Квантовая механика

Тютюньков Вячеслав
Брусенцов Леонид

21 января 2006 г.

Глава 1

Контрольное задание 1

№ 2:

- **Задание:**

  Определить наименьшее значение энергии электрона, при которой он беспрепятственно пройдёт над прямоугольной потенциальной ямой глубиной $U = -5$ эВ и шириной $\ell = 10^{-8}$ см.

- **Решение:**

  Выберем в общем виде волновые функции для трёх зон:

$$\begin{cases} \Psi_I = A_1 \cdot e^{i \cdot kx} + A_2 \cdot e^{-i \cdot kx}, \\ \Psi_{III} = B_1 \cdot e^{i \cdot kx} + B_2 \cdot e^{-i \cdot kx}, \\ \Psi_{II} = C_1 \cdot e^{i \cdot knx} + C_2 \cdot e^{-i \cdot knx}. \end{cases},$$

что соответствует направлениям потока частиц, здесь мы взяли во второй области $k_{II} = kn$, теперь можно взять $A_1 = 1$, так как нас интересуют только отношения, и $B_2 = 0$, так как по смыслу обратного потока в области III возникать не должно.

Итак перепишем:

$$\begin{cases} \Psi_I = e^{i \cdot kx} + A \cdot e^{-i \cdot kx}, \\ \Psi_{III} = B \cdot e^{i \cdot kx}, \\ \Psi_{II} = C_1 \cdot e^{i \cdot knx} + C_2 \cdot e^{-i \cdot knx}. \end{cases},$$

нас интересует коэффициент прохождения $D = |B|^2$, попытаемся вычислить его, для этого напишем следующие условия сшивания на границе:

$$\begin{cases} 1 + A = C_1 + C_2, \\ 1 - A = C \cdot n - D \cdot n, \\ C \cdot e^{i \cdot kn\ell} + D \cdot e^{-i \cdot kn\ell} = B \cdot e^{i \cdot k\ell}, \\ Cn \cdot e^{i \cdot kn\ell} - Dn \cdot e^{-i \cdot kn\ell} = B \cdot e^{i \cdot k\ell}. \end{cases},$$

сразу исключаем как ненужные коэффициенты C и D и первых двух уравнений:

$$D = 1 + A - C = -\frac{1 - A}{n} + C \Rightarrow \begin{cases} C = \frac{(n+1) + A \cdot (n-1)}{2n}, \\ D = \frac{(n-1) + A \cdot (n+1)}{2n}. \end{cases},$$

вставляем их в остальные:

$$\begin{cases} \Big((n+1) + A \cdot (n-1)\Big) \cdot e^{i \cdot kn\ell} + \Big((n-1) + A \cdot (n+1)\Big) \cdot e^{-i \cdot kn\ell} = 2nB \cdot e^{i \cdot k\ell}, \\ \Big((n+1) + A \cdot (n-1)\Big) \cdot e^{i \cdot kn\ell} - \Big((n-1) + A \cdot (n+1)\Big) \cdot e^{-i \cdot kn\ell} = 2B \cdot e^{i \cdot k\ell}. \end{cases},$$

складывая их и отнимая из первого второе, получаем два уравнения:

$$\begin{cases} 2(n+1) \cdot e^{i \cdot kn\ell} + 2A \cdot (n-1) \cdot e^{i \cdot kn\ell} & = 2(n+1)B \cdot e^{i \cdot k\ell}, \\ 2(n-1) \cdot e^{-i \cdot kn\ell} + 2A \cdot (n+1) \cdot e^{-i \cdot kn\ell} & = 2(n-1)B \cdot e^{i \cdot k\ell}. \end{cases},$$

сокращаем всё, что сокращается:

$$\begin{cases} (n+1) \cdot e^{i \cdot k(n-1)\ell} + A \cdot (n-1) \cdot e^{i \cdot k(n-1)\ell} & = (n+1)B, \\ (n-1) + A \cdot (n+1) & = (n-1)B \cdot e^{i \cdot k(n+1)\ell}. \end{cases},$$

выражаем из первого A:

$$A = \frac{(n+1)\cdot(B - e^{i\cdot k(n-1)\ell})}{(n-1)\cdot e^{i\cdot k(n-1)\ell}},$$

