоболочка заполнена менее чем наполовину, наименьшую энергию имеет уровень с наименьшим значением  $J$  - нормальный мультиплет;

- если подоболочка заполнена более чем наполовину, наименьшую энергию имеет уровень с наибольшим значением  $J$  - обращенный мультиплет.

- если подоболочка заполнена ровно наполовину - терм нерасщеплен (существует единственное состояние с заданным  $J$ ).



Оператор спин-орбитального взаимодействия в атоме записывается в виде  $\hat{V}_{LS} = A(\hat{L}\hat{S})$ , где  $\hat{L}$  и  $\hat{S}$  - операторы орбитального и спинового моментов электронной оболочки атома,  $A$  - константа связи моментов, определяемая видом волновой функции многоэлектронного атома, описывающей заданный терм. Спин-орбитальное взаимодействие приводит к сдвигу уровня с полным моментом  $J$  относительно нерасщепленного термина

$$\Delta E_J = \frac{A}{2}(J(J+1) - L(L+1) - S(S+1)).$$

**Правило интервалов Ланде** регламентирует расщепление термина в мультиплет:

$$\Delta E_{J,J-1} = A J;$$

$A > 0$ , если  $k < 2\ell + 1$ , нормальный мультиплет;

$A < 0$ , если  $k > 2\ell + 1$ , обращенный мультиплет;

$A = 0$ , если  $k = 2\ell + 1$ , терм нерасщеплен;

$k$  - число электронов в конфигурации  $\ell^k$ .

2. Сверхтонкая структура уровня возникает в результате взаимодействия магнитного момента электронной оболочки атома с магнитным моментом атомного ядра. Это взаимодействие может быть записано в виде

$$\hat{V} = B \left( \frac{\hat{J}\hat{I}}{J I} \right), \text{ где } \hat{J}, \hat{I} - \text{операторы механического момента электронной}$$

оболочки атома и спина ядра соответственно,  $B$  - константа связи взаимодействия. В результате сверхтонкого взаимодействия уровень расщепляется на несколько компонент, число которых определяется числом возможных значений полного механического момента атома  $\vec{F} = \vec{J} + \vec{I}$ .

Сдвиг компоненты сверхтонкой структуры с полным моментом  $F$  относительно нерасщепленного уровня равен

$$\Delta E_F = \frac{B}{2}(F(F+1) - J(J+1) - I(I+1));$$

Правило интервалов Ланде для сверхтонкой структуры:  $\Delta F_{F,F-1} = BF$ ,  $B > 0$ .

14.1. В приближении LS связи найти все возможные термы в конфигурациях

- a)  $d^2s$ ;
- b)  $d^2p$ ;
- c)  $nd^2 n'd$ ;

Найти основной терм и указать, сколько компонент имеет его тонкая структура.

14.2. Напишите электронную конфигурацию, в которой основной терм является

- a) кваттетом, б) квинтетом.

Определите основное состояние в этой конфигурации.

14.3. Напишите электронную конфигурацию, в которой основным является D-терм. Определите основное состояние в этой конфигурации.

14.4. 7-20. Напишите электронные конфигурации и низший терм элементов второго периода периодической системы, укажите четность термина и определите его расщепление - нормальное или обращенное.

14.5. (7-21). На

рис.1 изображены мультиплеты основных термов атомов углерода и кислорода. Найдите отношение расщеплений в мультиплетах  $\Delta E_1/\Delta E_2$ .

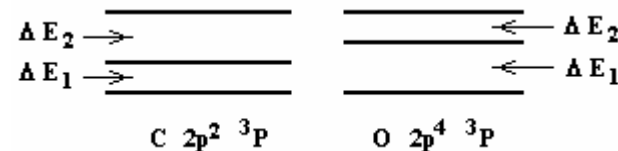


рис.1

14.6. (7-22). На рис.2 изображен мультиплет основного термина атома серы ( $Z=16$ ) с указанием величин расщеплений. Определите величину константы связи моментов в формуле Ланде.

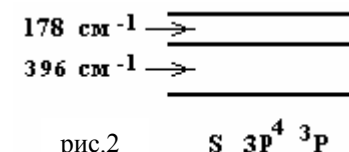


рис.2

14.7. (7-24). Изобразите расщепление основного термина атома Nd, электронная конфигурация атома  $4f^4 6s^2$ . Определите терм и соотношение интервалов между уровнями.

14.8. Компоненты тонкой структуры многоэлектронного атома характеризуются значениями квантового числа  $J = 1, 2, 3$ . Найти все возможные термы, дающие такую картину тонкого расщепления.

14.9. Элемент с  $Z=23$ . Определить число компонент тонкой структуры основного термина. Воспользовавшись правилом интервалов Ланде определить положение уровней относительно нерасщепленного мультиплета. Расщепление термина на мультиплет изобразить графически.

14.10. Определить число компонент тонкой структуры основного термина однократно заряженного иона аргона ( $Z=18$ ). Воспользовавшись правилом интервалов Ланде определить положение уровней относительно нерасщепленного мультиплета. Расщепление термина на мультиплет изобразить графически.

14.11. Какие элементы  $Z \leq 10$  имеют нерасщепленные основные термы?

14.12. Напишите электронные конфигурации первых десяти элементов таблицы Менделеева. У каких из этих элементов отсутствует тонкая структура основного термина.

14.13. Мультиплетность основного термина иона  $O^+$  равна 4. Каково тонкое расщепление этого термина?

14.14. Используя правило интервалов Ланде, изобразите расщепление низшего термина иона  $F^+$  ( $Z=9$ ) в основной конфигурации, укажите соотношения интервалов.

14.15. Сколько компонент имеет тонкая структура нижнего возбужденного состояния атомов неона ( $Z=10$ ) и натрия ( $Z=11$ ). Оценить величину расщепления.

14.16. Сколько компонент имеет тонкая структура нижнего возбужденного состояния атома гелия ( $Z=2$ ). Оценить величину расщепления.

14.17. С учетом тонкой структуры энергетический уровень некоторого термина атома расщепился на 3 подуровня, соответствующие различным возможным значениям полного момента импульса атома  $J$ . Причем, отношение  $(\Delta E_3 - \Delta E_2) : (\Delta E_2 - \Delta E_1)$  было измерено в эксперименте и оказалось равным  $=3/2$ . Учитывая, что полученный триплет является обращенным, найти терм и основное состояние атома.

14.18. При каких условиях величина мультиплетности атомного термина указывает число компонент тонкой структуры? Приведите примеры, иллюстрирующие ответ.

14.19. Напишите электронные конфигурации элементов третьего периода таблицы Менделеева ( $Z=11-18$ ). У каких из этих элементов тонкая структура основного термина состоит из двух компонент?

14.20. Напишите возможные состояния, соответствующие термам:  $^2P, ^3D, ^4F, ^3P, ^2D, ^4P$ .

14.21. (7-39). Возможны ли следующие состояния:  $^2S_{1/2}, ^3S_0, ^3P_0, ^3S_{1/2}, ^2S_{1/2}, ^3D_0, ^2D_{1/2}$ ?

14.22. (7-40). Дописать недостающие компоненты мультиплетов:  $^2P_{3/2}, ^3D_1, ^4F_{5/2}, ^3P_2, ^5D_4, ^4P_{1/2}$ .

14.23. (5-11). Показать, что энергия тонкого спин-орбитального расщепления для водородоподобного иона имеет порядок величины  $\Delta E \approx \alpha^2 Z^4 R_y$ . Сделать численную оценку.

14.24. (5-12). Оценить энергию сверхтонкого расщепления в атоме водорода и длину волны излучения, испускаемого при переходе между подуровнями сверхтонкой структуры.

14.25. (7-25). На сколько компонент расщеплено основное состояние атома водорода сверхтонким взаимодействием?

14.26. Сколько компонент имеет сверхтонкая структура основного состояния атома дейтерия (спин дейтрона = 1)?

14.27. Спин ядра атома фтора  $^{19}F \quad I = 1/2$ . Сколько компонент имеет сверхтонкая структура его основного состояния?

14.28. (7-23.) На рис.3 изображено сверхтонкое расщепление основного состояния некоторого изотопа атома йода (терм  $p^5 \ ^2P$ ). Измеренное соотношение расщеплений мультиплета приблизительно описывается пропорцией:  $(E_4 - E_3) : (E_3 - E_2) : (E_2 - E_1) = 4:3:2$ . Определите спин ядра.

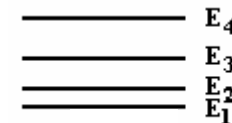


рис.3

14.29. Компоненты сверхтонкой структуры некоторого атома характеризуются значениями квантового числа  $F = 1, 2, 3, 4$ . Какие значения спина ядра возможны в этом случае?

14.30. Определить число компонент сверхтонкой структуры нижнего возбужденного состояния атома натрия  $^{22}_{11}Na$ . Воспользовавшись правилом интервалов Ланде определить положение подуровней относительно нерасщепленного состояния. Картина расщепления изобразить графически. Спин ядра  $I=3$ .

14.31. Определить число компонент сверхтонкой структуры основного состояния однократно заряженного положительного иона  $^{13}_6C$ . Воспользовавшись правилом интервалов Ланде определить положение подуровней относительно нерасщепленного состояния. Картина расщепления изобразить графически. Спин ядра  $I=1/2$ .

14.32. Определить количество компонент сверхтонкой структуры нижнего возбужденного состояния атомов  $^9_4Be$  (спин ядра  $I=3/2$ ) и  $^{17}_8O$  (спин ядра  $I=5/2$ ). Картина сверхтонкого расщепления изобразить графически.

14.33. Сколько компонент имеет сверхтонкая структура нижнего возбужденного состояния атома  $^{10}_5B$  (спин ядра  $I=3$ ). Оценить величину расщепления.

14.34. Сколько компонент имеет сверхтонкая структура нижнего возбужденного состояния атомов  $^7_3Li$  (спин ядра  $I=3/2$ ) и  $^3_2He$  (спин ядра  $I=1/2$ ). Оценить величину расщепления.

14.35. Можно ли, и если «да», то при каких условиях по числу компонент сверхтонкой структуры определить спин атомного ядра? Приведите примеры, иллюстрирующие ответ.

14.36. Спин и магнитный момент ядра отличны от нуля. Может ли так быть, что у некоторого атомного состояния отсутствует сверхтонкая структура? Ответ обоснуйте. Приведите примеры.

14.37. Определить спин ядра атома  $^{21}Ne$ , если известно, что сверхтонкая структура нижнего возбужденного состояния атома неона состоит из 4 компонент.

14.38. Спин ядра атома  $^{27}Al$   $I=5/2$ . Определить количество компонент тонкой и сверхтонкой структуры основного терма. Картины расщепления изобразить графически.

14.39. Спин ядра атома иода  $^{131}I$   $I=3/2$ . Определить количество компонент тонкой и сверхтонкой структуры основного терма. Картины расщепления изобразить графически.

14.40. С учетом сверхтонкой структуры энергетический уровень некоторого состояния атома с неизвестным полным моментом импульса электронной оболочки  $J$  расщепляется на 4 подуровня, соответствующие разным возможным значениям полного момента импульса атома  $F$ . Причем,  $(E_4-E_3):(E_3-E_2):(E_2-E_1)=3:2:1$ . Учитывая, что мультиплет нормальный, а спин ядра этого атома  $I=3/2$ , найти момент импульса электронной оболочки  $J$ .

14.41. Сверхтонкая структура основного состояния атома, имеющего конфигурацию  $p^4$ , состоит из трех компонент. Определить спин ядра.

14.42. Длина волны излучения, соответствующая переходам между компонентами сверхтонкой структуры основного состояния атома водорода, равна  $\lambda_H = 21$  см. Определить длину волны перехода между компонентами сверхтонкой структуры атома дейтерия  $\lambda_D$ , если известно, что спин протона  $I_p = 1/2$ , спин дейтрона  $I_D = 1$ , а гиромангнитные отношения для протона и нейтрона равны  $g_p = 5.6$ ,  $g_n = -3.8$  соответственно.

## 15. Спектры атомов с одним оптическим электроном.

Под одноэлектронным атомом подразумевается атом водорода и водородоподобные ионы (ядро с зарядом  $Z +$  один электрон), атомы щелочных металлов (Li, Na, K, Rb, Cs и Fr) и щелочеподобные ионы (ионы изоэлектронной последовательности щелочных металлов), а также атомы некоторых других элементов с одним электроном сверх полностью заполненных подоболочек (например Al - электронная конфигурация  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p$ , Ga - электронная конфигурация  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p$  и т.п.

К этой же категории атомов можно отнести ридберговские атомы с одним сильно возбужденным электроном, движущимся вдали от атомного остатка - иона.

1. Квантовые числа оптического электрона.

