

Документ подписан простой электронной подписью

Информация о владельце:

ФИО: Локтионова Оксана Геннадьевна

Должность: проректор по учебной работе

Дата подписания: 14.09.2021 16:04:49

Уникальный программный ключ:

0b817ca911e6668abb13a5d426d39e5f1c11eabbf73e943df4a4851fda56d089

МИНОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИИ

Федеральное государственное бюджетное

образовательное

учреждение высшего образования

«Юго-Западный государственный университет»
(ЮЗГУ)

УТВЕРЖДАЮ

Проректор по учебной работе



« 15 » 09



О.Г. Локтионова

2021 г.

Кафедра нанотехнологий, микроэлектроники,
общей и прикладной физики

Квантовая химия

Методические указания к выполнению практических работ для студентов направления подготовки 04.03.01 «Химия».

Курск 2021

УДК 531

Составитель: В.В. Сучилкин.

Рецензент

Кандидат физико-математических наук Пауков В.М.

Квантовая химия : Методические указания к выполнению практических работ для студентов направления подготовки 04.03.01 «Химия». / Юго-Зап. гос. ун-т; сост.: В.В. Сучилкин. Курск, 2021. 41 с.: ил. 6.

Излагаются методические рекомендации по выполнению практических работ, способствующие развитию индивидуального творческого мышления у студентов; активизации учебного процесса на протяжении всего периода изучения дисциплины; организация самостоятельной и индивидуальной работы.

Методические указания соответствуют требованиям Федерального государственного образовательного стандарта высшего профессионального образования и учебному плану направления подготовки 04.03.01 степень (квалификация) – бакалавр. Предназначены для студентов всех форм обучения.

Текст печатается в авторской редакции

Подписано в печать . Формат 60 x 84 1/16.
Усл. печ. л. . Уч.-изд. л. . Тираж экз. Заказ .
Бесплатно.

Юго-Западный государственный университет.
305040 Курск, ул. 50 лет Октября, 94.

1. ВОЛНОВЫЕ СВОЙСТВА МИКРОЧАСТИЦ

Основные формулы

- Формула де Бройля, выражающая связь длины волн с импульсом p движущейся частицы, для двух случаев:

а) в классическом приближении ($v \ll c$; $p = m_0 v$)

$$\lambda = 2\pi\hbar/p$$

б) в релятивистском случае (скорость u частицы сравнима со

скоростью c света в вакууме; $p = m v^2 = m_0 v / \sqrt{1 - v^2 / c^2}$

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{m_0 v} \sqrt{1 - v^2 / c^2}$$

- Связь длины волны де Бройля с кинетической энергией T частицы:

а) в классическом приближении $\lambda = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2m_0 T}}$;

б) в релятивистском случае $\lambda = \frac{2\pi\hbar c}{\sqrt{T(T + 2E_0)}}$, где E_0 —

энергия покоя частицы ($E_0 = m_0 c^2$).

- Фазовая скорость волн де Бройля

$$v = \omega/k$$

где ω — круговая частота; k — волновое число ($k = 2\pi/\lambda$).

- Групповая скорость волн де Бройля

$$u = \frac{d\omega}{dk}.$$

- Соотношения де Бройля:

$$E = \hbar\omega, p = \hbar k,$$

где E — энергия движущейся частицы; p — импульс частицы; k — волновой вектор;

$$|k| = k = 2\pi / \lambda; \hbar - \text{постоянная Планка } (\hbar = h/(2\pi) = 1,05 \times 10^{-34}$$

Дж.с.

• Соотношения неопределенностей:

а) для координаты и импульса частицы $\Delta p_x \Delta x \geq \hbar$ где Δp_x — неопределенность проекции импульса частицы на ось x ; Δx — неопределенность ее координаты;

б) для энергии и времени $\Delta E \Delta t \geq \hbar$, где ΔE — неопределенность энергии данного квантового состояния; Δt — время пребывания системы в этом состоянии.

Вопросы и задачи

Волны де Бройля

1.1. Определить длину волны де Бройля λ характеризующую волновые свойства электрона, если его скорость $v = 1$ Мм/с. Сделать такой же подсчет для протона.

1.2. Электрон движется со скоростью $v = 200$ Мм/с. Определить длину волны де Бройля λ , учитывая изменение массы электрона в зависимости от скорости.

1.3. Какую ускоряющую разность потенциалов U должен пройти электрон, чтобы длина волны де Бройля λ была равна $0,1$ нм?

1.4. Определить длину волны де Бройля λ электрона, если его кинетическая энергия $T = 1$ кэВ.

1.5. Найти длину волны де Бройля λ протона, прошедшего ускоряющую разность потенциалов U : 1) 1 кВ; 2) 1 МВ.

1.6. Найти длину волны де Бройля λ для электрона, движущегося по круговой орбите атома водорода, находящегося в основном состоянии.

1.7. Определить длину волны де Бройля λ , электрона, находящегося на второй орбите атома водорода.