подставляем:

$$(n-1) + \frac{(n+1)^2\cdot(B - e^{i\cdot k(n-1)\ell})}{(n-1)\cdot e^{i\cdot k(n-1)\ell}} = (n-1)B\cdot e^{i\cdot k(n+1)\ell},$$

приводим к общему знаменателю:

$$(n-1)^2\cdot e^{i\cdot k(n-1)\ell} + (n+1)^2\cdot(B - e^{i\cdot k(n-1)\ell}) = (n-1)^2 B\cdot e^{i\cdot 2kn\ell}$$
$$B\cdot\Big((n-1)^2\cdot e^{i\cdot 2kn\ell} - (n+1)^2\Big) = -4n\cdot e^{i\cdot k(n-1)\ell}$$

осталось найти модуль:

$$|B|^2 = \frac{16n^2}{((n-1)^2\cdot\cos(2kn\ell) - (n+1)^2)^2 + (n-1)^2\cdot\sin^2(2kn\ell)} =$$
$$= \frac{16n^2}{(n-1)^2 - 2\cdot(n-1)^2\cdot(n+1)^2\cdot\cos(2kn\ell) + (n+1)^4} = 1,$$

последнее так как прохождение считаем беспрепятственным, видно, что должно выполняться $\cos(2kn\ell) = 1$, или, что то же самое, $2kn\ell = 2\pi s \Rightarrow kn = \pi s/\ell$.

Мы знаем, что

$$E - U_0 = \frac{p^2}{2m} = \frac{(kn)^2\hbar^2}{2m} = \frac{\pi^2 s^2\hbar^2}{2m\ell^2},$$

если посчитать, а константы выглядят таким образом

$$\hbar = 1.054\cdot 10^{-27}\text{ эрг.}\cdot\text{сек.},$$
$$m_e = m = 9.1\cdot 10^{-28}\text{ г.},$$
$$1\text{ эВ} = 1.6\cdot 10^{-12}\text{ эрг.}$$

то получится $E \approx 32,65213$ эВ.. для $s = 1$, что соответствует минимальной энергии.

№ 3:

▷ **Задание:**

Электрон находится в одномерном потенциальном поле: $U(0) = \infty$, $U(x) = 0$ при $0 < x < \ell$; $U(x) = U_0$, при $x \geqslant \ell$. Определить:

1. Характер спектра энергии в зависимости от величины E;
2. Значение U_0, при котором энергия единственного уровня энергии в яме $E = U_0/2$. Для этого случая вычислить вероятность пребывания электрона вне классических границ поля.

▷ **Решение:**

1. Разделим на зоны, в первой берём стандартный вид

$$\Psi_I = A_1\cdot e^{ikx} + A_2\cdot e^{-ikx},$$

сразу должно выполняться, что $\Psi(0) = 0$, то есть $A_1 = -A_2$, перепишем

$$\Psi_I = i\cdot 2A\cdot\sin(kx).$$

То же проделаем со второй зоной

$$\Psi_{II} = B_1\cdot e^{iknx} + B_2\cdot e^{-iknx},$$

но должно выполняться $\Psi(\infty) = 0$, то есть $B_1 = 0$.

Граничные условия тоже должны выполняться

$$\begin{cases} i\cdot 2A\cdot\sin(k\ell) = B\cdot e^{-ikn\ell}, \\ i\cdot 2Ak\cdot\cos(k\ell) = -iknB\cdot e^{-ikn\ell}. \end{cases},$$

можно их разделить друг на дружку

$$\operatorname{tg}(k\ell) = -\frac{1}{in} \Rightarrow \operatorname{tg}^2(k\ell) = \frac{1}{n^2} = \frac{E}{U_0 - E} \Rightarrow E = U_0\cdot\sin^2(k\ell).$$

2. Оставляем предыдущие обозначения, теперь рассмотрим условие

$$\int_0^\ell |\Psi_I|^2\, dx + \int_\ell^\infty |\Psi_{II}|^2\, dx = \int_0^\ell \sin^2(kx)\, dx + \int_\ell^\infty A^2 \cdot e^{-2\lambda\ell x}\, dx = \frac{1}{2}\cdot\left(\ell + \frac{1}{k}\right)$$

Дальше рассмотрим вероятность

$$W = \int_\ell^\infty |\Psi_{II}|^2\, dx = \int_\ell^\infty \frac{A^2 \cdot e^{-2\lambda k}}{\frac{1}{2}\cdot\left(\ell+\frac{1}{k}\right)}\, dx = \frac{2}{(3+4n)\cdot\pi},$$

где n всё ещё количество уровней, её надо взять за единицу.