*Атом водорода.*

$$\begin{aligned} n - \text{главное квантовое число} & \quad n = 1, 2, 3 \dots \\ \ell - \text{орбитальное квантовое число} & \quad 0 \leq \ell \leq n - 1 \\ s - \text{спиновое квантовое число} & \quad s = 1/2 \\ j - \text{квантовое число полного} & \quad j = \ell \pm s \\ & \quad \text{момента импульса} \end{aligned}$$

В атомной спектроскопии состояния с различными значениями орбитального момента  $\ell$  принято обозначать буквами латинского алфавита:

$$\begin{aligned} \ell = 0 & \quad 1 \quad 2 \quad 3 \quad 4 \dots \\ & \quad s \quad p \quad d \quad f \quad g \dots \end{aligned}$$

*Атомы щелочных металлов.*

Квантовые числа - те же, что и для атома водорода, но пределы их изменения для валентного электрона иные.

Для s- и p- электронов

$$n = n_0, n_0 + 1, n_0 + 1, \quad (15.1)$$

где  $n_0$  - главное квантовое число внешнего электрона в основном состоянии:

$$\begin{array}{cccccc} & \text{Li} & \text{Na} & \text{K} & \text{Rb} & \text{Cs} & \text{Fr} \\ n_0 = & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 & 7 \end{array}$$

Для электронов с  $\ell \geq 2$  минимальное значение главного квантового числа  $(n_\ell)_{\min}$  определяется наименьшей незаполненной  $\ell$ -подоболочкой:

$$\begin{array}{cccccc} & \text{Li} & \text{Na} & \text{K} & \text{Rb} & \text{Cs} & \text{Fr} \\ (n_d)_{\min} & & 3 & 3 & 3 & 4 & 5 & 6 \\ (n_f)_{\min} & 4 & 4 & 4 & 4 & 4 & 5 \end{array} \quad (15.2)$$

2. Энергии уровней без учета тонкой структуры.

*Атом водорода (водородоподобный ион).*

$$E_n = -\frac{Z^2}{n^2} Ry. \quad (15.3)$$

Атомы щелочных металлов.

$$E_{n\ell} = -\frac{(Z - a_{n\ell})^2}{n^2} Ry = -\frac{Ry}{(n - \Delta_\ell)^2}. \quad (15.4)$$

В формулах (15.3) и (15.4)  $Ry = me^4/2\hbar^2 = 13.606$  эВ;  $\Delta_\ell$  - квантовый дефект;  $a_{n\ell}$  - константа экранирования для энергии уровня (без учета тонкой структуры).

3. Энергии уровней с учетом тонкой структуры.

Атом водорода (водородоподобный ион).

$$E_{nj} = -\frac{z^2 Ry}{n^2} - \frac{\alpha^2 Z^4 Ry}{n^3} \left( \frac{1}{j+1/2} - \frac{3}{4n} \right). \quad (15.5)$$

Интервал тонкой структуры - разность энергий уровней

$$\Delta E_{n\ell} = E_{n,j=\ell+1/2} - E_{n,j=\ell-1/2}:$$

$$\Delta E_{n\ell} = \frac{\alpha^2 Z^4 Ry}{n^3 \ell(\ell+1)}. \quad (15.6)$$

В формулах (15.5) и (15.6)  $\alpha = e^2/\hbar c = 1/137$  - постоянная тонкой структуры.

Атомы щелочных металлов.

Интервал тонкой структуры

$$\Delta E_{n\ell} = \frac{\alpha^2 (Z - a')^4 Ry}{n^3 \ell(\ell+1)}, \quad (15.7)$$

где  $a'$  - константа экранирования для тонкой структуры.

4. Спектральные обозначения состояний одноэлектронных атомов.

Атом водорода (водородоподобный ион).

Для полного описания состояния электрона в одноэлектронном атоме достаточно задать квантовые числа  $n$ ,  $\ell$  и  $j$ . Обычно их записывают в виде

$$n\ell_j \quad (15.8)$$

Например:  $1s_{1/2}$ ,  $2p_{3/2}$ ,  $4f_{7/2}$  и т.п.

Иногда встречаются более сложные обозначения которые содержат избыточную для данного случая информацию (существенную для многоэлектронных систем), а именно описание состояния электронной оболочки (электронной конфигурации) и величин, результирующих угловых моментов атома (которые обозначаются прописными латинскими буквами)

$$n\ell^{2S+1}L_J \quad (15.9)$$

Здесь  $2S+1$  - мультиплетность;  $S$  - полный спин. Для одноэлектронной системы  $S = s = 1/2$  и  $2S + 1 = 2$ : уровни одноэлектронного атома - дублетные.

Примеры записи типа (9)  $1s^2 2s_{1/2}$ ,  $2p^2 2p_{3/2}$ ,  $4f^2 4f_{7/2}$  и т.п.

Чаще используют сокращенные (по сравнению с (9)) обозначения

$$n^{2S+1}L_J \quad (15.10)$$

Например  $1^2S_{1/2}$ ,  $2^2P_{1/2}$ ,  $4^2F_{7/2}$  и т.п.

Атомы щелочных металлов.

Обозначения состояний оптического электрона - те же, что и для атома водорода. Для полного описания необходимо добавить характеристики электронного остова (иона). Например, электронные конфигурации и основные состояния атомов щелочных металлов записываются следующим образом:

Li  $1s^2 2s^2 2s_{1/2}$

Na  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 2s_{1/2}$

K  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 2s_{1/2}$

Rb  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 5s^2 2s_{1/2}$

Cs  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10} 4s^2 5p^6 6s^2 2s_{1/2}$

Fr  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10} 4f^{14} 5s^2 5p^6 5d^{10} 6s^2 6p^6 7s^2 2s_{1/2}$

Последний s-электрон расположен над заполненной p-подоболочкой иона.

15.1. Нарисовать диаграмму энергетических уровней водородоподобного иона  $Be^{3+}$  учетом тонкой структуры.

15.2. Нарисовать диаграмму энергетических уровней иона  $Mg^+$  учетом тонкой структуры.

15.3. (5-13). Вычислить величину тонкого расщепления резонансной линии атома водорода (переход  $2p \rightarrow 1s$ ).

15.4. Вычислить величину тонкого расщепления головной линии  $2P \rightarrow 2S$  иона  $Li^{++}$ .

15.5. Оценить отношение энергий тонкого расщепления 3p и 4p уровней атома лития.

15.6. Оценить отношение энергий тонкого расщепления 4p и 3f уровней атома лития.

15.7. (5-15). Сравните по порядку величины тонкое и сверхтонкое расщепления в атоме позитрония.

15.8. Потенциалы ионизации атомов цезия и натрия соответственно составляют 3.89 и 5.12 эВ. Определить квантовые дефекты основных состояний.

15.9. Потенциал ионизации иона  $Be^+$  составляет  $I = 18.21$  эВ. Определить квантовый дефект основного состояния.

15.10. Потенциал ионизации иона  $V^{++}$  составляет  $I = 37.93$  эВ. Определить квантовый дефект основного состояния.

15.11. Потенциал ионизации однозарядного иона  $Ca^+$  равен 11.9 эВ. Определить квантовый дефект основного состояния.

15.12. Потенциал ионизации однозарядного иона  $Mg^+$  равен 15.1 эВ. Определить квантовый дефект основного состояния.

15.13. Определить квантовый дефект основных состояний атомов бора ( $Z = 5$ ) и алюминия ( $Z = 13$ ), если известно, что их потенциалы ионизации равны 8.30 и 5.99 эВ соответственно.

15.14. Определить постоянную экранирования атомного ядра для основного состояния атомов щелочных металлов  $Li, Na, K, Rb, Cs$ , если известно, что значения квантовых дефектов  $s$  – состояний для этих атомов равны соответственно 0.41, 1.37, 2.23, 3.19, 4.13.

### 16. Электромагнитные переходы в атомах. Правила отбора.

1. Правила отбора для электрических дипольных излучательных переходов в одноэлектронном атоме:

$\Delta n$  - произвольное;

$\Delta \ell = \pm 1$ ;

$\Delta j = 0, \pm 1$ ;

$\Delta m_s = 0$ .

2. Спектральные серии щелочных металлов.

Главная серия  $n_o^2 S_{1/2} \rightarrow n^2 P_{1/2,3/2}$ ;  $n \geq n_o$ ;

Резкая серия  $n_o^2 P_{1/2,3/2} \rightarrow n^2 S_{1/2}$ ;  $n \geq n_o + 1$ ;

Диффузная серия  $n_o^2 P_{1/2,3/2} \rightarrow n^2 D_{1/2,3/2}$ ;  $n \geq (n_d)_{\min}$ ;

Фундаментальная серия  $n^2 D_{3/2} \rightarrow n'^2 F_{5/2}$ ;  $n \geq (n_d)_{\min}$ ;

(серия Бергмана)  $n^2 D_{5/2} \rightarrow n'^2 F_{5/2,7/2}$ ;  $n' \geq (n_f)_{\min}$ .

3. Переходы в многоэлектронном атоме. LS - связь.

Одноэлектронный оптический переход в электрическом дипольном приближении разрешен, если удовлетворяются следующие правила отбора (сравн. с правилами отбора в одноэлектронном атоме).

Правило Лапорта - переход возможен только между четными и нечетными термами:

$$\Delta \sum \ell_i = \pm 1;$$

следовательно, должны быть заданы обе электронные конфигурации.

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

$\Delta S = 0$  - интеркомбинационный запрет;

$\Delta J = 0, \pm 1$ ;

переход  $J=0 \leftrightarrow J'=0$  **запрещен** ( $0 \leftrightarrow 0$  переход).

При рассмотрении сверхтонкой структуры оптических спектров действует правило для полного момента импульса атома  $F$ :

$$F = J + I.$$

Правило отбора для  $F$

$\Delta F = 0, \pm 1$ .

Переход  $F=0 \leftrightarrow F'=0$  **запрещен**.

16.1. Укажите переходы, образующие тонкую структуру головной линии серии Лаймана.

16.2. (5-14). Укажите переходы, образующие тонкую структуру головной линии серии Бальмера. Отметьте переходы с одинаковой частотой.

16.3. Для состояний электрона в атоме водорода с главными квантовыми числами  $n = 1$  и  $2$  изобразить схематично картину энергетических уровней с учетом тонкой структуры. Показать разрешенные переходы.

16.4. Для состояний электрона в атоме водорода с главными квантовыми числами  $n = 2$  и  $3$  изобразить схематично картину энергетических уровней с учетом тонкой структуры. Показать разрешенные переходы.

16.5. Используя формулу Дирака (тонкой структуры) определить длины волн переходов, образующих головную линию серии Бальмера. Лэмбовский сдвиг не учитывать.

16.6. (5-16). Для двукратно ионизированного атома лития построить схему разрешенных переходов между состояниями с главными квантовыми числами  $n_1=2$  и  $n_2=3$ . Указать крайние линии мультиплета.

16.7. (5-1). Найти длины волн спектральных линий возникающих при каскаде переходов возбужденных атомов натрия из состояния  $4s$  в основное состояние  $3s$ . Квантовые дефекты для  $s$ - и  $p$ - термов равны  $\Delta_s = 1.37$ ,  $\Delta_p = 0.88$ .

16.8. (5-2). Длины волн линий резонансного дублета натрия равны  $5896 \text{ \AA}$  и  $5890 \text{ \AA}$ , энергия ионизации  $I = 5.14 \text{ эВ}$ . Пренебрегая тонким расщеплением определите квантовые дефекты для  $s$ - и  $p$ - термов натрия.

16.9. (5-3). Длина волны резонансной линии калия равна  $7665 \text{ \AA}$ , а длина волны границы главной серии  $2858 \text{ \AA}$ . Определить квантовые дефекты для  $s$ - и  $p$ - термов и ионизационный потенциал атома калия.

16.9. Определить энергию кванта головной линии диффузной серии в атоме лития ( $Z=3$ ). Квантовые дефекты  $p$ - и  $d$ - состояний равны  $\Delta_p = 0.041$  и  $\Delta_d = 0.002$  соответственно.

16.10. Определить энергию кванта головной линии диффузной серии в атоме натрия ( $Z=11$ ). Квантовые дефекты  $p$ - и  $d$ - состояний равны  $\Delta_p = 0.883$  и  $\Delta_d = 0.010$  соответственно.

16.11. (5-18). Определить энергию ионизации и величину расщепления дублетных уровней  $3^2P_{1/2,3/2}$  иона  $Mn^+$ , если константа экранирования для энергии  $3s$ - уровня  $a = 8.85$ , а константа экранирования для тонкой структуры  $3p$ - уровней иона  $a' = 6.61$ .

16.12. (5-19). Одна из компонент резонансного дублета натрия имеет длину волны  $\lambda_1 = 5890 \text{ \AA}$ . Чему равна длина волны  $\lambda_2$  второй компоненты этого дублета, если для тонкой структуры  $3p$ -уровней натрия константа экранирования  $a' = 7.45$ ?

16.13. (5-21). Какие переходы образуют спектр поглощения натрия? Укажите начальную и конечную конфигурации атома и термы.