1.8. С какой скоростью движется электрон, если длина волны де Бройля λ электрона равна его комптоновской длине волны λ_c .

1.9. Определить длину волны де Бройля λ электронов, бомбардирующих антикатод рентгеновской трубки, если

граница сплошного рентгеновского спектра приходится на длину волны $\lambda = 3$ нм.

1.10. Электрон движется по окружности радиусом $r = 0,5$ см в однородном магнитном поле с индукцией $B = 8$ мТл. Определить длину волны де Бройля λ электрона.

1.11. На грань некоторого кристалла под углом $\alpha = 60^\circ$ к ее поверхности падает параллельный пучок электронов, движущихся с одинаковой скоростью. Определить скорость v электронов, если они испытывают интерференционное отражение первого порядка. Расстояние d между атомными плоскостями кристаллов равно $0,2$ нм.

1.12. Параллельный пучок электронов, движущихся с одинаковой скоростью $v = 1$ Мм/с, падает нормально на диафрагму с длиной щелью шириной $a = 1$ мкм. Проходя через щель, электроны рассеиваются и образуют дифракционную картину на экране, расположенном на расстоянии $l = 50$ см от щели и параллельном плоскости диафрагмы. Определить линейное расстояние x между первыми дифракционными минимумами.

1.13. Узкий пучок электронов, прошедших ускоряющую разность потенциалов $U = 30$ кВ, падает нормально на тонкий листок золота, проходит через него и рассеивается. На фотопластинке, расположенной за листком на расстоянии $l = 20$ см от него, получена дифракционная картина, состоящая из круглого центрального пятна и ряда концентрических окружностей. Радиус первой окружности $l = 3,4$ мм. Определить: 1) угол θ отражения электронов от микрокристаллов золота, соответствующий первой окружности (угол измеряется от поверхности кристалла); 2) длину волны де Бройля λ электронов; 3) постоянную a кристаллической решетки золота.

Фазовая и групповая скорости.

1.14. Прибор зарегистрировал скорость распространения электромагнитного импульса. Какую скорость зарегистрировал

прибор — фазовую или групповую?

1.15. Можно ли измерить фазовую скорость?

1.16. Волновой «пакет» образован двумя плоскими монохроматическими волнами:

$$\xi_1(x, t) = \cos(1002t - 3x); \quad \xi_2(x, t) = \cos(1003t - 3,01x)$$

Определить фазовые скорости v_1 и v_2 каждой волны и групповую скорость u волнового «пакета».

1.17. Известно, что фазовая скорость $v = \omega/k$. Найти выражения фазовой скорости волн де Бройля в нерелятивистском и релятивистском случаях.

1.18. Фазовая скорость волн де Бройля больше скорости света в вакууме (в релятивистском случае). Не противоречит ли это постулатам теории относительности?

1.19. Зная общее выражение групповой скорости, найти групповую скорость u волн де Бройля в нерелятивистском и релятивистском случаях.

1.20. Написать закон дисперсии (т.е. формулу, выражающую зависимость фазовой скорости от длины волны) волн де Бройля в нерелятивистском и релятивистском случаях.

1.21. Будут ли расплываться в вакууме волновые пакеты, образованные из волн: 1) электромагнитных; 2) де Бройля?

Соотношение неопределенностей

1.22. Определить неточность Δx в определении координаты электрона, движущегося в атоме водорода со скоростью $v = 1,5 \times 10^6$ м/с, если допускаемая неточность Δv в определении скорости составляет 10 % от ее величины. Сравнить полученную неточность с диаметром d атома водорода, вычисленным по теории Бора для основного состояния, и указать, применимо ли понятие траектории в данном случае.

1.23. Электрон с кинетической энергией $T = 15$ эВ находится в металлической пылинке диаметром $d = 1$ мкм. Оценить относительную неточность Δv , с которой может быть определена скорость электрона.

1.24. Во сколько раз дебройлевская длина волны λ частицы меньше неопределенности Δx ее координаты, которая соответствует относительной неопределенности импульса в 1 %?

1.25. Предполагая, что неопределенность координаты движущейся частицы равна дебройлевской длине волны, определить относительную неточность $\Delta p/p$ импульса этой частицы.

1.26. Используя соотношение неопределенностей $\Delta x \Delta p_x \geq \hbar$ найти выражение, позволяющее оценить минимальную энергию E электрона, находящегося в одномерном потенциальном ящике шириной l .

1.27. Используя соотношение неопределенностей $\Delta x \Delta p \geq \hbar$ оценить низший энергетический уровень электрона в атоме водорода. Принять линейные размеры атома $l \approx 0,1$ нм.

1.28. Приняв, что минимальная энергия E нуклона в ядре равна 10 МэВ, оценить, исходя из соотношения неопределенностей, линейные размеры ядра.

1.29. Показать, используя соотношение неопределенностей, что в ядре не могут находиться электроны. Линейные размеры ядра принять равными 5 фм.