№ 4:

▷ **Задание:**

Проверить следующие правила коммутации:

$$\{\hat{y},\, \hat{L}_x\} = -i\hbar\hat{z}; \qquad \{\hat{L}_x,\, \hat{p}_y\} = i\hbar\hat{p}_z.$$

▷ **Решение:**

Для начала вспомним, что это за операторы, итак:

- $\hat{L}_x = \hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y$, рассмотрим:

$$\{\hat{y},\, \hat{L}_x\} = \hat{y}\left[(\hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y)\Psi\right] - (\hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y)(\hat{y}\Psi) = y^2\hat{p}_z\Psi - yz\hat{p}_y\Psi - y^2\hat{p}_z\Psi + z\cdot\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial y}(y\cdot\Psi)\right) =$$
$$= yz\hat{p}_y\Psi + zy\hat{p}_y\Psi - i\hbar\Psi = -i\hbar\Psi.$$

- Всё то же самое:

$$\{\hat{L}_x,\, \hat{p}_y\} = (\hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y)(\hat{p}_y\Psi) - \hat{p}_y[(\hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y)\Psi] = y\cdot\hat{p}_z\hat{p}_y\Psi - z\cdot\hat{p}_y\hat{p}_y\Psi - \hat{p}_y(y\cdot\hat{p}_z\Psi) + z\cdot\hat{p}_y\hat{p}_y\Psi =$$
$$= -y\cdot\hat{p}_z\hat{p}_y\Psi + i\hbar\hat{p}_z\Psi - y\cdot\hat{p}_y\hat{p}_z\Psi = i\hbar\hat{p}_z\Psi,$$

а $\hat{p}_z\hat{p}_y = \hat{p}_y\hat{p}_z$ так как они дифференцируемы по независимым переменным.

№ 5:

▷ **Задание:**

Для гармонического осциллятора в основном состоянии определить:

1. Наиболее вероятное значение координаты частицы $x_{\text{вер}}$, а также среднюю координату $\langle x\rangle$ и среднее значение модуля координаты $\langle|x|\rangle$;
2. Выразить $\langle|x|\rangle$ через классическую амплитуду колебаний A;
3. Сравнить плотность вероятности dW/dx для классического и квантового осцилляторов.

▷ **Решение:**

1. Гармонический осциллятор в нормальном состоянии это $\Psi = A\cdot e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}}$, очевидно, что самое вероятное значение $x_{\text{вер}} = 0$, очень хорошо видно, если начертить график $|\psi|^2$. Теперь найдём среднее значение из вероятности, то есть просто

$$\langle x\rangle = \int_{-\infty}^\infty A\cdot e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}}\cdot x\cdot e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}}\, dx = 0,$$

так как можно обнаружить некоторую симметрию (степень x вторая).

Тоже можно сделать и с модулем

$$\langle|x|\rangle = \int_{-\infty}^\infty A\cdot e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}}\cdot|x|\cdot e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}}\, dx = 2A^2\cdot\int_0^\infty x\cdot e^{-\frac{m\omega x^2}{\hbar}}\, dx = 2A^2\cdot\int_0^\infty \frac{1}{2}\cdot e^{-\frac{m\omega x^2}{\hbar}}\, dx^2 =$$
$$= -A^2\cdot\int_0^\infty \frac{\hbar}{m\omega}\cdot e^{-\frac{m\omega x^2}{\hbar}}\, d\left(-\frac{m\omega x^2}{\hbar}\right) = -\frac{A^2\hbar}{m\omega}\cdot e^{-\frac{m\omega x^2}{\hbar}}\bigg|_0^\infty = \frac{A^2\hbar}{m\omega}.$$