16.14. (5-22). При интенсивном облучении желтым светом ( $5880 \text{ \AA}$  -  $6000 \text{ \AA}$ ) атомы натрия возбуждаются на резонансный уровень  $3p \ ^2P_{1/2,3/2}$ . Какие спектральные серии возникают при поглощении света возбужденными атомами натрия?

16.15. (5-23). Какие переходы образуют серии спектра поглощения атомов алюминия? Сравните спектр поглощения атома алюминия со спектром поглощения возбужденного атома натрия (см. задачу 16-15).

16.16. Возбужденный электрон в ионе  $Ne^+$  ( $Z=10$ ) занимает состояние  $4s$ . В каких ниже лежащих состояниях может оказаться электрон в каскаде разрешенных переходов  $4s \rightarrow n\ell \rightarrow n'\ell' \dots$  «на пути» в основное состояние. Изобразите схему уровней и переходов.

16.17. Спектральные линии  $3p \rightarrow n\ell$  одной из серий поглощения атома алюминия ( $Z=13$ ) являются триплетом. Изобразите схему уровней и переходов с учетом тонкой структуры.

16.18. Возбужденный электрон в ионе  $Mg^+$  ( $Z=12$ ) занимает состояние  $4p$ . В каких ниже лежащих состояниях может оказаться электрон в каскаде разрешенных переходов  $4p \rightarrow n\ell \rightarrow n'\ell' \dots$  «на пути» в основное состояние. Изобразите схему уровней и переходов.

16.19. В атоме водорода электрон находится в одном из состояний  $5s$ ,  $5p$ ,  $5d$ ,  $5f$ . Какие спектральные линии и каких серий могут возникнуть при спонтанных переходах в каждом из этих случаев? Тонкую структуру не учитывать. Схему уровней и возможных переходов изобразить графически.

16.20. В атоме натрия электрон находится в одном из состояний  $5s$ ,  $5p$ ,  $5d$ ,  $5f$ . Какие спектральные линии и каких серий могут возникнуть при спонтанных переходах в каждом из этих случаев? Тонкую структуру не учитывать. Схему уровней и возможных переходов изобразить графически.

16.21. Нарисовать диаграмму всех энергетических уровней (вплоть до значений главного квантового числа  $n=5$ ) с учетом тонкой структуры для внешнего (валентного) электрона ионов  $Be^+$  и  $B^{2+}$ . Указать возможные переходы в основное состояние и оценить величину тонкого расщепления резонансной линии.

16.22. Нарисовать диаграмму энергетических уровней с учетом тонкой структуры для ионов  $B^{4+}$  и  $N^{6+}$ . Указать возможные переходы в основное состояние и оценить величину тонкого расщепления резонансной линии.

16.23. Определите, разрешены или запрещены следующие оптические переходы (для атомов с одним валентным электроном):

$${}^2S_{1/2} \rightarrow {}^2D_{3/2}, {}^2S_{1/2} \rightarrow {}^2P_{3/2}, {}^3S_1 \rightarrow {}^2P_{3/2}, {}^2P_{1/2} \rightarrow {}^2D_{5/2}.$$

Объясните, почему.

16.24. (7-41). Являются ли нижеуказанные переходы разрешенными в электрическом дипольном приближении (указаны конфигурации и термы):  $s^2 \ ^1S \leftrightarrow sp \ ^1P$ ;  $pd \ ^1D \leftrightarrow sp \ ^1P$ ;  $np^2 \ ^3D \leftrightarrow npn'p \ ^3D$ ;  $p^2 \ ^1D \leftrightarrow pd \ ^1D$ ;  $p^2 \ ^1S \leftrightarrow ps \ ^1P$ ?

16.25. (7-42). Найдите метастабильные состояния атома углерода.



16.26. (7-43). Какие переходы возможны при поглощении излучения из основного термина атома углерода? Укажите только конфигурации и термы.

16.27. Найдите все термы, принадлежащие основной конфигурации иона  $O^{++}$  ( $Z=8$ ) и расположите их в порядке возрастания энергии. Возможны ли разрешенные переходы из вышележащих термов в основной? Укажите все правила отбора, разрешающие или запрещающие переход.

16.28. (7-45). Какие переходы возможны при поглощении из основного термина атома кислорода в возбужденные состояния с родительским термом  $^4S$ ? Укажите только конфигурации и термы.

16.29. (7-44). Учитывая расщепление энергетических уровней атома углерода согласно правилу интервалов Ланде, рассмотрите тонкую структуру линий поглощения атома углерода. Константу связи моментов в возбужденных терминах считайте малой по сравнению с константой связи моментов в основном терме; расщепление возбужденных термов считайте нормальным. Изобразите переходы на схеме уровней. Отметьте крайние линии мультиплетов.

16.30. (7-46). Учитывая расщепление термов кислорода согласно правилу интервалов Ланде, рассмотрите тонкую структуру линий поглощения атомов кислорода. Константу связи моментов возбужденных термов считайте малой по сравнению с константой связи моментов в основном терме; расщепление возбужденных термов считайте обращенным. Изобразите переходы на схеме уровней. Отметьте крайние линии мультиплетов.

16.31. (7-47). Какие переходы возможны при поглощении из основного термина атома фтора (или другого галогена)? Укажите только конфигурации и термы. Родительским термом возбужденного атома считайте терм невозбужденного иона.

16.32. (7-48). Рассмотрите тонкую структуру линий поглощения атома фтора в рамках правила интервалов Ланде. Константу связи моментов в возбужденных терминах считайте малой по сравнению с константой связи моментов в основном терме, расщепление – обращенным. Изобразите переходы на схеме уровней. Отметьте крайние линии мультиплетов.

16.33. (7-49). Какие переходы возможны при поглощении из основного термина атома азота, укажите только конфигурации и термы. Родительским термом возбужденного атома азота считайте терм невозбужденного иона.

16.34. (7-50). Рассмотрите тонкую структуру линий поглощения азота (см. задачу 16.37) в рамках правила интервалов Ланде. Изобразите переходы на схеме уровней и отметьте крайние линии мультиплета.

16.35. Атом углерода находится на терме  $^3D$ , принадлежащим электронной конфигурации  $2p^4$ . В какие нижележащие термы электромагнитные переходы разрешены в дипольном приближении?

16.36. Атом серы находится на терме  $^1F$ , принадлежащим электронной конфигурации  $3p^4$ . В какие нижележащие термы электромагнитные переходы разрешены в дипольном приближении?

16.37. Атом неона находится на терме  $^3D$ , принадлежащим электронной конфигурации  $2p^5$ . В какие нижележащие термы электромагнитные переходы разрешены в дипольном приближении?

16.38. Атом неона находится на терме  $^3P$ , принадлежащим электронной конфигурации  $2p^5$ . В какие нижележащие термы каких конфигураций электромагнитные переходы разрешены в дипольном приближении? Сколько компонент имеет тонкая структура каждой из спектральных линий?

16.39. Атом аргона находится на терме  $^1P$ , принадлежащим электронной конфигурации  $3p^6$ . В какие нижележащие термы электромагнитные переходы разрешены в дипольном приближении?

16.40. Какие переходы возможны между терминами конфигураций  $2p^2$  и  $2p3s$  в атоме углерода? Сколько компонент имеет тонкая структура каждой из спектральных линий?

16.41. Какие переходы возможны между терминами конфигураций  $3s^23p$  и  $3s3p^2$  в атоме алюминия? Сколько компонент имеет тонкая структура каждой из спектральных линий?

16.42. Какие переходы возможны между терминами конфигураций  $3p^2$  и  $3p5d$  в атоме кремния ( $Z=14$ )? Сколько компонент имеет тонкая структура каждой из спектральных линий?

16.43. Какие переходы возможны между основным термом конфигураций  $3p^3$  и терминами конфигураций  $3p^24d$  в атоме фосфора? Сколько компонент имеет тонкая структура каждой из спектральных линий?

16.44. Атом кислорода находится на терме  $^5P$ , принадлежащим электронной конфигурации  $2p^3$ . В какие нижележащие термы каких конфигураций электромагнитные переходы разрешены в дипольном приближении? Сколько компонент имеет тонкая структура каждой из спектральных линий?

16.45. Какие переходы возможны между основным термом конфигурации  $3p^3$  и терминами конфигурации  $3p^24d$  в атоме фосфора? Сколько компонент имеет тонкая структура каждой из спектральных линий?

16.46. Определить все возможные термы атома углерода для электронных конфигураций:

а)  $1s^22s^22p^13s^1$ ;      б)  $1s^22s^22p^13p^1$ ;      в)  $1s^22s^22p^13d^1$ .

Указать, все разрешенные в дипольном приближении переходы между терминами заданной конфигурации и основным термом.

16.47. Определить возможные термы атома азота в конфигурациях  $1s^2 2s^2 2p^2 ({}^3P) 3l^1$ . Указать термы, из которых возможен переход в основной терм конфигурации  $1s^2 2s^2 2p^3$ ?

16.48. (7-54). При аннигиляции невозбужденного атома позитрония испущено три фотона. Орто - или парапозитроний аннигилировал?

16.49. Заряженная частица находится в одномерной бесконечно глубокой прямоугольной потенциальной яме шириной  $d$  в стационарном состоянии с  $n=10$ . Определить частоты, которые могут наблюдаться в спектре излучения.

16.50. Заряженная частица находится в одномерной симметричной прямоугольной потенциальной яме конечной глубины. Какие частоты будут наблюдаться в спектре поглощения, если частица находится в нижнем возбужденном состоянии, а полное число стационарных состояний в дискретном спектре равно семи. Положение уровней считать известным.

16.51. Какие правила отбора для электромагнитных переходов должны выполняться для водородоподобного иона, описываемого моделью Томсона?

### 17. Рентгеновские спектры.

Характеристическое рентгеновское излучение. Закон Мозли

$$\frac{1}{\lambda_{n_2 \rightarrow n_1}} \cong R \cdot (Z - \sigma)^2 \cdot \left( \frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right),$$

где  $R$  - постоянная Ридберга;  $Z$  - порядковый номер элемента;  $\sigma$  - постоянная экранирования.

Для линий  $K$  - серии  $\sigma_K \approx 1$ ; для  $L$  - серии  $\sigma_L \approx 7.4$ ;  $n_1, n_2$  - главные квантовые числа атомных оболочек между которыми происходит переход.

17.1. (6.1). Начиная с какого элемента периодической системы, можно наблюдать излучение  $K$  - и  $L$  - серий?

17.2 (6-2). Можно ли излучение рентгеновской трубки при анодном напряжении 1100 кВ использовать для наблюдения фотоэффекта с  $K$  - оболочки урана  ${}^{92}\text{U}$ ?

17.3. (6-4). Найти величину расщепления (в электронвольтах) рентгеновского дублета  $K_{\alpha 1}$  и  $K_{\alpha 2}$  молибдена (константа экранирования для тонкой структуры в  $L$  - оболочке  $a' \approx 3.5$ ).

17.4. (6-5). Показать что величина расщепления  $\Delta\lambda$  рентгеновских дублетов в шкале длин волн в атомах элементов с большими зарядами ядер  $Z$  не зависит от  $Z$ .

17.5. (6-6). Вычислить энергии квантов соответствующих  $K_{\alpha}$  - линии и энергию связи  $K$  - электронов в атоме вольфрама ( $\sigma_K \approx 1$ ).

17.6. (6-7). Длины волн  $K_{\alpha}$  - линий некоторых элементов равны  $\lambda_1 = 1.795 \text{ \AA}$  и  $\lambda_2 = 2.29 \text{ \AA}$ . Определите эти элементы.

17.7. (6-8). Вольфрамовая мишень бомбардируется электронами с энергией 180 кэВ. Оцените энергию электронов, выбитых с  $K$  - и  $L$  - оболочек ( $\sigma_K \approx 1$ ,  $\sigma_L \approx 7.4$ ).

17.8. (6-9). Оцените энергию фотоэлектронов, выбитых из  $K$  - оболочек урана ( $Z = 92$ ) и свинца ( $Z = 82$ ) рентгеновским излучением с энергией 150 кэВ.

17.9. (6-10). Известны длины волн головных линий  $L$  -серий серебра ( $\lambda_1 = 4.156 \text{ \AA}$ ) и молибдена ( $\lambda_2 = 5.411 \text{ \AA}$ ). Считая поправки экранирования  $\sigma_L$  для этих линий одинаковыми, оценить значение постоянной Ридберга и величину поправки  $\sigma_L$ .

17.10. (6-12). Какие электроны могут заполнять вакансию в  $K$  - оболочке?

17.11. (6-13). Рентгеновское излучение с длиной волны равной длине волны  $K_\alpha$  - линии вольфрама пропускается через образец из вольфрама. Поглощается ли это излучение? Если да, то за счет каких процессов?

17.12. (6-14). В процессе работы молибденовый антикатод рентгеновской трубки окисляется. Будет ли такая трубка испускать  $K_\alpha$  - линию молибдена?