1.30. Рассмотрим следующий мысленный эксперимент. Пусть моноэнергетический пучок электронов ($T = 10$ эВ) падает на щель шириной a . Можно считать, что если электрон прошел через щель, то его координата известна с неточностью $\Delta x = a$. Оценить получаемую при этом относительную неточность в определении импульса $\Delta p/p$ электрона в двух случаях: 1) $a = 10$ нм; 2) $a = 0,1$ нм.

1.31. Пылинки массой $m = 10^{-12}$ г взвешены в воздухе и находятся в тепловом равновесии. Можно ли установить, наблюдая за движением пылинок, отклонение от законов классической механики? Принять, что воздух находится при нормальных условиях, пылинки имеют сферическую форму. Плотность вещества, из которого состоят пылинки, равна 2×10^3 кг/м³.

1.32. Какой смысл вкладывается в соотношение неопределенностей $\Delta E \Delta t \geq \hbar$

1.33. Используя соотношение неопределенности $\Delta E \Delta t \geq \hbar$ оценить ширину Γ энергетического уровня в атоме водорода, находящегося: 1) в основном состоянии; 2) в возбужденном состоянии (время τ жизни атома в возбужденном состоянии равно 10^{-8} с).

1.34. Оценить относительную ширину $\Delta\omega/\omega$ спектральной линии, если известны время жизни атома в возбужденном состоянии ($\tau \approx 10^{-8}$ с) и длина волны излучаемого фотона ($\lambda = 0,6$ мкм).

1.35. В потенциальном бесконечно глубоком одномерном ящике энергия E электрона точно определена. Значит, точно определено и значение квадрата импульса электрона ($p^2 = 2mE$). С другой стороны, электрон заперт в ограниченной области с линейными размерами l . Не противоречит ли это соотношению неопределенностей?

2. ПРОСТЕЙШИЕ СЛУЧАИ ДВИЖЕНИЯ

МИКРОЧАСТИЦ

Основные формулы

- Одномерное временное уравнение Шредингера

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2}$$

где i — мнимая единица ($\sqrt{-1}$); m — масса частицы; $\Psi(x, t)$ — волновая функция, описывающая состояние частицы.

Волновая функция, описывающая одномерное движение свободной частицы,

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

где A — амплитуда волны де Бройля; p — импульс частицы; E — энергия частицы.

Одномерное уравнение Шредингера для стационарных состояний

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

где E — полная энергия частицы; $U(x)$ - потенциальная энергия;

$\psi(x)$ — координатная (или амплитудная) часть волновой функции

Для случая трех измерений $\psi(x, y, z)$ уравнение Шредингера

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U) \psi = 0$$

или в операторной форме

$$\Delta \psi + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U) \psi = 0, \quad \text{где} \quad \Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

оператор Лапласа

При решении уравнения Шредингера следует иметь в виду стандартные условия которым должна удовлетворять волновая функция: конечность (во всем пространстве), однозначность, непрерывность самой ψ - функции и ее первой производной.

• Вероятность dW обнаружить частицу в интервале от x до $x + dx$ (в одномерном случае) выражается формулой

$$dW = |\psi(x)|^2 dx$$

где $|\psi(x)|^2$ — плотность вероятности.

Вероятность W обнаружить частицу в интервале от x_1 до x_2 находится интегрированием dW в указанных пределах

$$W = \int_{x_1}^{x_2} |\psi(x)|^2 dx$$

• Собственное значение энергии E_n частицы, находящейся на

n -м энергетическом уровне в бесконечно глубоком одномерном прямоугольном потенциальном ящике, определяется формулой

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ml^2} n^2 \quad (n = 1, 2, 3, \dots)$$

где l — ширина потенциального ящика.

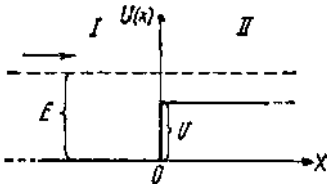
Соответствующая этой энергии собственная волновая функция имеет вид

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{l}} \sin \frac{\pi n}{l} x.$$

• Коэффициент преломления n воли де Бройля на границе низкого потенциального барьера бесконечной ширины

$n = \frac{\lambda_1}{\lambda_2} = \frac{k_2}{k_1}$ где λ_1 и λ_2 — длины волн де Бройля в областях **I** и **II**

(частица движется из области **I** во **II**); k_1 — k_2 — соответствующие значения волновых чисел.



• Коэффициенты отражения ρ и пропускания τ волн де Бройля через низкий ($U < E$) потенциальный барьер бесконечной ширины

$$\rho = \left| \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right|^2$$

$$\tau = \frac{4k_1 k_2}{(k_1 + k_2)^2}$$

где k_1 и k_2 — волновые числа волн де Бройля в областях **I** и **II**.

• Коэффициент прозрачности D прямоугольного потенциального барьера конечной ширины

$D \approx \exp \left[-\frac{2}{\hbar} \sqrt{2m(U - E)d} \right]$, где U — высота потенциального барьера; E — энергия частицы; d — ширина барьера.