Но здесь требуется неизвестный коэффициент амплитуда, его можно выбрать из условия нормировки

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \cdot \Psi \, dx = A^2 \cdot \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{m\omega x^2}{\hbar}} \, dx$$

к нашему счастью этот интеграл табличный, в справочнике написано так:

$$\int_{0}^{\infty} e^{-a^2 x^2} \, dx = \frac{\sqrt{\pi}}{2a} \ (a > 0),$$

получается

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \cdot \Psi \, dx = A^2 \cdot \sqrt{\frac{\pi\hbar}{m\omega}} = 1,$$

последнее это и есть условие нормировки вероятности. Получаем, что

$$A^2 = \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} \Rightarrow \langle |x| \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{\pi m\omega}}.$$

2. В классике уравнение осциллятора выглядит так:

$$x = A \cdot \cos(\omega t + \varphi),$$

чтобы найти среднее значение, возьмём один период и сосчитаем такой интеграл

$$\langle |x| \rangle = \frac{1}{T} \cdot \int\limits_0^T |A \cdot \cos(\omega t)| \, dt = \frac{\omega}{2\pi} \cdot \int\limits_0^{2\pi/\omega} |A \cdot \cos(\omega t)| \, dt = \frac{2A}{\pi} \cdot \int\limits_0^{\pi/2\omega} \cos(\omega t) \, d(\omega t) = \frac{2A}{\pi} \cdot \sin(\omega t)\Big|_0^{\pi/2\omega} = \frac{2A}{\pi},$$

здесь мы интеграл считали не по окружности а её одной четверти, так как функция модуля косинуса симметрична.

3. Плотность вероятности из классики

$$\frac{dW}{dt} = \frac{2}{T},$$

$$\frac{dx}{dt} = \omega A \cdot \cos(\omega t + \varphi) \Rightarrow dt = \frac{dx}{\omega A \cdot \cos(\omega t + \varphi)} \Rightarrow \frac{dW}{dx} = \frac{2}{T} \cdot \frac{1}{\omega A \cdot \cos(\omega t + \varphi)} =$$

$$= \frac{2}{T\omega A \cdot \sqrt{1 - \sin^2(\omega t + \varphi)}} = \frac{2}{T\omega \cdot \sqrt{A^2 - x^2}} = \frac{1}{\pi \cdot \sqrt{A^2 - x^2}},$$

где период $T = 2\pi/\omega$.

Теперь рассмотрим для квантового

$$dW = |\Psi|^2 = A^2 \cdot e^{-\frac{m\omega x^2}{\hbar}} = \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} \cdot e^{-\frac{m\omega x^2}{\hbar}},$$

выглядит это примерно так

№ 6:

▷ **Задание:**

Определить собственные значения оператора $\hat{\ell}_z$ и вероятность их обнаружения для системы, находящейся в состоянии $\Psi(\varphi) = A \cdot (1 + \cos\varphi)^2$.

▷ **Решение:**

Вспомним, что

$$\hat{\ell}_z = -i\hbar \cdot \frac{\partial}{\partial \varphi},$$

тогда найдём собственные функции

$$-i\hbar \cdot \frac{\partial \Psi}{\partial \varphi} = \lambda \Psi \Rightarrow \frac{d\Psi}{\Psi} = \frac{i\lambda}{\hbar} \cdot d\varphi \Rightarrow \Psi = C \cdot e^{i\lambda\varphi/\hbar},\ C = 1/\sqrt{2\pi}.$$

Но у нас есть некоторые условия

$$\Psi(0) = \Psi(2\pi) \Rightarrow C = C \cdot e^{i\lambda 2\pi/\hbar} \Rightarrow \cos\left(\frac{2\pi\lambda}{\hbar}\right) + i \cdot \sin\left(\frac{2\pi\lambda}{\hbar}\right) = 1 \Rightarrow \cos\left(\frac{2\pi\lambda}{\hbar}\right) = 1,$$

получается, что

$$\Psi_n = \frac{e^{i\cdot 2\pi n}}{\sqrt{2\pi}}.$$

Теперь надо нормировать нашу функцию

$$A^2 \cdot \int_0^{2\pi} (1 + 2\cos\varphi + \cos^2\varphi)^2\, d\varphi = A^2 \cdot \frac{35\pi}{4} \Rightarrow A = \frac{2}{\sqrt{35\pi}},$$