17.13. Оценить величину тонкого расщепления  $K_\alpha$  рентгеновской линии атомов урана ( $Z=92$ ), свинца ( $Z=82$ ), и ртути ( $Z=80$ ).

17.14. Оценить длину волны  $K_\beta$  линии рентгеновского излучения, испускаемого атомом ртути ( $Z=80$ , постоянная экранирования  $\sigma_K \approx 1$ ).

17.15. Определить число компонент тонкой структуры головной линии  $L$  - серии рентгеновского излучения.

### 18. Эффекты Зеемана и Пашена – Бака. Опыт Штерна и Герлаха.

1. Магнитный момент атома в приближении  $LS$  – связи.

$$\vec{\mu}_J = \vec{\mu}_L + \vec{\mu}_S = -\frac{e}{2mc}(\hbar\vec{L} + 2\hbar\vec{S}) = -\mu_o(\vec{L} + 2\vec{S}) = -\mu_o(\vec{J} + \vec{S})$$

$$\vec{\mu}_L = -\mu_o\vec{L} \text{ - орбитальный магнитный момент атома;}$$

$$\vec{\mu}_S = -2\mu_o\vec{S} \text{ - спиновый магнитный момент атома;}$$

$$\mu_o = \frac{e\hbar}{2mc} = 0.927 \cdot 10^{-20} \text{ эрг/Гс - магнетон Бора;}$$

вектора  $\vec{L}$ ,  $\vec{S}$ ,  $\vec{J}$  – орбитальный, спиновый и полный моменты импульса атома.

Эффективный магнитный момент атома - компонента магнитного момента атома, коллинеарная полному моменту импульса

$$\langle \vec{\mu} \rangle = \frac{(\vec{\mu}_J \cdot \vec{J}) \cdot \vec{J}}{|\vec{J}|^2} = -\mu_o g \vec{J},$$

$$g = \frac{(\vec{L} + 2\vec{S}) \cdot \vec{J}}{|\vec{J}|^2} = \frac{(\vec{J} + \vec{S}) \cdot \vec{J}}{|\vec{J}|^2} = 1 + \frac{\vec{S} \cdot \vec{J}}{|\vec{J}|^2} =$$

$$= 1 + \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)} \text{ - фактор Ланде.}$$

2. Слабое магнитное поле.

Слабым считается поле, нерывающее  $LS$  – связи. Взаимодействие магнитных моментов друг с другом значительно сильнее их взаимодействия с магнитным полем  $H$ :

$$A(L, S) \gg \mu_o H,$$

$A(L, S)$  - константа связи моментов, определяющая расщепление терма в мультиплет (правило интервалов Ланде).

3. Энергия взаимодействия атома с магнитным полем:

$$\Delta E = -\langle \vec{\mu} \rangle \vec{H} = \mu_o g H M_J,$$

$M_J$  - проекция полного момента импульса на направление магнитного поля.

4. Сила, действующая на атом в слабом неоднородном магнитном поле (ось  $z$  направлена вдоль вектора  $\vec{H}$ , направления вектора  $\vec{H}$  и его градиента совпадают):

$$\vec{F} = -(\langle \vec{\mu} \rangle \nabla) \vec{H}; \quad F_z = -\mu_o g M_J \frac{dH}{dz}.$$

5. Эффект Зеемана. Сдвиг частоты спектральной линии в магнитном поле относительно нерасщепленной линии:

$$\Delta\omega(M_{J_1}, M_{J_2}) = \Delta\omega_L (g_1 M_{J_1} - g_2 M_{J_2});$$

$\Delta\omega_L = \mu_o H/\hbar = eH/2mc$  - нормальное лоренцево расщепление; индекс 1 относится к верхнему уровню перехода, а индекс 2 - к нижнему.

В случае перехода между уровнями синглетных термов ( $S=0$ ,  $g_l=g_2=1$ ) имеет место нормальный (простой) эффект Зеемана; во всех остальных случаях - аномальный (сложный) эффект Зеемана.

6. Сильное магнитное поле.

Сильное поле разрывает LS связь. В этом случае

$$\mu_L H, \mu_S H \gg A(L, S).$$

7. Энергия взаимодействия атома с сильным магнитным полем (спин-орбитальное взаимодействие не учитывается):

$$\Delta E = -\vec{\mu}_L \vec{H} - \vec{\mu}_S \vec{H} = \mu_o H (M_L + 2M_S).$$

8. Эффект Пашена-Бака. Сдвиг частоты спектральной линии в сильном магнитном поле относительно частоты перехода между вырожденными термами (не расщепленными спин-орбитальным взаимодействием)

$$\Delta\omega(M_{L_1}, M_{L_2}) = \frac{\mu_o H}{\hbar} (M_{L_1} - M_{L_2}) = \mu_o H \Delta M_L$$

Это - нормальный лоренцевский триплет.

9. Сила, действующая на атом в сильном неоднородном магнитном поле (ось  $z$  направлена вдоль вектора  $\vec{H}$ , направления вектора  $\vec{H}$  и его градиента совпадают)

$$F_z = -\mu_o (M_L + 2M_S) \frac{dH}{dz}$$

10. Дополнительные правила отбора, действующие в поле внешних сил:

$$\Delta M_J = \pm 1 - \sigma \text{ - компоненты,}$$

$$\Delta M_J = 0 - \pi \text{ - компоненты.}$$

Переход  $M_{J_1} = 0 \leftrightarrow M_{J_2} = 0$  запрещен, если при переходе  $\Delta J = 0$  ( $J_1 = J_2$ ).

При разрыве LS - связи в сильном магнитном поле:

$$\Delta M_L = \pm 1 - \sigma \text{ - компоненты,}$$

$$\Delta M_L = 0 - \pi \text{ - компоненты,}$$

$$\Delta M_S = 0.$$

18.1. (8-1). Определить множители Ланде следующих состояний  $^3D_1$ ,  $^5F_1$ ,  $^2D_{3/2}$ ,  $^4P_{1/2}$ ,  $^8F_{1/2}$ ,  $^4D_{1/2}$ .

18.2. (8-2). Вычислить множители Ланде для состояний  $^3F_4$ ,  $^4D_{1/2}$ ,  $^9H_1$ . Определить направление магнитного момента относительно механического.

18.3. (8-3). Определить эффективные магнитные моменты атомов в состояниях  $^3P_1$ ,  $^2P_{5/2}$ .

18.4. (8-4). Определить эффективный магнитный момент атомов в состоянии  $^3D_2$  и возможные значения его проекций на направление внешнего магнитного поля.

18.5. Определите эффективные магнитные моменты атомов и возможные значения их проекций на направление внешнего магнитного поля в состояниях:  $^1P_1$ ,  $^4D_{1/2}$ ,  $^9H_1$ ,  $^3P_2$ .

18.6. Какие из приведенных значений фактора Ланде возможны и каков их физический смысл:  $g = 2$ ,  $g = 1$ ,  $g = 0$ ,  $g = -1$ ? Приведите примеры состояний для возможных  $g$ .

18.7. Может ли так быть, что атомная оболочка характеризуется ненулевым полным механическим моментом количества движения, однако магнитный момент атома равен нулю? Ответ обоснуйте.

18.8. Найти величину полного механического момента атома  $\vec{J}$  и возможные его проекции на выделенное направление, а также угол между  $\vec{J}$  и орбитальным моментом  $\vec{L}$  для состояний  $P_2$ ,  $^4D_{7/2}$ ,  $^2D_{5/2}$ ,  $^5F_1$ .

18.9. Найти угол между вектором полного механического момента  $\vec{J}$  и вектором полного магнитного момента атома  $\vec{\mu}_J$  для состояний  $^3P_1$ ,  $^5F_1$ ,  $^2D_{3/2}$ ,  $^4D_{1/2}$ ,  $^3P_0$ ,  $^9H_1$ .

18.10. (8-5). Определить максимальную величину энергии, приобретаемой атомом в состоянии  $^1D_2$  в магнитном поле  $H = 10^4$  Э.

18.11. Конфигурация некоторого атома имеет вид:  $1s^2 2s^2 2p^4$ . Для основного состояния найти величину эффективного магнитного момента  $|\vec{\mu}_{eff}|$ , определяющего магнитные свойства такого атома в слабом магнитном поле.

18.12. На сколько энергетических подуровней расщепятся в слабом магнитном поле уровни энергии атома в состояниях  $^4D_{1/2}$ ,  $^2P_{1/2}$ ?

18.13. (8-13). Определить гиромангнитное отношение в единицах  $e/2mc$  для спина электрона в опыте Штерна и Герлаха с пучком атомов серебра, вылетающим из печи с температурой 1100 К. Градиент магнитного поля  $dH/dz = 3 \cdot 10^5$  Э/см, протяженность поля  $l = 4$  см. Расстояние от магнита до экрана  $L = 10$  см. Расщепление пучка на экране  $\Delta x = 1.76$  см.

18.14. (8-8). Вычислить величину расщепления пучка атомов лития в опыте Штерна и Герлаха, если длина полюсов магнита  $L = 10$  см, градиент

магнитного поля  $dH/dz = 3 \cdot 10^5$  Э/см, температура печи  $T=10^3$  К. Расщепление измеряется у концов полюсов.

18.15. (8-9). Оценить величину градиента магнитного поля, в котором можно подвесить невозбужденный атом натрия так, чтобы сила, действующая со стороны поля, уравновешивала силу тяжести. Как должны быть направлены магнитное поле и его градиент?

18.16<sup>1</sup>. (8-10). На сколько компонент расщепится в опытах Штерна и Герлаха пучок атомов гелия, находящихся в низшем метастабильном состоянии?

18.17. (8-11). Расщепится ли пучок атомов ртути в основном состоянии в опыте Штерна и Герлаха?

18.18. (8-14). Определить максимальные значения проекций магнитных моментов атомов ванадия, марганца и железа (основные термы  $^4F$ ,  $^6S$ ,  $^5D$ ), если известно, что пучки атомов в неоднородном магнитном поле расщепляются на 4, 6 и 9 компонент. Определить основные состояния атомов.

18.19. На сколько компонент расщепятся пучки атомов бора, азота, кислорода и фтора, находящихся в основном состоянии, в эксперименте Штерна и Герлаха в случае слабого и сильного магнитных полей. В сильном поле  $LS$  взаимодействием пренебречь.

18.20. На сколько компонент расщепятся пучки атомов фосфора и серы, находящихся в основном состоянии, в эксперименте Штерна и Герлаха в случае слабого и сильного магнитных полей. В сильном поле  $LS$  взаимодействием пренебречь. Оценить величину критического магнитного поля.

18.21. На сколько компонент расщепится пучок атомов бериллия в низшем возбужденном состоянии в эксперименте Штерна и Герлаха в случае слабого и сильного магнитных полей. В сильном поле  $LS$  взаимодействием пренебречь. Оценить величину критического магнитного поля.

18.22. Пучок атомов водорода в состоянии  $2p$  пролетает через область неоднородного магнитного поля. На сколько компонент произойдет расщепление пучка в случае слабого и сильного магнитного полей. Определить критическую величину магнитного поля, разделяющего области слабого и сильного полей.

18.23. Напишите электронные конфигурации элементов третьего периода таблицы Менделеева ( $Z=11-18$ ). У каких из этих элементов, находящихся в основном состоянии, в опыте Штерна – Герлаха расщепление пучка атомов не произойдет? Магнитное поле считать слабым.

<sup>1</sup> Всюду в этом разделе, если это не оговорено особо, магнитное поле полагается слабым.

18.24. На сколько компонент расщепятся в опыте Штерна-Герлаха (в слабом поле) пучки атомов, находящихся в состояниях  $^5F_1$ ,  $^3D_1$ ?

18.25. Пучок атомов в нижнем энергетическом состоянии, принадлежащим  $pd$  – конфигурации, пролетает через область неоднородного магнитного поля. На сколько компонент произойдет расщепление в случае слабого и сильного магнитного полей? Оценить критическую величину магнитного поля.

18.26. Пучок атомов в состоянии  $^4D_{1/2}$  пролетает через область слабого неоднородного магнитного поля. На сколько компонент произойдет расщепление пучка? В какой конфигурации такое состояние является основным?

18.27. Пучок атомов в состоянии  $^4D_{7/2}$  пролетает через область сильного неоднородного магнитного поля. На сколько компонент произойдет расщепление пучка? В какой конфигурации возможно такое состояние?

18.28. Пучок атомов в нижнем энергетическом состоянии, принадлежащим  $pd^2$  – конфигурации, пролетает через область неоднородного магнитного поля. На сколько компонент произойдет расщепление в случае слабого и сильного магнитного полей? Оценить критическую величину магнитного поля.

18.29. Пучок возбужденных атомов гелия пролетает через область неоднородного магнитного поля. На сколько компонент произойдет расщепление пучка, если атомы были приготовлены в суперпозиции состояний, принадлежащих конфигурации  $1s2s$ ?

18.30. Пучок атомов водорода пролетает через область неоднородного магнитного поля. На сколько компонент произойдет расщепление пучка, если атомы водорода были приготовлены в суперпозиции  $1s$  и  $2s$  состояний?