Вопросы и задачи

Уравнение Шредингера

2.1. Написать уравнение Шредингера для электрона, находящегося в водородоподобном атоме.

2.2. Написать уравнение Шредингера для линейного гармонического осциллятора. Учесть, что сила, возвращающая частицу в положение равновесия, $f = -\beta x$ (где β — коэффициент пропорциональности, x —смещение).

2.3. Временная часть уравнения Шредингера имеет вид $i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = E\Psi$ Найти решение уравнения.

2.4. Написать уравнение Шредингера для свободного электрона, движущегося в положительном направлении оси X со скоростью v . Найти решение этого уравнения.

2.5. Почему при физической интерпретации волновой функции говорят не о самой ψ -функции, а о квадрате ее модуля ψ^2 ?

2.6. Чем обусловлено требование конечности ψ -функции?

2.7. Уравнение Шредингера для стационарных состояний имеет

вид $\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(U - E)\psi = 0$ Обосновать, исходя из этого

уравнения, требования, предъявляемые к волновой функции,— ее непрерывность и непрерывность первой производной от волновой функции.

2.8. Может ли $[\psi(x)]^2$ быть больше единицы?

2.9. Показать, что для ψ -функции выполняется равенство $[\psi(x)]^2 = \psi(x)\psi^*(x)$, где $\psi^*(x)$ означает функцию, комплексно сопряженную $\psi(x)$.

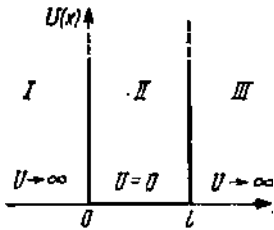
2.10. Доказать, что если ψ -функция циклически зависит от времени

$\left[\text{т. е. } \Psi(x, t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}Et\right)\psi(x) \right]$, то плотность вероятности
 есть функция только координаты.

Одномерный бесконечно глубокий потенциальный ящик

2.11. Электрон находится в бесконечно глубоком прямоугольном одномерном потенциальном ящике шириной l . Написать уравнение Шредингера и его решение (в тригонометрической форме) для области II ($0 < x < l$).

2.12. Известна волновая функция, описывающая состояние электрона в потенциальном ящике шириной l : $\psi(x) = C_1 \sin kx + C_2 \cos kx$. Используя граничные условия $\psi(0)=0$ и $\psi(l) = 0$ определить коэффициент C_2 и возможные значения волнового вектора k ,



при котором существуют нетривиальные решения.

2.13. Электрону в потенциальном ящике шириной l отвечает волновое число $k = \pi n/l$ ($n=1, 2, 3, \dots$). Используя связь энергии E электрона с волновым числом k , получить выражение для собственных значений энергии E_n .

2.14. Частица находится в потенциальном ящике. Найти отношение разности соседних энергетических уровней $\Delta E_{n+1, n}$ к энергии E_n частицы в трех случаях: 1) $n = 3$; 2) $n = 10$; 3) $n \rightarrow \infty$

Пояснить полученные результаты.

2.15. Электрон находится в потенциальном ящике шириной $l = 0,5$ им. Определить наименьшую разность ΔE энергетических уровней электрона. Ответ выразить в электрон-вольтах.

2.16. Собственная функция, описывающая состояние частицы в потенциальном ящике, имеет вид $\psi_n(x) = C \sin \frac{\pi n}{l} x$

Используя условия нормировки, определить постоянную C .

2.17. Решение уравнения Шредингера для бесконечно глубокого одномерного прямоугольного потенциального ящика можно записать в виде $\psi(x) = C_1 e^{ikx} + C_2 e^{-ikx}$, где $k = \sqrt{2mE} / \hbar$. Используя граничные условия и нормировку ψ -функции, определить:

1) коэффициенты C_1 и C_2 ; 2) собственные значения энергии E_n . Найти выражение для собственной нормированной ψ -функции.

2.18. Изобразить на графике вид первых трех собственных функций $\psi_n(x)$, описывающих состояние электрона в потенциальном ящике шириной l , а также вид $[\psi_n(x)]^2$. Установить соответствие между числом N узлов волновой функции (т. е. числом точек, где волновая функция обращается в нуль в интервале $0 < x < l$) и квантовым числом n . Функцию считать нормированной на единицу.

2.19. Частица в потенциальном ящике шириной l находится в возбужденном состоянии ($n = 2$). Определить, в каких точках интервала ($0 < x < l$) плотность вероятности $[\psi_2(x)]^2$ нахождения частицы максимальна и минимальна.

2.20. Электрон находится в потенциальном ящике шириной l . В каких точках в интервале ($0 < x < l$) плотность вероятности нахождения электрона на первом и втором энергетических уровнях одинакова? Вычислить плотность вероятности для этих точек. Решение пояснить графически.

2.21. Частица в потенциальном ящике находится в основном состоянии. Какова вероятность W нахождения частицы: 1) в средней трети ящика; 2) в крайней трети ящика?