что можно расписать по-другому

$$\Psi(\varphi) = \frac{2}{\sqrt{35\pi}} \cdot \left(1 + \frac{e^{i\varphi} + e^{-i\varphi}}{2}\right)^2 = \frac{2}{\sqrt{35\pi}} \cdot \left(\frac{3}{2} + \frac{e^{i\cdot 2\varphi} + e^{-i\cdot 2\varphi}}{4} + e^{i\cdot\varphi} + e^{-i\cdot\varphi}\right).$$

Распишем некоторые значения:

$$\Psi_0 = \frac{1}{\sqrt{2\pi}},\ \Psi_1 = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \cdot e^{i\cdot 2\pi},\ \Psi_2 = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \cdot e^{i\cdot 4\pi},\ \Psi_{-1} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \cdot e^{-i\cdot 2\pi},\ \Psi_{-2} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \cdot e^{-i\cdot 4\pi},$$

теперь составляем их них сумму:

$$\begin{cases} A_0 \cdot \Psi_0 & = \frac{3}{\sqrt{35\pi}}, \\ A_{1,-1} \cdot \Psi_{1,-1} & = \frac{1}{4} \cdot e^{\pm i\cdot 2\varphi}, \\ A_{2,-2} \cdot \Psi_{2,-2} & = \frac{1}{4} \cdot e^{\mp i\cdot 2\varphi}, \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} A_0 & = 3 \cdot \sqrt{\frac{2}{35}}, \\ A_{1,-1} & = \frac{1}{\sqrt{70}}, \\ A_{2,-2} & = \sqrt{\frac{8}{35}}. \end{cases}$$

№ 7:

▷ **Задание:**

В одномерной прямоугольной потенциальной яме с бесконечными стенками ($U = 0$ при $0 \leqslant x \leqslant a$) находится частица массой m, состояние которой описывается волновой функцией $\Psi(x) = A \cdot \sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right) \cdot \cos\left(\frac{\pi x}{a}\right)$. Определить:

1. Вероятность пребывания частицы в основном энергетическом состоянии и в состоянии с $n = 2$.
2. Среднюю кинетическую энергию частицы и средний импульс.

▷ **Решение:**

1. Нам не известна амплитуда, попробуем пронормировать

$$\int_0^a |\Psi(x)|^2\, dx = \int_0^a A^2 \cdot \sin^2\left(\frac{2\pi x}{a}\right) \cdot \cos^2\left(\frac{\pi x}{a}\right) dx = 4A^2 \cdot \int_0^a \sin^2\left(\frac{\pi x}{a}\right) \cdot \cos^4\left(\frac{\pi x}{a}\right) dx =$$
$$= 4A^2 \cdot \left(\int_0^a \cos^4\left(\frac{\pi x}{a}\right) dx - \int_0^a \cos^6\left(\frac{\pi x}{a}\right) dx\right) =_{\text{(справляемся в справочнике)}} \frac{A^2 a}{4} = 1 \Rightarrow A = \frac{2}{\sqrt{a}}.$$

Информация из справочника:

$$\int \cos^n(ax)\, dx = \frac{\cos^{n-1}(ax) \cdot \sin(ax)}{na} + \frac{n-1}{n} \cdot \int \cos^{n-2}(ax)\, dx.$$

Теперь найдём собственные функции гамильтониана, мы знаем, что $\Psi(0) = 0$, тогда для общего вида

$$\Psi(x) = A \cdot e^{i\omega x} + B \cdot e^{-i\omega x},$$

сразу получаем, что $A = -B$, обозначим тогда результат сложения $\Psi(x) = C \cdot \sin(\omega x)$. Дальше мы знаем, что

$$C \cdot \sin(\omega a) = 0 \Rightarrow \omega a = \pi n \Rightarrow \omega = \pi n / a,$$

отсюда получаем разложение нашей функции на собственные:

$$\Psi_n = C \cdot \sin\left(\frac{\pi n x}{a}\right).$$

Всё это нужно нормировать, действуем как раньше

$$C^2 \cdot \int_0^a \sin^2\left(\frac{\pi n x}{a}\right) dx = \frac{aC^2}{2} = 1 \Rightarrow C = \sqrt{2/a},$$