18.31. Имеется последовательность трех приборов Штерна и Герлаха, градиент магнитного поля в которых направлен:

- вдоль оси  $z$ , вдоль оси  $u$ , вдоль оси  $z$ ;
- вдоль оси  $z$ , вдоль оси  $u$ , вдоль оси  $u$ ;
- вдоль оси  $z$ , вдоль оси  $u$ , под углом  $\pi/4$  к оси  $z$  в плоскости  $zu$ ;

Определить число компонент, на которые расщепится пучок атомов водорода в основном состоянии, на выходе из описанной системы.

18.32. В эксперименте О.Штерн и В.Герлах (1922 г.) наблюдали расщепление пучка атомов серебра в основном состоянии при пролете через область неоднородного магнитного поля. Исторически целью эксперимента являлась проверка предложенного Бором правила квантования механического момента. Расщепление пучка на две компоненты было истолковано, как подтверждение правила квантования по Бору. Почему? В

чем отличие интерпретации результатов опыта Штерна-Герлаха в рамках модели Бора и квантовой механики?

18.33. (8-16). Начертить схему зеемановского расщепления спектральной линии для перехода  ${}^3S_1 \leftrightarrow {}^3P_1$  и определить сдвиг отдельных компонент относительно невозмущенной линии. Напряженность поля  $H = 6 \cdot 10^3$  Э.

18.34. (8-17). Сколько спектральных линий будет наблюдаться при переходах  ${}^1D_2 \leftrightarrow {}^1P_1$  и  ${}^3D_2 \leftrightarrow {}^3P_1$  в слабом магнитном поле?

18.35. (8-18). Изобразить графически расщепление уровней  ${}^4D_{5/2}$  и  ${}^4F_{7/2}$  в слабом магнитном поле и указать возможные переходы.

18.36. (8-19). Каков характер (нормальный, аномальный) эффекта Зеемана в слабом магнитном поле для первых девяти элементов периодической системы?

18.37. (8-20). Какой эффект Зеемана (нормальный, аномальный) наблюдается при переходах: 1.  ${}^1S_0 \leftrightarrow {}^1P_1$ , 2.  ${}^2D_{3/2} \leftrightarrow {}^2P_{3/2}$ , 3.  ${}^3S_1 \leftrightarrow {}^3P_0$ , 4.  ${}^3S_1 \leftrightarrow {}^3P_1$ .

18.38. (8-21). “Расстояние” между крайними зеемановскими компонентами спектральной линии  ${}^3S_1 \leftrightarrow {}^3P_2$  ( $\lambda = 4811$  Å составляет 0.5 Å. Определить величину магнитного поля.

18.39. (8-22). Оценить критическую величину магнитного поля, выше которой наблюдается эффект Пашена-Бака для резонансного дублета цезия ( $\lambda_1 = 8521$  Å,  $\lambda_2 = 8943$ ).

18.40. Длины волн головной линии основной серии атома натрия составляют 5890 А и 5896 А соответственно. Сколько линий будет наблюдаться в эффекте Зеемана на этом переходе в слабом магнитном поле? Оценить величину критического магнитного поля, при котором на этом переходе будет наблюдаться эффект Пашена – Бака.

18.41. (8-23). На каких линиях серии Лаймана иона  $He^+$  при  $H = 300$  Э будет наблюдаться эффект Пашена-Бака?

18.42. (8-24). Для каких линий серии Лаймана атома водорода магнитное поле Земли  $H \sim 0,5$  Э является критическим?

18.43. (8-27). Нарисовать схему расщепления и возможные переходы между уровнями термов  ${}^2P$  и  ${}^2S$  в слабом и сильном магнитном поле. В сильном поле  $LS$  взаимодействием пренебречь.

18.44. (8-31). Определить число компонент расщепления и расстояние между крайними  $\pi$  - компонентами линии  ${}^3F_2 \leftrightarrow {}^3D_1$  в магнитном поле с напряженностью  $H = 10^4$  Э.

18.45. Нарисовать схему переходов, определить число компонент и величину расщепления в эффекте Зеемана на линии  ${}^4D_{1/2} \rightarrow {}^4P_{1/2}$ . Магнитное поле считать слабым.

18.46. Нарисовать схему переходов, определить число компонент и величину расщепления в эффекте Зеемана на переходе  ${}^1F_3 \rightarrow {}^1D_2$ . Магнитное поле считать слабым.

18.47. Рассмотреть эффект Зеемана в слабом магнитном поле на переходе между основным и нижним возбужденным состоянием атома Al (определить число линий и величину расщепления). Оценить величину критического магнитного поля, разделяющего область слабых и сильных магнитных полей.

18.48. Нарисовать картину зеемановского расщепления на переходе  ${}^5P_1 \rightarrow {}^5D_0$  в слабом магнитном поле. Сколько линий будет наблюдаться на указанном переходе? Определить величину расщепления.

18.49. Нарисовать картину зеемановского расщепления на переходах  $nd^3 n' p \quad {}^5D_4 \rightarrow nd^4 \quad {}^5D_4$ ,  $nd^3 n' p \quad {}^5D_2 \rightarrow nd^4 \quad {}^5D_1$  и  $nd^3 n' p \quad {}^5D_1 \rightarrow nd^4 \quad {}^5D_0$  в слабом магнитном поле. Сколько линий будет наблюдаться на указанном переходе? Определить величину расщепления.

18.50. Нарисовать картину зеемановского расщепления на переходах  $np^2 \quad {}^3P_1 \rightarrow np, n'd \quad {}^3P_1$ ,  $pd \quad {}^1D_2 \rightarrow np, n'p \quad {}^1P_1$  и  $sp \quad {}^3P_1 \rightarrow np, n'p \quad {}^3P_0$  в слабом магнитном поле. Сколько линий будет наблюдаться на указанном переходе? Определить величину расщепления.

18.51. Нарисовать картину зеемановского расщепления между нижними термами электронных конфигураций  $1s2p$  и  $1s2s$  атома гелия в слабом магнитном поле. Сколько линий будет наблюдаться на указанном переходе? Определить величину расщепления.

18.52. Изобразите схему расщеплений и разрешенных переходов в слабом магнитном поле для одной из спектральных линий серии поглощения из основного состояния атома цинка ( $Z=30$ ), принадлежащего конфигурации (заполн.оболочки) $4s^2$ . Сколько спектральных линий будет видно в спектрографе?

18.53. Нарисовать картину зеемановского расщепления  $L_p$  линии серии Лаймана в спектре атома водорода в магнитном поле  $H = 1$  кЭ. Рассчитать величину расщепления. Определить величину критического магнитного поля для этого перехода.

18.54. Нарисовать картину зеемановского расщепления десятой линии серии Лаймана в спектре атома водорода в магнитном поле  $H = 1$  кЭ. Рассчитать величину расщепления. Определить величину критического магнитного поля для этого перехода.

18.55. Напишите электронные конфигурации элементов таблицы Менделеева ( $Z=11-20$ ). У каких из этих элементов при переходе из возбу-

жденного состояния в основное можно наблюдать нормальный эффект Зеемана?

18.56. Рассмотрите эффект Зеемана для перехода  ${}^5G_2 \rightarrow {}^5F_1$ . Покажите на схеме расщепление каждого из уровней в магнитном поле и разрешенные переходы. Исходя из факторов Ланде для каждого из уровней, определите смещения расщепленных подуровней относительно первоначального состояния, поляризацию и частоты, наблюдаемые в спектре. Магнитное поле считать «слабым».

18.57. Определить частоту СВЧ излучения, при которой будет наблюдаться резонансное поглощение СВЧ мощности веществом, содержащим ионы хрома  $Cr^+$  (электронная конфигурация  $3d^5$ ) и помещенным во внешнее магнитное поле напряженностью  $H$ .

18.58. (8-36). Показать, что для всех уровней, у которых  $L=S$  и  $J \neq 0$ , множитель Ланде равен  $g=3/2$ .

18.59. (8-34). В каких случаях спектральная линия в слабом магнитном поле расщепляется на три компоненты?

18.60. (8-35). Определите условие, при котором для обоих уровней спектральной линии множители Ланде  $g_{J_1}, g_{J_2} \rightarrow 1$ , то есть, когда сложный эффект Зеемана вырождается в простой?

18.61. (8-37). Показать, что для каждого уровня с  $J=J_{max}=L+S$  множитель Ланде равен  $g=L+S/J_{max}$ .

### 19. Основы физики молекул.

1. В двухатомной молекуле стационарные состояния электронов можно охарактеризовать точно определенным значением проекции орбитального момента на межъядерную ось. Состояния электронов в оболочке обозначаются в соответствии со схемой:

проекция момента -  $\lambda = |m_\ell| = 0, 1, 2, 3 \dots$

состояние электрона -  $\sigma, \pi, \delta, \phi$

Здесь квантовое число  $m_\ell$  определяют проекцию орбитального момента электрона на ось молекулы.

2. Квантовые числа, характеризующие состояние электронной оболочки молекулы:

а) проекция орбитального момента электронной оболочки на ось молекулы

$$\Lambda = \left| \sum m_\ell \right|,$$

проекция момента -  $\Lambda = 0, 1, 2, 3, \dots$

состояние оболочки -  $\Sigma, \Pi, \Delta, \Phi, \dots$

б) мультиплетность  $2S+1$ ,  $S$  - полный спин

3. Термы электронной оболочки молекулы принято записывать в виде:

$${}^{2S+1}\Lambda,$$

Например:  ${}^1\Sigma, {}^3\Pi, {}^2\Delta, \dots$  и т.п.

Основной терм двухатомной молекулы, за редкими исключениями,  ${}^1\Sigma$ .

4. Энергия колебаний двухатомной молекулы в приближении гармонического осциллятора:

$$E_v = \hbar \omega (v + 1/2),$$

где  $\omega = \sqrt{k/\mu}$  - частота колебаний (гармонических) молекулы,  $k$  - постоянная квазиупругой силы,  $v$  - колебательное квантовое число,  $v = 0, 1, 2, 3, \dots$

5. Энергия ангармонических колебаний двухатомной молекулы, описываемой потенциалом Морзе:

$$E_v = \hbar \omega (v + 1/2) + \kappa \hbar \omega (v + 1/2)^2$$

где  $\kappa = \hbar \omega / 4D$  - постоянная ангармонизма;  $D$  - энергия диссоциации молекулы.

6. Вращательная энергия жесткой двухатомной молекулы:

$$E_J = \frac{\hbar^2}{2I} J(J+1) = B J(J+1),$$

где  $B = \hbar^2/2I$  - вращательная постоянная,  $I = \mu R_0^2$  - момент инерции двухатомной молекулы,  $\mu = M_1 M_2 / (M_1 + M_2)$  - приведенная масса;  $M_1$  и  $M_2$  - массы атомов,  $R_0$  - равновесное расстояние между ядрами.

7. Ядерный момент количества движения молекулы, вращающейся с частотой  $\omega$ :  $L = I\omega = \hbar\sqrt{J(J+1)}$ , где  $J$  - вращательное квантовое число,  $J = 0, 1, 2 \dots$

8. Правила отбора для электрических дипольных излучательных переходов:

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

$\Delta v = \pm 1$  (приближение гармонического осциллятора),

$$\Delta J = \begin{cases} \pm 1 & \text{для гомоядерных молекул,} \\ 0, \pm 1 & \text{для гетероядерных молекул.} \end{cases}$$

19.1. Частица массы  $m$  находится в потенциале (сферическая система координат)  $V = V(r, \theta)$ . Написать общее выражение для волновой функции состояния с точно определенным значением  $z$ - проекции момента количества движения. Может ли такое состояние быть стационарным? (см. задачу 6.13.)

19.2. (10-20). Какие электронные конфигурации и молекулярные термы возникают при образовании молекулярного иона водорода  $H_2^+$  из: а)  $H(1s) + H^+$ ; б)  $H(2p) + H^+$ ?

19.3. (10-21). Какие электронные конфигурации и молекулярные термы возникают при образовании молекулы водорода: а) из двух атомов в  $1s$ -состояниях; б) из атомов в  $1s$  и  $2p$ -состояниях?

19.4. Какие молекулярные термы образуют атомы а)  $O + H$ , б)  $F + F$ , в)  $H + Cl$ , г)  $C + N$ , д)  $C + H$ , е)  $C + O$ , находящиеся в основном состоянии?

19.5. Какие молекулярные термы могут образовать атомы  $Na$  и  $F$ , если атом  $F$  находится в основном, а атом  $Na$  - в нижнем возбужденном состоянии?

19.6. Какие молекулярные термы могут образовать атомы  $Li$  и  $Cl$ , если атом  $Cl$  находится в основном, а атом  $Li$  - в нижнем возбужденном состоянии?

19.7. Какие молекулярные термы могут образовать два атома водорода, находящиеся в состояниях  $2s$  и  $2p$ ?