2.22. В одномерном потенциальном ящике шириной l находится электрон. Вычислить вероятность W нахождения электрона на первом энергетическом уровне в интервале $1/4$, равноудаленном от стенок ящика.

2.23. Частица в потенциальном ящике шириной l находится в низшем возбужденном состоянии. Определить вероятность W нахождения частицы в интервале $l/4$, равноудаленном от стенок ящика.

2.24. Вычислить отношение вероятностей W_1/W_2 нахождения электрона на первом и втором энергетических уровнях в интервале $l/4$, равноудаленном от стенок одномерной потенциальной ямы шириной l .

2.25. Показать, что собственные функции $\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{l}} \sin \frac{\pi n}{l} x$ и $\psi_m(x) = \sqrt{\frac{2}{l}} \sin \frac{\pi m}{l} x$, описывающие состояние частицы в потенциальном ящике, удовлетворяют условию ортогональности, т. е.

$$\int_0^l \psi_n(x) \psi_m(x) dx = \begin{cases} 1 & \text{при } n = m \\ 0 & \text{при } n \neq m \end{cases}$$

2.26. Электрон находится в одномерном потенциальном ящике шириной l . Определить среднее значение координаты $\langle x \rangle$ электрона ($0 < x < l$).

2.27. Используя выражение энергии $E_n = \pi^2 \hbar^2 n^2 / (ml^2)$ частицы, находящейся в потенциальном ящике, получить приближенное выражение энергии: 1) гармонического осциллятора; 2) водородоподобного атома. Сравнить полученные результаты с истинными значениями энергий.

Двух- и трехмерный потенциальный ящик

2.28. Считая, что нуклоны в ядре находятся в трехмерном потенциальном ящике кубической нормы с линейными размерами $l = 10$ фм, оценить низший энергетический уровень нуклонов в ядре.

2.29. Определить из условия нормировки коэффициент C собственной ψ -функции $\psi_{n_1 n_2}(x, y) = C \sin \frac{\pi n_1}{l_1} x \cdot \sin \frac{\pi n_2}{l_2} y$,

описывающей состояние электрона в двухмерном бесконечно глубоком потенциальном ящике со сторонами l_1 и l_2 -

2.30. Электрон находится в основном состоянии в двухмерном квадратном бесконечно глубоком потенциальном ящике со стороной l . Определить вероятность W нахождения электрона в области, ограниченной квадратом, который равноудален от стенок ящика и площадь которого составляет $1/4$ площади ящика.

2.31. Определить из условия нормировки коэффициент собственной ψ -функции

$$\psi_{n_1 n_2 n_3}(x, y, z) = C \sin \frac{\pi n_1}{l_1} x \sin \frac{\pi n_2}{l_2} y \sin \frac{\pi n_3}{l_3} z, \quad \text{описывающей}$$

состояние электрона в трехмерном потенциальном бесконечно глубоком ящике со сторонами l_1, l_2, l_3 ,

Низкий потенциальный барьер бесконечной ширины

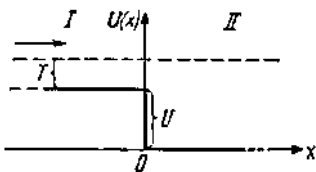
2.32. Написать уравнение Шредингера для электрона с энергией E , движущегося в положительном направлении оси X для областей **I** и **II**, если на границе этих областей имеется низкий потенциальный барьер высотой U .

2.33. Написать решения уравнений Шредингера (см. предыдущую задачу) для областей **I** и **II**. Какой смысл имеют коэффициенты A_1 и B_1 для $\psi_I(x)$ и A_2 и B_2 для $\psi_{II}(x)$? Чему равен коэффициент B_2 ?

2.34. Зная решение уравнений Шредингера для областей **I** и **II** потенциального барьера $\psi_I(x) = A_1 e^{ik_1 x} + B_1 e^{-ik_1 x}$, $\psi_{II}(x) = A_2 e^{ik_2 x}$ определить из условий непрерывности ψ -функций и их первых производных на границе барьера отношение амплитуд вероятности B_1/A_1 и A_2/A_1 .

2.35. Зная отношение амплитуд

вероятности $\frac{B_1}{A_1} = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}$ Для волны,



отраженной от барьера, и $\frac{A_2}{A_1} = \frac{2k_1}{k_1 + k_2}$ для проходящей волны,

найти выражение для коэффициента отражения ρ и коэффициента прохождения τ .

2.36. Считая выражение для коэффициента отражения ρ от потенциального барьера и коэффициента прохождения τ известными, показать, что $\rho + \tau = 1$.

2.37. Электрон с энергией $E = 25$ эВ встречает на своем пути потенциальный барьер высотой $U = 9$ эВ. Определить коэффициент преломления n волн де Бройля на границе барьера.

2.38. Определить коэффициент преломления n волн де Бройля для протонов на границе потенциальной ступени. Кинетическая энергия протонов равна 16 эВ, а высота U потенциальной ступени равна 9 эВ.