то есть

$$\Psi_n = \sqrt{\frac{2}{a}} \cdot \sin\left(\frac{\pi n x}{a}\right).$$

Теперь можно поискать вероятность пребывания в состояниях, смотрите

$$C_2 = \int_0^a \Psi_2^* \cdot \Psi \, dx = \int_0^a \sqrt{\frac{2}{a}} \cdot \sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right) \cdot \frac{2}{\sqrt{a}} \cdot \sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right) \cdot \cos\frac{\pi}{a} \, dx = \frac{2\sqrt{2}}{a} \cdot \int_0^a \sin^2\left(\frac{2\pi x}{a}\right) \cdot \cos\left(\frac{\pi x}{a}\right) dx = 0.$$

2. Здесь всё просто, будем действовать через операторы и вероятность, итак

$$\langle p_x \rangle = \int_0^a \Psi^* \hat{p}_x \Psi \, dx = \int_0^a \Psi \cdot \left(-i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial x}\right) dx = -i\hbar \frac{\Psi^2}{2}\bigg|_0^a = 0$$

$$\langle E \rangle = \int_0^a \Psi \cdot \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2}\right) dx,$$

здесь мы не станем просто считать, а разложим по формуле произведения синуса и косинуса

$$\Psi = \frac{2}{\sqrt{a}} \cdot \sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right) \cdot \cos\left(\frac{\pi x}{a}\right) = \frac{1}{\sqrt{a}} \cdot \left(\sin\left(\frac{3\pi x}{a}\right) + \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right)\right)$$

— на собственные функции гамильтониана, как мы выяснили чуть выше. Но собственные значения гамильтониана есть энергия, потому наш интеграл можно переписать

$$\int (\Psi_3 + \Psi_1)^* \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot (E_3 \psi_3 + E_1 \Psi_1) \, dx,$$

если заменить, что для нашего случая и E_1 и E_2 равновероятны, то их среднее значение аккуратно есть

$$\frac{E_1 + E_3}{2},$$

но можно проверить и формально, продолжим интеграл

$$\frac{1}{2}\left[\underbrace{\int (\Psi_3^* \cdot \Psi_1 \, dx) \cdot E_1}_{=0} + \underbrace{\int (\Psi_3^* \cdot \Psi_3 \, dx) \cdot E_3}_{=1} + \underbrace{\int (\Psi_1^* \cdot \Psi_3 \, dx) \cdot E_3}_{=0} + \underbrace{\int (\Psi_1^* \cdot \Psi_1 \, dx) \cdot E_1}_{=1}\right]$$

так как эти функции независимы, и они обладают свойством нормированности.

№ 8:

▷ **Задание:**

Вычислить для $2p$ и $3d$-состояний электрона в атоме водорода наиболее вероятное расстояние электрона от ядра. Сравнить полученные результаты с радиусами боровских орбит для $n = 2, 3$.

▷ **Решение:**

$2p$ описывается числами $n = 2$ и $\ell = 1$. Разложим нашу функцию на $Y_{\ell m} \cdot R_{n\ell}$, дальше действуем по формуле

$$R_{n\ell}(r) = A \cdot r^{\ell} \cdot e^{-r/n} \cdot \frac{d^{2\ell+1}}{dr^{2\ell+1}} \left(e^{r} \cdot \frac{d^{n+\ell}}{dr^{n+\ell}} (r^{n+\ell} \cdot e^{-r}) \right),$$

просто подставляем

$$R_{21}(r) = Ar \cdot e^{-r/2} \cdot \frac{d^3}{dr^3} \left(e^{r} \cdot \frac{d^3}{dr^3} (r^3 e^{-r}) \right) = Are^{-r/2} \cdot \frac{d^3}{dr^3} \left[e^{r} \frac{d}{dr} (6re^{-r} - 3r^2 e^{-r} - 3r^2 e^{-r} + e^{-r} r^3) \right] = -6Ar \cdot e^{-r/2}.$$