19.8. Какие молекулярные термы могут образовать два атома лития, один из которых находится в основном, а другой - в нижнем возбужденном состоянии?

19.9. Эффективный потенциал взаимодействия ядер в двухатомной молекуле может быть аппроксимирован выражениями

потенциал Морзе:  $V(R) = D(1 - \exp(-\alpha(R - R_0)))^2$ ,  $\alpha R_0 \gg 1$ ,

потенциал Кратцера  $V(R) = D(R_0^2/R^2 - 2R_0/R)$ ,

где  $R$  - межъядерное расстояние. Считая, что массы атомов образующих молекулы равны  $M$ , исходя из соотношения неопределенностей, оценить величину энергии основного состояния (нулевых колебаний).

19.20. В условиях предыдущей задачи, оценить размер области локализации ядерного волнового пакета, соответствующего основному колебательному состоянию молекулы. Сравнить полученное значение с равновесным расстоянием между ядрами.

19.21. (10-10). Определить амплитуду нулевых колебаний ядер в молекуле водорода в основном колебательном состоянии; колебательная частота равна  $\omega \approx 8.29 \cdot 10^{14} \text{ c}^{-1}$ . Сравните амплитуду с равновесным межъядерным расстоянием  $R = 0.84 \text{ \AA}$ .

19.22. Молекулярный терм некоторой молекулы задается выражением  $V_{\text{eff}}(R) = D(R_0^2/R^2 - 2R_0/R)$ . Найти колебательно-вращательный спектр молекулы.

19.23. Считая степень колебательного возбуждения малой, решить предыдущую задачу в приближении гармонических колебаний.

19.24. (10-5). Одно из ядер (массовое число  $\sim 10$ ) двухатомной молекулы поглощает  $\gamma$ -квант с энергией  $E \approx 1 \text{ МэВ}$ . Энергия диссоциации молекулы  $D \approx 1 \text{ эВ}$ . Может ли молекула диссоциировать после поглощения ядром  $\gamma$ -кванта?

19.25. (10-12). Определить энергию диссоциации молекулы водорода, находящейся в основном состоянии, если частота ее колебаний равна  $\omega \approx 8.29 \cdot 10^{14} \text{ c}^{-1}$ , а постоянная ангармоничности  $\kappa = 0.0285$ .

19.26. (10-13). Найдите отношение колебательных частот молекул водорода  $H_2$ , дейтерия  $D_2$  и трития  $T_2$  (изотопический сдвиг).

19.27. (10-14). Отношение колебательных частот молекул  $D_2$  и  $H_2$  равно 0.707 (см. задачу 19.26), а для молекул  $DCl^{35}$  и  $HCl^{35}$  оно равно 0.717, т.е. близко к отношению колебательных частот молекул дейтерия и водорода. Объясните причину этого явления.

19.28. (10-15). Энергия диссоциации молекулы водорода равна  $D_H = 4.46 \text{ эВ}$ , а молекулы дейтерия  $D_D = 4.54 \text{ эВ}$ . Оценить энергию нулевых колебаний молекулы  $H_2$ . Равновесные расстояния между ядрами этих молекул одинаковы.

10.29. (10-30). Энергия диссоциации и энергия нулевых колебаний молекулы  $H_2$  равны  $D_H = 4.46 \text{ эВ}$  и  $E_0 = 0.26 \text{ эВ}$  соответственно. Определите энергию диссоциации  $D_D$  молекулы дейтерия  $D_2$ .

19.30. Определить теплоемкость разреженного газа, состоящего из двухатомных молекул. Молекулы считать гармоническими осцилляторами.



19.31. Теплоемкость молекулярного водорода  $H_2$  при температуре  $T = 1000 \text{ K}$  равна  $C_v = 2.7k$  ( $k$  - постоянная Больцмана). Определить теплоемкость молекулярного дейтерия  $D_2$  при той же температуре.

19.32. (10-16). Двухатомная молекула состоит из атомов с массами  $M_1$  и  $M_2$ . Определить изотопический сдвиг в колебательном спектре этой молекулы, возникающий при изменении массы ядра  $M_1$  на величину  $\Delta M_1 \ll M_1$ .

19.33. (10-25). Определите частоту колебаний молекулы бромистого водорода, если длины волн фиолетового (антистоксова) и красного (стоксова) спутников комбинационного рассеяния равны:  $\lambda_{as} = 3385 \text{ \AA}$  и  $\lambda_s = 4095 \text{ \AA}$ .

19.34. (10-26). Определите частоту колебаний молекулы кислорода, если при температуре  $T = 400 \text{ K}$  отношение интенсивностей фиолетового и красного спутников в спектре комбинационного рассеяния равно  $\eta = 0.004$ .

19.35. (10-27). Определите длины волн фиолетового ( $\lambda_{as}$ ) и красного ( $\lambda_s$ ) спутников в колебательном спектре комбинационного рассеяния молекул кислорода, возбуждаемого квантами света с длиной волны  $\lambda = 3650 \text{ \AA}$ . Частота собственных колебаний молекулы кислорода  $\omega \approx 2.97 \cdot 10^{14} \text{ c}^{-1}$ .

19.36. (10-9). Определить межъядерное расстояние в молекуле  $HBr$ , если волновые числа линий ее вращательного спектра разделены интервалом  $\Delta\nu = 17 \text{ cm}^{-1}$ .

19.37. (10-17). Оценить влияние изотопического эффекта на вращательные уровни двухатомной молекулы.

19.38. Определить оператор дипольного момента для ядерной подсистемы молекул  $H_2^+$  и  $HD^+$ . Показать, что в гомоядерных молекулах в дипольном приближении электромагнитные переходы в пределах одного электронного термина запрещены.

19.39. В двухатомной молекуле происходит электромагнитный переход из основного колебательного состояния возбужденного электронного термина на нижележащий электронный терм. Определить вероятность колебательного возбуждения молекулы, если энергии колебательных квантов на обоих терминах одинаковы, а равновесное межъядерное расстояние на верхнем терме в два раза больше, чем на нижнем терме  $R^* = 2R_g$ . Колебания молекулы в обоих электронных состояниях считать гармоническими.

19.40. Определить вероятность колебательного возбуждения молекулы  $NaCl$  при внезапном включении внешнего однородного постоянного электрического поля с напряженностью  $E = 10^6 \text{ В/см}$ , направленного вдоль оси молекулы. В начальный момент времени молекула находилась в ос-

новном колебательном состоянии. Постоянная квазиупругой силы  $k = 1.01 \cdot 10^5 \text{ дин/см}$ , равновесное расстояние между ядрами  $R_0 = 2.361 \text{ \AA}$ . Колебания считать гармоническими.

19.41. Оценить характерное время жизни относительно электромагнитного перехода колебательно-возбужденной молекулы  $NaCl$ . Колебания молекулы считать гармоническими.

19.42. В твердом теле потенциальная энергия межатомного взаимодействия в зависимости от расстояния между атомами  $R$  определяется выражением  $V(R) = D(1 - \exp(-\alpha(R - R_0)))^2$ . Определить коэффициент теплового линейного расширения твердого тела. Сделать численную оценку для  $D = 4 \text{ эВ}$ ,  $R_0 = 2 \text{ \AA}$ ,  $\alpha = 10^7 \text{ cm}^{-1}$ .

19.43. Рассматривая атомный электрон как квантовый осциллятор с частотой  $\omega_0$ , показать, что на больших расстояниях между атомами  $R \gg a_0$  ( $a_0$  - характерная амплитуда колебаний электрона) возникают силы притяжения, описываемые потенциалом  $U(R) \sim -1/R^6$  (силы Ван-дер-Ваальса).

## Справочные данные

## Основные физические постоянные

Скорость света в вакууме	$c = 2.998 \cdot 10^{10}$ см/с
Гравитационная постоянная	$G = 6.67 \cdot 10^{-8}$ см <sup>3</sup> /г.с <sup>2</sup>
Постоянная Больцмана	$k = 1.381 \cdot 10^{-16}$ эрг/град
Заряд электрона	$e = 4.803 \cdot 10^{-10}$ абс. ед.
Масса электрона	$m = 0.911 \cdot 10^{-27}$ г
Энергия покоя электрона	$mc^2 = 0.511$ МэВ
Масса протона	$M = 1.673 \cdot 10^{-24}$ г
Энергия покоя протона	$Mc^2 = 938.28$ МэВ
Отношение масс протона и электрона	$M/m = 1836.15$
Постоянная Стефана-Больцмана	$\sigma = 5.67 \cdot 10^{-5}$ эрг/(с.см <sup>2</sup> .град <sup>4</sup> )
Постоянная Планка	$\hbar = 1.0546 \cdot 10^{-27}$ эрг.с $h = 6.626 \cdot 10^{-27}$ эрг.г
Постоянная Ридберга (для бесконечной массы ядра)	$R = 109737$ см <sup>-1</sup>
Постоянная Ридберга (для атома водорода)	$R_H = 109677$ см <sup>-1</sup>
Ридберг	$R_y = me^4/2\hbar^2 = 13.606$ эВ
Боровский радиус	$a_0 = \hbar^2/me^2 = 0.529 \cdot 10^{-8}$ см
Классический радиус электрона	$r_e = e^2/mc^2 = 2.82 \cdot 10^{-13}$ см
Комптоновская длина волны электрона	$\Lambda_e = 2\pi\hbar/mc = 2.426 \cdot 10^{-10}$ см
Постоянная тонкой структуры	$\alpha = e^2/\hbar c = 1/137.036$
Магнетон Бора	$\mu_B = e\hbar/2mc = 0.927 \cdot 10^{-20}$ эрг/Гс
Ядерный магнетон	$\mu_N = e\hbar/2Mc = 5.051 \cdot 10^{-24}$ эрг/Гс

## Соотношение между спектральными и энергетическими единицами

Единица измерения	$\tilde{\nu}$ , см <sup>-1</sup>	$\lambda$ , см	$E$ , эрг	$E$ , эВ
1 см <sup>-1</sup>	-	1	$1.9864 \cdot 10^{-16}$	$1.2398 \cdot 10^{-4}$
1 эрг	$5.0341 \cdot 10^{15}$	$1.9864 \cdot 10^{-16}$	-	$6.2415 \cdot 10^{11}$
1 эВ	8065.54	$1.2398 \cdot 10^{-4}$	$1.6022 \cdot 10^{-12}$	-

## Приставки для обозначения кратных и дольных единиц измерения

приставка	Числовое значение	Обозначение (русское)	Обозначение (международное)
Зепто	$10^{-21}$	з	z
Атто	$10^{-18}$	а	a
Фемто	$10^{-15}$	ф	f
Пико	$10^{-12}$	п	p
Нано	$10^{-9}$	н	n
Микро	$10^{-6}$	мк	$\mu$
Милли	$10^{-3}$	м	m
Санتي	$10^{-2}$	с	c
Деци	$10^{-1}$	д	d
Кило	$10^3$	К	K
Мега	$10^6$	М	M
Гига	$10^9$	Г	G
Тера	$10^{12}$	Т	T
пета	$10^{15}$	П	P

## Некоторые интегралы

- $$\int_0^{\infty} \frac{x^n dx}{e^x - 1} = \begin{cases} \pi^2/6, & n = 1, \\ 2.405, & n = 2, \\ \pi^4/15, & n = 3, \\ 24.9, & n = 4. \end{cases}$$
- $$\int_0^{\infty} x^n \exp(-x) dx = n!, \quad n > 0 \text{ - целое.}$$
- Интеграл Пуассона  $\int_{-\infty}^{\infty} \exp(-x^2) dx = \sqrt{\pi}$ .

4.  $\Gamma$ -функция Эйлера  $\Gamma(p) = \int_0^{\infty} x^{p-1} e^{-x} dx$ .

$$\Gamma(p+1) = p\Gamma(p), \quad \Gamma(2) = \Gamma(1) = 1, \quad \Gamma(1/2) = \sqrt{\pi}.$$

### Полиномы Эрмита.

Общее выражение для полиномов Эрмита:

$$H_n(\zeta) = (-1)^n e^{\zeta^2} \frac{d^n}{d\zeta^n} (e^{-\zeta^2}).$$

В частности,  $H_0(\zeta) = 1$ ,  $H_1(\zeta) = 2\zeta$ ,  $H_2(\zeta) = 4\zeta^2 - 2$ ,  $H_3(\zeta) = \zeta^3 - 12\zeta$ .