2.39. Электрон обладает энергией $E = 10$ эВ. Определить, во сколько раз изменятся его скорость v , длина волны де Бройля λ и фазовая скорость при прохождении через потенциальный барьер высотой $U = 6$ эВ.

2.40. Протон с энергией $E = 1$ МэВ изменил при прохождении потенциального барьера дебройлевскую длину волны на 1 %. Определить высоту U потенциального барьера.

2.41. На пути электрона с дебройлевской длиной волны $\lambda_1 = 0,1$ нм находится потенциальный барьер высотой $U = 120$ эВ. Определить длину волны де Бройля λ_2 после прохождения барьера.

2.42. Электрон с энергией $E = 100$ эВ попадает на потенциальный барьер высотой $U = 64$ эВ. Определить вероятность W того, что электрон отразится от барьера.

2.43. Найти приближенное выражение коэффициента отражения ρ от очень низкого потенциального барьера ($U \ll E$).

2.44. Коэффициент отражения ρ протона от потенциального барьера равен $2,5 \times 10^{-5}$. Определить, какой процент составляет высота U барьера от кинетической энергии T падающих на барьер протонов.

2.1. Вывести формулу, связывающую коэффициент преломления n волн де Бройля на границе низкого потенциального барьера и коэффициент отражения ρ от него.

2.2. Определить показатель преломления n волн де Бройля при прохождении частицей потенциального барьера с коэффициентом отражения $\rho = 0,5$.

2.47. При каком отношении высоты U потенциального барьера и энергии E электрона, падающего на барьер, коэффициент отражения $\rho = 0,5$?

2.48. Электрон с энергией $E = 10$ эВ падает на потенциальный барьер. Определить высоту U барьера, при которой показатель преломления n волн де Бройля и коэффициент отражения ρ численно совпадают.

2.49. Кинетическая энергия T электрона в два раза превышает высоту U потенциального барьера. Определить коэффициент отражения ρ и коэффициент прохождения τ электронов на границе барьера.

2.50. Коэффициент прохождения τ электронов через низкий потенциальный барьер равен коэффициенту отражения ρ . Определить, во сколько раз кинетическая энергия T электронов больше высоты U потенциального барьера.

2.51. Вывести формулу, связывающую коэффициент прохождения τ электронов через потенциальный барьер и коэффициент преломления n волн де Бройля.

2.52. Коэффициент прохождения τ протонов через потенциальный барьер равен $0,8$. Определить показатель преломления n волн де Бройля на границе барьера.

2.53. Электрон с кинетической энергией T движется в положительном направлении оси X . Найти выражение для коэффициента отражения ρ и коэффициента прохождения τ на границе потенциальной ступени высотой U (рис. 2.5).

2.54. Найти приближенное выражение для коэффициента прохождения τ через низкий потенциальный барьер при условии,

что кинетическая энергия T частицы в области II много меньше высоты U потенциального барьера.

2.55. Вычислить коэффициент прохождения τ электрона с энергией $E = 100$ эВ через потенциальный барьер высотой $U = 99,75$ эВ.

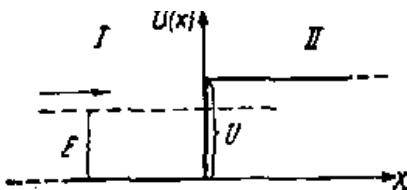
2.56. Показать на частном примере низкого потенциального барьера сохранение полного числа частиц, т. е. что плотность потока N электронов, падающих на барьер, равна сумме плотности потока N_p электронов, отраженных от барьера, и плотности потока N_t электронов, прошедших через барьер.

2.57. На низкий потенциальный барьер направлен моноэнергетический поток электронов с плотностью потока энергии $J_1 = 10 \text{ Вт/м}^2$. Определить плотность потока энергии J_2 а электронов, прошедших барьер, если высота его $U = 0,91$ эВ и энергия E электронов в падающем потоке равна 1 эВ.

2.58. Моноэнергетический поток электронов падает на низкий потенциальный барьер. Коэффициент прохождения $\tau = 0,9$. Определить отношение J_2/J_1 плотности потока энергии волны, прошедшей барьер, к плотности потока энергии волны, падающей на барьер.

2.59. На низкий потенциальный барьер падает моноэнергетический поток электронов. Концентрация n_0 электронов в падающем потоке равна 10^9 мм^{-3} , а их энергия $E = 100$ эВ. Определить давление, которое испытывает барьер, если его высота $U = 9,7$ эВ.

Высокий потенциальный барьер бесконечной ширины



2.60. Написать уравнение Шредингера и найти его решение для электрона, движущегося в положительном направлении оси x для областей I и II , если

на границе этих областей имеется потенциальный барьер высотой U .

2.61. Для областей I и II высокого потенциального барьера ψ -функции имеют вид $\psi_I = A_1 e^{ik_1 x} + B_1 e^{-k_1 x}$ и $\psi_{II}(x) = A_2 e^{-kx}$. Используя непрерывность ψ -функций и их первых производных на границе барьера, найти отношение амплитуд A_2/A_1 .