Рассмотрим

$$\rho = \frac{dW}{dr} = |R_{21}|^2 r^2 \sim r^4 e^{-r}$$
$$\rho' \sim 4r^3 e^{-r} - r^4 e^{-r} = r^3 e^{-r} \cdot (4 - r) = 0,$$

здесь мы воспользовались тем, что функция принимает максимальное значение в точке, где производная равна нулю, и получается, что $r = 4$ и, соответственно

$$R = r_{\text{бора}} \cdot r = 4 \cdot \frac{\hbar^2}{me^2}.$$

Для $3d$ получаем $n = 3$, $\ell = 2$, если посчитать, получится

$$R_{32} \sim Ar^2 e^{-r/3},\ \rho = \frac{dW}{dr} \sim A^2 r^6 e^{-2r/3},\ \rho' \sim A^2 r^5 e^{-2r/3} (-6 - 2r/3) = 0 \Rightarrow r = 9.$$

Глава 2

Контрольное задание 2

`№ 1:`

▷ **Задание:**

Атом, находящийся в состоянии, мультиплетность которого равна четырём, обладает механическим моментом $M_j = \hbar\sqrt{63}/2$. Какое значение может иметь квантовое число L для этого состояния?

▷ **Решение:**

Известно, что $M_J^2 = \hbar^2 \cdot J(J+1) \Rightarrow J(J+1) = 63/4 \Rightarrow J = 7/2$, а мультиплетность это число $2S+1 = 4 \Rightarrow \Rightarrow S = 3/2$, но $J = |L-S|, \ldots, L+S$, то есть $L = 2, 3, 4, 5$.

`№ 3:`

▷ **Задание:**

Вычислить в эВ дублетное расщепление нижнего ^2P терма атома натрия.

▷ **Решение:**

Формула для состояния атома щелочного металла имеет вид

$$\Delta T_E = \frac{R\alpha^2(z-a')^4}{n^4} \cdot \left(\frac{n}{j+1/2} - \frac{3}{4}\right),$$

где R — постоянная Ридбегра, α — постоянная экранирования ядра:

$$R = \frac{me^4}{2\hbar^3} \approx 2.07 \cdot 10^6 \text{ сек}^{-1}, \quad a' \approx 7.45 \text{ — для натрия.}, \quad \alpha \approx 1/137, \quad \hbar = 0.659 \cdot 10^{-15} \text{ эВ} \cdot \text{сек.}.$$

Основное состояние $3^2P_1/2$, то есть $n = 3$, $\ell = 1$, $z = 11$, $j = 1/2$, рассчитаем

$$\Delta T \approx 486,56,$$

остаётся только

$$\Delta E = \hbar c \cdot \Delta T \approx 9,62 \cdot 10^{-3}.$$

`№ 4:`

▷ **Задание:**

Изобразить схему возможных переходов в слабом магнитном поле и вычислить смещение (в единицах $\mu_B B/\hbar$) зеемановских компонент спектральной линии $^3F_4 \to {}^3D_3$.

▷ **Решение:**

Рассмотрим что это за состояния:

$$\begin{array}{lllll} ^3F_4 & S=1 & L=3 & J=4 & g=5/4 \\ ^3D_3 & S=1 & L=2 & J=3 & g=4/3 \end{array}$$

здесь g мы вычисляли по формуле

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

Переход энергии выглядит как

$$\mu_B \cdot g_{\text{нач.}} \cdot J_{\text{нач.}} \cdot B \to \mu_B \cdot g_{\text{кон.}} \cdot J_{\text{кон.}} \cdot B.$$

нужно начертить три таблички для возможных переходов, сначала пусть уровни сохраняются, этот случай называется π-линии, остальные два — σ-линии. Итак

$J_{\text{нач.}}$	$J_{\text{кон.}}$	$\Delta\omega$
4	3	$-\omega_L$
3	2	$-13\omega_L/12$
2	1	$-7\omega_L/6$
1	0	$-5\omega_L/4$
0	-1	$-4\omega_L/3$
-1	-2	$-17\omega_L/12$
-2	-3	$-3\omega_L/2$