Нормировка и ортогональность

$$\int_{-\infty}^{\infty} H_m(x) H_n(x) \exp(-x^2) dx = 2^n n! \sqrt{\pi} \delta_{mn}.$$

Рекуррентные соотношения для полиномов Эрмита

$$\zeta H_n(\zeta) = (n-1)H_n(\zeta) + \frac{1}{2}H_{n+1}(\zeta), \quad \frac{dH_n(\zeta)}{d\zeta} = 2nH_{n-1}(\zeta).$$

### Сферические функции.

Общее представление  $Y_{lm}(\theta, \varphi) = \Theta_{lm}(\theta)\Phi_m(\varphi)$ ,

$$\text{где } \Theta_{lm}(\theta) = (-1)^m \sqrt{\frac{2\ell+1}{2} \frac{(\ell-m)!}{(\ell+m)!}} \cdot P_\ell^{|m|}(\cos\theta),$$

$$P_\ell^m(x) = (1-x^2)^{m/2} \frac{d^{\ell+m}}{dx^{\ell+m}} (x^2-1)^\ell - \text{присоединенные полиномы}$$

Лежандра ( $m \geq 0$ ),

$$\Phi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(im\varphi).$$

Нормировка и ортогональность

$$\int Y_{lm}^*(\theta, \varphi) Y_{\ell'm'}(\theta, \varphi) \sin\theta d\theta d\varphi = \delta_{\ell\ell'} \delta_{mm'}.$$

В частности,

$$Y_{00}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{1}{4\pi}}; \quad Y_{10}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos(\theta); \quad Y_{1,\pm 1}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin(\theta) e^{\pm i\varphi},$$

$$Y_{2,0}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{5}{4\pi}} \left( \frac{1}{2} (3\cos^2(\theta) - 1) \right), \quad Y_{2,\pm 1}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{5}{24\pi}} \sin(\theta) \cos(\theta) e^{\pm i\varphi},$$

$$Y_{2,\pm 2}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{3}{48\pi}} \sin^2(\theta) e^{\pm 2i\varphi}.$$

Разложение  $\frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}$  по сферическим функциям

$$\frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} = \begin{cases} \frac{4\pi}{r_1} \sum_{\ell m} \frac{1}{2\ell+1} \left(\frac{r_2}{r_1}\right)^\ell Y_{\ell m}^*(\theta_1, \varphi_1) Y_{\ell m}(\theta_2, \varphi_2), & r_1 > r_2, \\ \frac{4\pi}{r_2} \sum_{\ell m} \frac{1}{2\ell+1} \left(\frac{r_1}{r_2}\right)^\ell Y_{\ell m}^*(\theta_1, \varphi_1) Y_{\ell m}(\theta_2, \varphi_2), & r_1 < r_2. \end{cases}$$

Здесь  $(\theta_1, \varphi_1)$  и  $(\theta_2, \varphi_2)$  - полярный и азимутальный углы векторов  $\vec{r}_1$  и  $\vec{r}_2$ .

### Оператор Лапласа:

а) в декартовых координатах

$$\nabla^2 \psi = \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2};$$

б) в цилиндрических координатах

$$\nabla^2 \psi = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2};$$

в) в сферических координатах

$$\nabla^2 \psi = \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} (r\psi) + \frac{1}{r^2 \sin\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin\theta \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2\theta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2}$$

**Атомные массы, размеры, потенциалы ионизации, спектроскопические характеристики элементов периодической системы**

Атомный номер	Элемент	Символ	Атомная масса	Электронная конфигурация	Основной терм	Средний радиус, ед. $a_0$	Потенциалы ионизации, (эВ)	
							I	II
1	Водород	H	1.008	1s	$^2S$	1.5	13.599	-
2	Гелий	He	4.003	1s <sup>2</sup>	$^1S$	0.927	24.588	54.418
3	Литий	Li	6.940	2s	$^2S$	3.874	5.392	75.641
4	Бериллий	Be	9.013	2s <sup>2</sup>	$^1S$	2.649	9.323	18.211
5	Бор	B	10.81	2p	$^2P$	2.205	8.298	25.155
6	Углерод	C	12.011	2p <sup>2</sup>	$^3P$	1.743	11.260	24.384
7	Азот	N	14.007	2p <sup>3</sup>	$^4S$	1.447	14.534	29.602
8	Кислород	O	16.00	2p <sup>4</sup>	$^3P$	1.239	13.618	35.118
9	Фтор	F	19.00	2p <sup>5</sup>	$^2P$	1.085	17.423	34.971
10	Неон	Ne	20.179	2p <sup>6</sup>	$^1S$	0.965	21.565	40.964
11	Натрий	Na	22.990	3s	$^2S$	4.209	5.139	47.287
12	Магний	Mg	24.305	3s <sup>2</sup>	$^1S$	3.253	7.646	15.035
13	Алюминий	Al	26.98	3p	$^2P$	3.434	5.986	18.829
14	Кремний	Si	28.09	3p <sup>2</sup>	$^3P$	2.788	8.152	16.346
15	Фосфор	P	30.974	3p <sup>3</sup>	$^4S$	2.369	10.487	19.726
16	Сера	S	32.06	3p <sup>4</sup>	$^3P$	2.069	10.360	23.338
17	Хлор	Cl	35.453	3p <sup>5</sup>	$^2P$	1.842	12.968	23.814
18	Аргон	Ar	39.948	3p <sup>6</sup>	$^1S$	1.663	15.760	27.630
19	Калий	K	39.10	4s	$^2S$	5.244	4.341	31.626
20	Кальций	Ca	40.08	4s <sup>2</sup>	$^1S$	4.218	6.113	11.872
21	Скандий	Sc	44.96	3d4s <sup>2</sup>	$^2D$	3.96	6.562	12.800
22	Титан	Ti	47.90	3d <sup>2</sup> 4s <sup>2</sup>	$^3F$	3.766	6.74	13.58
23	Ванадий	V	50.94	3d <sup>3</sup> 4s <sup>2</sup>	$^4F$	3.607	6.74	14.66
24	Хром	Cr	51.996	3d <sup>5</sup> 4s	$^7S$	3.843	6.767	16.498
25	Марганец	Mn	54.94	3d <sup>5</sup> 4s <sup>2</sup>	$^6S$	3.349	7.434	15.640
26	Железо	Fe	55.85	3d <sup>6</sup> 4s <sup>2</sup>	$^5D$	3.242	7.870	16.188
27	Кобальт	Co	58.93	3d <sup>7</sup> 4s <sup>2</sup>	$^4F$	3.144	7.864	17.083
28	Никель	Ni	58.70	3d <sup>8</sup> 4s <sup>2</sup>	$^3F$	3.055	7.637	18.169

Атомный номер	Элемент	Символ	Атомная масса	Электронная конфигурация	Основной терм	Средний радиус, ед. $a_0$	Потенциалы ионизации, (эВ)	
							I	II
29	Медь	Cu	63.55	3d <sup>10</sup> 4s	$^2S$	3.331	7.726	20.292
30	Цинк	Zn	65.38	3d <sup>10</sup> 4s <sup>2</sup>	$^1S$	2.898	9.394	17.965
31	Галлий	Ga	69.72	4s <sup>2</sup> 4p	$^2P$	3.424	5.999	20.515
32	Германий	Ge	72.59	4s <sup>2</sup> 4p <sup>2</sup>	$^3P$	2.904	7.899	15.934
33	Мышьяк	As	74.92	4s <sup>2</sup> 4p <sup>3</sup>	$^4S$	2.561	9.789	18.589
34	Селен	Se	78.96	4s <sup>2</sup> 4p <sup>4</sup>	$^3P$	2.309	9.752	21.16
35	Бром	Br	79.904	4s <sup>2</sup> 4p <sup>5</sup>	$^2P$	2.112	11.814	21.81
36	Криптон	Kr	83.80	4s <sup>2</sup> 4p <sup>6</sup>	$^1S$	1.952	14.000	24.359
37	Рубидий	Rb	85.47	5s	$^2S$	5.632	4.177	27.28
38	Стронций	Sr	87.62	5s <sup>2</sup>	$^1S$	4.633	5.695	11.030
39	Иттрий	Y	88.91	4d5s <sup>2</sup>	$^2D$	4.300	6.217	12.24
40	Цирконий	Zr	91.22	4d <sup>2</sup> 5s <sup>2</sup>	$^3F$	4.078	6.634	13.13
41	Ниобий	Nb	92.91	4d <sup>4</sup> 5s	$^6D$	4.207	6.759	14.32
42	Молибден	Mo	95.94	4d <sup>5</sup> 5s	$^7S$	4.079	7.092	16.16
43	Технеций	Tc	[98]	4d <sup>5</sup> 5s <sup>2</sup>	$^6S$	3.650	7.28	15.26
44	Рутений	Ru	101.1	4d <sup>7</sup> 5s	$^5F$	3.877	7.366	16.76
45	Родий	Rh	102.91	4d <sup>8</sup> 5s	$^4F$	3.795	7.46	18.08
46	Палладий	Pd	106.4	4d <sup>10</sup>	$^1S$	1.533	8.336	19.43
47	Серебро	Ag	107.88	4d <sup>10</sup> 5s	$^2S$	3.656	7.576	21.484
48	Кадмий	Cd	112.41	4d <sup>10</sup> 5s <sup>2</sup>	$^1S$	3.237	8.994	16.908
49	Индий	In	114.82	5s <sup>2</sup> 5p	$^2P$	3.778	5.786	18.870
50	Олово	Sn	118.69	5s <sup>2</sup> 5p <sup>2</sup>	$^3P$	3.286	7.344	14.632
51	Сурьма	Sb	121.75	5s <sup>2</sup> 5p <sup>3</sup>	$^4S$	2.952	8.608	16.53
52	Теллур	Te	127.60	5s <sup>2</sup> 5p <sup>4</sup>	$^3P$	2.701	9.010	18.6
53	Иод	I	126.90	5s <sup>2</sup> 5p <sup>5</sup>	$^2P$	2.502	10.451	19.131
54	Ксенон	Xe	131.30	5s <sup>2</sup> 5p <sup>6</sup>	$^1S$	2.338	12.130	21.21
55	Цезий	Cs	132.91	6s	$^2S$	6.30	3.894	25.08
56	Барий	Ba	137.33	6s <sup>2</sup>	$^1S$	5.25	5.212	10.004
57	Лантан	La	138.91	5d6s <sup>2</sup>	$^2D$	4.93	5.577	11.06
58	Церий	Ce	140.12	4f5d6s <sup>2</sup>	$^1G$	4.88	5.539	10.85
59	Прозеодим	Pr	140.9	4f <sup>3</sup> 6s <sup>2</sup>	$^4I$	5.06	5.473	10.55
60	Неодим	Nd	144.24	4f <sup>4</sup> 6s <sup>2</sup>	$^5I$	5.01	5.526	10.73

Атомный номер	Элемент	Символ	Атомная масса	Электронная конфигурация	Основной терм	Средний радиус, ед. $a_0$	Потенциалы ионизации, (эВ)	
							I	II
61	Прометий	Pm	[145]	$4f^6 6s^2$	$^6H$	4.96	5.582	10.9
62	Самарий	Sm	150.4	$4f^6 6s^2$	$^7F$	4.91	5.644	11.07
63	Европий	Eu	151.96	$4f^7 6s^2$	$^8S$	4.86	5.670	11.24
64	Гадолиний	Gd	157.25	$4f^7 5d 6s^2$	$^9D$	4.58	6.150	12.09
65	Тербий	Tb	158.93	$4f^9 6s^2$	$^6H$	4.77	5.864	11.52
66	Диспрозий	Dy	162.50	$4f^{10} 6s^2$	$^5I$	4.73	5.939	11.67
67	Гольмий	Ho	164.93	$4f^{11} 6s^2$	$^4I$	4.69	6.022	11.80
68	Эрбий	Er	167.26	$4f^{12} 6s^2$	$^3H$	4.65	6.108	11.93
69	Тулий	Tm	168.93	$4f^{13} 6s^2$	$^2F$	4.61	6.184	12.05
70	Иттербий	Yb	173.04	$4f^{14} 6s^2$	$^1S$	4.57	6.254	12.76
71	Лютеций	Lu	174.97	$4f^{14} 5d 6s^2$	$^2D$	4.27	5.426	12.97
72	Гафний	Hf	178.49	$5d^2 6s^2$	$^3F$	4.08	6.454	13.78
73	Тантал	Ta	180.95	$5d^3 6s^2$	$^4F$	3.94	7.89	14.47
74	Вольфрам	W	183.85	$5d^4 6s^2$	$^5D$	3.82	7.98	15.08
75	Рений	Re	186.21	$5d^5 6s^2$	$^6S$	3.72	7.88	15.73
76	Осмий	Os	190.2	$5d^6 6s^2$	$^5D$	3.62	8.73	16.34
77	Иридий	Ir	192.2	$5d^7 6s^2$	$^4F$	3.53	9.05	16.91
78	Платина	Pt	195.09	$5d^9 6s$	$^3D$	3.72	8.96	18.563
79	Золото	Au	196.97	$5d^{10} 6s$	$^2S$	3.70	9.226	20.56
80	Ртуть	Hg	200.59	$5d^{10} 6s^2$	$^1S$	3.33	10.438	18.756
81	Таллий	Tl	204.37	$6s^2 6p$	$^2P$	3.92	6.108	20.428
82	Свинец	Pb	207.21	$6s^2 6p^2$	$^3P$	3.42	7.417	15.032
83	Висмут	Bi	208.98	$6s^2 6p^3$	$^4S$	3.08	7.285	16.69
84	Полоний	Po	[209]	$6s^2 6p^4$	$^3P$	-	8.417	17.18
85	Астат	At	[210]	$6s^2 6p^5$	$^2P$	-	9.224	19.10
86	Радон	Rn	[222]	$6s^2 6p^6$	$^1S$	2.54	10.749	20.99
87	Франций	Fr	[223]	$7s$	$^2S$	-	4.073	20.02
88	Радий	Ra	226.03	$7s^2$	$^1S$	-	5.279	10.147
89	Актиний	Ac	227.03	$6d 7s^2$	$^2D$	-	5.17	11.04
90	Торий	Th	232.04	$6d^2 7s^2$	$^3F$	5.00	6.08	11.90
91	Протактиний	Pa	231.04	$5f^2 6d 7s^2$	$^4K$	5.35	5.89	11.46