2.62. Написать выражение для $\psi_{II}(x)$ в области II высокого потенциального барьера, если ψ -функция нормирована так, что $A_1 = 1$.

2.63. Амплитуда A_2 а волны в области II высокого потенциального барьера равна $2k_1/(k_1 + ik)(k_1 = \sqrt{2mE}/\hbar, k = \sqrt{2m(U - E)}/\hbar)$. Установить выражение для плотности вероятности нахождения частицы в области II ($x > 0$), если энергия частицы равна E , а высота потенциального барьера равна U .

2.64. Используя выражение для коэффициента отражения от низкой ступени

$$\rho = \left| \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right|^2, \text{ где } k_1 \text{ и } k_2 \text{ — волновые числа, найти выражение}$$

коэффициента отражения от высокой ступени ($T < U$).

2.65. Показать, что имеет место полное отражение электронов от высокого потенциального барьера, если коэффициент

отражения может быть записан в виде $\rho = \left| \frac{k_1 - ik}{k_1 + ik} \right|^2$

2.66. Определить плотность, вероятности $|\psi_{II}(0)|^2$ нахождения электрона в области II высокого потенциального барьера в точке $x = 0$, если энергия электрона равна E , высота потенциального барьера равна U и ψ -функция нормирована так, что $A_1 = 1$.

3 СТРОЕНИЕ АТОМА

Основные формулы

- Уравнение Шредингера для стационарных состояний в сферических координатах

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \left[\frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial \psi}{\partial \vartheta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} \right] + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U) \psi = 0$$

где $\psi = \psi(r, \vartheta, \varphi)$ — волновая функция; E — полная энергия частицы; U — потенциальная энергия частицы (являющаяся функцией координат).

- В атоме водорода (или водородоподобном ионе) потенциальная энергия $U(r)$ имеет вид

$$U(r) = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r},$$

где Z — зарядовое число; e — элементарный заряд; ϵ_0 — электрическая постоянная.

- Собственное значение энергии E_n электрона в атоме водорода

$$E_n = -\frac{Z^2 e^4 m}{32 \pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2 n^2}$$

где \hbar — постоянная Планка, n — главное квантовое число ($n = 1, 2, 3, \dots$)

- Символическая запись ψ -функции, описывающей состояние электрона в атоме водорода,

$$\psi_{n,l,m}(r, \vartheta, \varphi),$$

где n, l, m — квантовые числа: главное, орбитальное, магнитное.

Вероятность dW того, что электрон находится в области, ограниченной элементом объема dV , взятого в окрестности точки с координатами r, ϑ, φ ,

$$dW = |\psi_{n,l,m}(r, \vartheta, \varphi)|^2 dV,$$

где $dV = r^2 \sin \vartheta d\vartheta d\varphi dr$ (в сферических координатах).

В s-состоянии ($l = 0, m = 0$) волновая функция сферически-симметричная (т. е. не зависит от углов ϑ и φ). Нормированные собственные ψ -функции, отвечающие s-состоянию (основному) и 2s-состоянию,

$$\psi_{100}(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-r/a} \quad \text{и} \quad \psi_{200}(r) = \frac{1}{4\sqrt{2\pi a^3}} \left(2 - \frac{r}{a}\right) e^{-r/(2a)}$$

или в атомных единицах

$$\psi_{100}(\rho) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-\rho} \quad \text{и} \quad \psi_{200}(\rho) = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} (2 - \rho) e^{-\rho/2}$$

где в качестве единицы длины принят боровский радиус

$$a = \frac{4\pi\varepsilon_0 \hbar^2}{e^2 m} = 52,9 \text{ нм} . \quad \text{При таком выборе единицы длины}$$

расстояние от ядра $\rho = r/a$ будет выражаться в безразмерных единицах длины, называемых атомными единицами.

Вероятность dW найти электрон в атоме водорода, находящемся в s-состоянии, в интервале $(r, r+dr)$ одинакова по всем направлениям и определяется формулой

$$dW = [\psi_{n,0,0}(r)]^2 4\pi r^2 dr$$

- Орбитальный момент импульса и магнитный момент электрона:

$$\mathfrak{S}_l = \hbar \sqrt{l(l+1)}, \quad \mu_l = \mu_b \sqrt{l(l+1)},$$

где l — орбитальное квантовое число, которое может принимать значения $0, 1, 2, \dots, (n-1)$; μ_b — магнетон Бора:

$$\mu_b = \frac{e \hbar}{2m} = 0,927 \cdot 10^{-23} \text{ Дж} / \text{Тл}$$

- Проекция орбитального момента импульса и магнитного момента на направление внешнего магнитного поля (совпадающего с осью Z):

$$\mathfrak{S}_{l,z} = \hbar m_l, \quad \mu_{l,z} = \mu_b m_l$$

- Гиромагнитное отношение для орбитальных магнитного и механического моментов

$$\frac{\mu_l}{\mathfrak{I}_l} = \frac{\mu_{l,z}}{\mathfrak{I}_{l,z}} = \frac{\mu_B}{\hbar} = \frac{1}{2} \frac{e}{m}.$$