σ-линия

$J_{\text{нач.}}$	$J_{\text{кон.}}$	$\Delta\omega$
3	3	$\omega_L/4$
2	2	$\omega_L/6$
1	1	$\omega_L/12$
0	0	0
-1	-1	$-\omega_L/12$
-2	-2	$-\omega_L/6$
-3	-3	$-\omega_L/4$

π-линия

$J_{\text{нач.}}$	$J_{\text{кон.}}$	$\Delta\omega$
2	3	$3\omega_L/2$
1	2	$17\omega_L/12$
0	1	$4\omega_L/3$
-1	0	$5\omega_L/4$
-2	-1	$7\omega_L/6$
-3	-2	$13\omega_L/12$
-4	-3	ω_L

σ-линия

здесь константа Лоренцево смещение

$$\omega_L = \frac{eB}{2mc} \approx 8\,791\,208,79 \cdot B.$$

№ 5:

▷ **Задание:**

Рассчитать расстояние в волновых числах между π и σ-компонентами линии $\lambda = 4892$ Å стронция (переход $^3F_4 \to 7^3D_3$) в магнитном поле $B = 3000$ Гс..

▷ **Решение:**

Сразу напишем

$$\Delta k = \frac{\Delta\omega}{c}, \quad \Delta\omega = \pm\frac{\mu_B \cdot B \cdot \Delta g}{\hbar}, \quad \omega = k \cdot c,$$

расстояние между подуровнями Δk можем рассчитать сразу

$$\Delta k = \frac{\omega_L}{12 \cdot c} \approx 7,326 \cdot 10^{-2} \text{ см.}^{-1}$$

— это взяли из результатов предыдущей таблицы. Теперь расстояние между π- и σ-линиями рассчитаем как разность максимального $\Delta\omega$ для π-линии и минимального $\Delta\omega$ для σ-линии:

$$\Delta k = \frac{3\omega_L}{4 \cdot c} \approx 6,593 \cdot 10^{-1} \text{ см.}^{-1}.$$

№ 6:

▷ **Задание:**

Определить для ионов He^+ число компонент тонкой структуры и интервал (в см.$^{-1}$ и длинах волн) между крайними компонентами головной линии серии Пашена.

▷ **Решение:**

Гелий является водородоподобным атомом, $z = 2$, тогда для него

$$E = -\frac{\hbar R z^2}{n^2} \cdot \left[1 + \frac{\alpha^2 z^2}{n^2} \cdot \left(\frac{n}{j + 1/2} - \frac{3}{4}\right)\right],$$

головная линия серии Пашена $(n = 3) \to (n = 4)$, у нас есть условие, что $\Delta\ell = \pm1,\ \Delta j = 0, \pm1,\ \Delta s_z = 0$, можно для двух состояний выписать все возможные значения

$n=3$		$n=4$	
ℓ	J	ℓ	J
0	$1/2$	0	$1/2$
1	$1/2,\ 3/2$	1	$1/2,\ 3/2$
2	$3/2,\ 5/2$	2	$3/2,\ 5/2$
		3	$5/2,\ 7/2$

вычисляем изменение энергии между крайними компонентами, получается $\Delta E = 1,3 \cdot 10^{-16}$ эрг..

$j_{\text{кон.}}$	$j_{\text{нач.}}$	$\Delta E/\hbar R\alpha^2 z^4$
0,5	0.5	$-2.14120370370370 \cdot 10^{-2}$
0.5	1.5	$-2.89351851851852 \cdot 10^{-3}$
0.5	2.5	$3.27932098765432 \cdot 10^{-3}$
1.5	0.5	$-2.92245370370370 \cdot 10^{-2}$
1.5	1.5	$-1.07060185185185 \cdot 10^{-2}$
1.5	2.5	$-4.53317901234568 \cdot 10^{-3}$
2.5	0.5	$-3.18287037037037 \cdot 10^{-2}$
2.5	1.5	$-1.33101851851852 \cdot 10^{-2}$
2.5	2.5	$-7.13734567901235 \cdot 10^{-3}$
3.5	0.5	$-3.31307870370370 \cdot 10^{-2}$
3.5	1.5	$-1.46122685185185 \cdot 10^{-2}$
3.5	2.5	$-8.43942901234568 \cdot 10^{-3}$

те, которые реально могут быть