Атомный номер	Элемент	Символ	Атомная масса	Электронная конфигурация	Основной терм	Средний радиус, ед. $a_0$	Потенциалы ионизации, (эВ)	
							I	II
92	Уран	U	238.03	$5f^3 6d 7s^2$	$^5L$	5.08	6.194	11.63
93	Нептуний	Np	237.05	$5f^4 6d 7s^2$	$^6L$	-	6.266	11.80
94	Плутоний	Pu	[244]	$5f^6 7s^2$	$^7F$	5.18	6.06	11.19
95	Амерций	Am	[243]	$5f^7 7s^2$	$^8S$		5.99	12.15
96	Кюрий	Cm	[245]	$5f^8 6d 7s^2$	$^9D$		6.02	12.36
97	Берклий	Bk	[247]	$5f^9 7s^2$	$^8H$		6.23	12.57
98	Калифорний	Cf	[249]	$5f^{10} 7s^2$	$^5I$		6.30	11.83
99	Эйнштейний	Es	[254]	$5f^{11} 7s^2$	$^4I$		6.42	11.98
100	Фермий	Fm	[253]	$5f^{12} 7s^2$	$^3H$		6.50	12.14
101	Менделевий	Md	[255]	$5f^{13} 7s^2$	$^2F$		6.58	12.29
102	Нобелий	No	[255]	$5f^{14} 7s^2$	$^1S$		6.65	12.45
103	Лоуренсий	Lr	[257]	$5f^{14} 6d 7s^2$	$^2D$		4.312	14.00
104	Резерфордий	Rf	[261]	$6d^2 7s^2$				
105	Дубний	Db	[262]	$6d^3 7s^2$				
106	Сиборгий	Sg	[263]	$6d^4 7s$				
107	Борий	Bh	[262]	$6d^5 7s$				
108	Хассий	Hs	[264]	$6d^6 7s$				
109	Мейтнерий	Mt	[266]	$6d^7 7s$				

Примечания.

- 1) В квадратных скобках указаны массовые числа наиболее устойчивых изотопов данного элемента.
- 2) Основные термы всех элементов заданы в приближении  $LS$  связи. Это приближение нарушается для тяжелых атомов, поэтому представленные данные для тяжелых атомов достаточно условны.
- 3) Под средним радиусом атома понимается среднее удаление валентного электрона от атомного ядра. Эта величина рассчитывалась по формуле

$$\langle r \rangle = \int_0^{\infty} r^3 |\psi|^2 dr,$$

где одноэлектронная радиальная волновая функция была получена путем разложения в ряд по базису слэтеровских атомных орбиталей.

### Параметры некоторых двухатомных молекул

Молекула	Основной электронный терм	Потенциал ионизации, эВ	Равновесное межъядерное расстояние, А	Колебательный квант, эВ	Вращательная постоянная <sup>(*)</sup> , эВ	Энергия диссоциации, эВ
H <sub>2</sub> <sup>+</sup>	2 $\Sigma$	29.9	1.06	0.285	3.70(-3)	2.649
H <sub>2</sub>	1 $\Sigma$	15.426	0.741	0.545	7.55(-3)	4.48
N <sub>2</sub>	1 $\Sigma$	15.580	1.098	0.293	2.48(-4)	9.76
O <sub>2</sub>	3 $\Sigma$	12.077	1.207	0.196	1.79(-4)	5.12
F <sub>2</sub>	1 $\Sigma$	15.686	1.417	0.141	1.10(-4)	1.38
Cl <sub>2</sub>	1 $\Sigma$	11.48	1.988	0.069	2.08(-5)	2.50
Br <sub>2</sub>	1 $\Sigma$	10.56	2.281	0.040	1.01(-5)	1.97
I <sub>2</sub>	1 $\Sigma$	9.4	2.666	0.027	4.64(-6)	1.54
Li <sub>2</sub>	1 $\Sigma$	5.15	2.67	0.044	8.35(-5)	1.03
HCl	1 $\Sigma$	12.74	1.275	0.371	1.30(-3)	4.43
HBr	1 $\Sigma$	11.62	1.414	0.329	1.04(-3)	3.75
HI	1 $\Sigma$	10.38	1.609	0.287	7.98(-4)	3.06
LiH	1 $\Sigma$	7.85	1.595	0.174	9.34(-4)	2.43
Na <sub>2</sub>	1 $\Sigma$	4.90	3.077	0.020	1.92(-5)	0.75
NaCl	1 $\Sigma$	8.92	2.361	0.045	2.71(-5)	4.3
CO	1 $\Sigma$	14.014	1.128	0.269	2.40(-4)	11.09
NO	2 $\Pi$	9.264	1.151	0.237	2.12(-4)	6.50
OH	2 $\Pi$	13.18	0.971	0.464	2.34(-3)	4.40
CN	2 $\Sigma$	14.20	1.172	0.257	2.36(-4)	7.75
CH	2 $\Pi$	10.9	1.120	0.355	1.76(-3)	3.45

(\*) Число 7.55(-3) следует читать как  $7.55 \cdot 10^{-3}$ .

### Длины волн и силы осцилляторов переходов некоторых атомных переходов

Атом	Переход	Длина волны, А	Сила осциллятора
H	1s → 2p	1215.7	0.416
	1s → 3p	10025.7	0.079
	1s → 4p	972.5	0.029
	2s → 3p	6562.7	0.435
	2p → 3s	6562.9	0.0136
	2p → 3d	6562.8	0.696
	2s → 4p	4861.29	0.103
	2p → 4s	4861.35	0.0030
	2p → 4d	4861.33	0.122
He	1s <sup>2</sup> ( <sup>1</sup> S) → 1s2p( <sup>1</sup> P)	584.3	0.276
	1s <sup>2</sup> ( <sup>1</sup> S) → 1s3p( <sup>1</sup> P)	537.0	0.0734
	1s <sup>2</sup> ( <sup>1</sup> S) → 1s4p( <sup>1</sup> P)	522.2	0.030
	1s2s( <sup>1</sup> S) → 1s2p( <sup>1</sup> P)	20581.3	0.376
	1s2s( <sup>1</sup> S) → 1s3p( <sup>1</sup> P)	5015.7	0.151
	1s2s( <sup>1</sup> S) → 1s4p( <sup>1</sup> P)	3964.7	0.14
	1s2s( <sup>3</sup> S) → 1s2p( <sup>3</sup> P)	10830	0.539
	1s2s( <sup>3</sup> S) → 1s3p( <sup>3</sup> P)	3888.6	0.0645
	1s2s( <sup>3</sup> S) → 1s4p( <sup>3</sup> P)	3187.7	0.023
Li	2s <sub>1/2</sub> → 2p <sub>1/2</sub>	6707.91	0.251
	2s <sub>1/2</sub> → 2p <sub>3/2</sub>	6707.76	0.502
	2p <sub>1/2</sub> → 3s <sub>1/2</sub>	8126.23	0.115
	2p <sub>3/2</sub> → 3s <sub>1/2</sub>	8126.45	0.115
Na	3s <sub>1/2</sub> → 3p <sub>1/2</sub>	5895.9	0.324
	3s <sub>1/2</sub> → 3p <sub>3/2</sub>	5889.9	0.648
	3s <sub>1/2</sub> → 4p <sub>1/2</sub>	3303.9	0.051
	3s <sub>1/2</sub> → 4p <sub>3/2</sub>	3302.9	0.102
	3p <sub>1/2</sub> → 4s <sub>1/2</sub>	22057.0	0.167
	3p <sub>3/2</sub> → 4s <sub>1/2</sub>	22084.0	0.335

Атом	Переход	Длина волны, Å	Сила осциллятора
K	$4s_{1/2} \rightarrow 4p_{1/2}$	7699.0	0.347
	$4s_{1/2} \rightarrow 4p_{3/2}$	7664.9	0.684
	$4p_{1/2} \rightarrow 5s_{1/2}$	12434.3	0.051
	$4p_{3/2} \rightarrow 5s_{1/2}$	12523.0	0.102
Rb	$5s_{1/2} \rightarrow 5p_{1/2}$	7947.6	0.363
	$5s_{1/2} \rightarrow 5p_{3/2}$	7800.23	0.726
	$5p_{1/2} \rightarrow 6s_{1/2}$	13237.3	0.187
	$5p_{3/2} \rightarrow 6s_{1/2}$	13667.0	0.364
Cs	$6s_{1/2} \rightarrow 6p_{1/2}$	8943.5	0.394
	$5s_{1/2} \rightarrow 6p_{3/2}$	8521.2	0.814
	$6p_{1/2} \rightarrow 7s_{1/2}$	4593.2	0.00284
	$6p_{1/2} \rightarrow 7p_{3/2}$	45554.4	0.0174
Be	$2s^2 \rightarrow 2s2p(^1P)$	2348.61	1.36
	$2s2p(^1P) \rightarrow 2s3s(^1S)$	8254.1	0.13
	$2s2p(^1P) \rightarrow 2s3d(^1D)$	4572.7	0.19
	$2s2p(^3P) \rightarrow 2s3s(^3S)$	3321.2	0.034
	$2s2p(^3P) \rightarrow 2s3d(^3D)$	2494.6	0.16
	$2s2p(^3P) \rightarrow 2p^2(^3P)$	2650.6	0.466
B	$2s^2 2p \rightarrow 2s^2 3s$	2497.4	0.11
	$2s^2 2p \rightarrow 2s^2 3d$	2089.3	0.24
	$2s^2 3s \rightarrow 2s^2 3p$	11661	1.07
	$2s^2 2p \rightarrow 2s2p^2(^2D)$	2089.3	0.24
	$2s^2 2p \rightarrow 2s2p^2(^2S)$	1573.5	0.16
Mg	$3s^2 \rightarrow 3s3p(^1P)$	2852	1.2
	$3s^2 \rightarrow 3s3p(^3P)$	4571.1	$2.6 \cdot 10^{-6}$

Атом	Переход	Длина волны, Å	Сила осциллятора
Al	$3s^2 3p(^2P_{1/2}) \rightarrow 3s^2 4s(^2S_{1/2})$	3944.0	0.15
	$3s^2 3p(^2P_{3/2}) \rightarrow 3s^2 4s(^2S_{1/2})$	3962.0	0.15
	$3s^2 3p(^2P_{3/2}) \rightarrow 3s^2 4d(^2D_{3/2,5/2})$	3092.0	0.23
	$3s^2 3p(^2P_{1/2}) \rightarrow 3s^2 4d(^2D_{3/2})$	3089.0	0.22

Сила осциллятора перехода  $i \rightarrow f$  ( $i, f$  — совокупности квантовых чисел начального и конечного состояний атома) определяется с помощью следующего выражения

$$F_{fi} = \frac{1}{g_i} \frac{2m\omega_{fi}}{3\hbar e^2} |d_{fi}|^2, \text{ где } \omega_{fi} \text{ — частота перехода,}$$

$d_{fi}$  — матричный элемент дипольного момента атома,  $g_i = 2J_i + 1$  — кратность вырождения начального состояния ( $J$  — квантовое число полного механического момента атома). Вероятность перехода в единицу времени из состояния  $|i\rangle$  в состояние  $|f\rangle$  определяется выражением

$$w_{fi} = \frac{2e^2 \omega_{fi}^2}{mc^3} F_{fi}.$$

Время жизни относительно спонтанного перехода состояния  $|i\rangle$  определяется как  $\tau_i = (\sum_f w_{fi})^{-1}$ , где сумма берется по всем ниже лежащим состояниям.

### Метастабильные состояния атомов

Атом	Состояние	Энергия возбуждения, эВ	Время жизни, с
H	$2s$	10.20	0.142
He	$1s2s(^3S)$	19.82	$6 \cdot 10^5$
	$1s2s(^1S)$	20.61	0.038
N	$2p^3(^2D_{5/2})$	2.384	$6 \cdot 10^4$
	$2p^3(^2D_{3/2})$	2.385	$1.4 \cdot 10^5$
	$2p^3(^2P)$	3.58	13
O	$2p^4(^1D_2)$	1.97	110
	$2p^4(^1S)$	4.19	0.8