- Спин и спиновый магнитный момент электрона:

$$\mathfrak{I}_s = \hbar \sqrt{s(s+1)}, \quad \mu_s = 2\mu_B \sqrt{s(s+1)},$$

где s —спиновое квантовое число ($s = 1/2$)

- Проекция спиновых момента импульса и магнитного момента на направление внешнего магнитного поля (совпадающего с осью Z):

$$\mathfrak{I}_{s,z} = \hbar m_s, \quad \mu_{s,z} = 2\mu_B m_s$$

где m_s — спиновое магнитное квантовое число ($m_s = -1/2, +1/2$)
Гиромагнитное отношение для спиновых магнитного и механического моментов

$$\frac{\mu_s}{\mathfrak{I}_s} = \frac{\mu_{s,z}}{\mathfrak{I}_{s,z}} = 2 \frac{\mu_B}{\hbar} = \frac{e}{m}$$

- Распределение электронов по состояниям в атоме записывается с помощью спектроскопических символов:

Значение побочного квантового числа	0	1	2	3	4	5	6	7
Спектроскопиче- ский символ	<i>s</i>	<i>p</i>	<i>d</i>	<i>f</i>	<i>g</i>	<i>h</i>	<i>i</i>	<i>k</i>

Электронная конфигурация записывается следующим образом:

число, стоящее слева перед спектроскопическим символом, означает главное квантовое число n , а сам спектроскопический

символ отвечает тому или иному значению орбитального квантового числа l (например, обозначению $2p$ отвечает электрон с $n = 2$ и $l = 1$; $2p^2$ означает, что таких электронов в атоме 2, и т. д.).

- Принцип Паули. В атоме не может находиться два (и более) электрона, характеризуемых одинаковым набором четырех квантовых чисел: n, l, m_l, m_s

- Полный момент импульса электрона

$$\mathfrak{S}_j = \hbar \sqrt{j(j+1)},$$

где j — внутреннее квантовое число ($j = l + 1/2, l - 1/2$).

- Полный орбитальный момент атома

$$\mathfrak{S}_L = \hbar \sqrt{L(L+1)},$$

где L — полное орбитальное квантовое число.

- Полный спиновый момент атома

$$\mathfrak{S}_S = \hbar \sqrt{S(S+1)},$$

где S — полное спиновое квантовое число.

- Полный момент импульса атома

$$\mathfrak{S}_J = \hbar \sqrt{J(J+1)},$$

где J — полное внутреннее квантовое число.

- Символическое обозначение состояния атома (спектральный терм)

$$^{2S+1}L_J,$$

где $2S+1$ — мультиплетность. Вместо полного орбитального квантового числа L пишут символ в соответствии с таблицей:

Значение	0	1	2	3	4	5
Символ	S	P	D	F	G	H

Пример. Терм $^2P_{3/2}$ расшифровывается следующим образом: мультиплетность $2S + 1 = 2$; следовательно, $S = 1/2$, символу P соответствует $L = 1$, а $J=3/2$.

- Магнитный момент атома

$$\mu_J = g \mu_B \sqrt{J(J+1)}$$

где g — множитель (или фактор) Ланде,

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

- Проекция магнитного момента атома на направление внешнего магнитного поля (совпадающего с осью Z)

$$\mu_{J,z} = g \mu_B m_J$$

где m_J — полное магнитное квантовое число ($m_J = J, J-1, \dots, -J$).

- Сила, действующая на атом в неоднородном магнитном поле,

$$F_z = \frac{\partial B}{\partial z} \mu_{J,z}$$

где $\partial B/\partial z$ — градиент магнитной индукции.

- Частота ларморовой прецессии

$$\omega_L = eB/(2m)$$

где m — масса электрона.

- Энергия атома в магнитном поле

$$E = -\mu_{J,z} B$$

- Величина расщепления спектральной линии при эффекте Зеемана:

а) сложном (аномальном)

$$\Delta\omega = (m''_J g'' - m'_J g') \omega_L$$

где m''_J , m'_J и g'' , g' — магнитные квантовые числа и множители Ланде соответствующих термов;

б) простом (нормальном)

$$\Delta\omega = 0, \pm \omega_L$$

- Правила отбора для квантовых чисел S , L , J и m_S , m_L , m_J :

$$\Delta S = 0; \Delta m_S = 0;$$

$$\Delta L = \pm 1; \Delta m_L = 0, \pm 1$$

$$\Delta J = 0, \pm 1; \Delta m_J = 0, \pm 1$$

Не осуществляются переходы $J = 0 \rightarrow J = 0$, а при $J = 0$ — переходы $m_J = 0 \rightarrow m_J = 0$.

Вопросы и задачи

Атом водорода

3.1. Уравнение Шредингера в сферической системе координат для электрона, находящегося в водородоподобном атоме, имеет вид

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \left\{ \frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial \psi}{\partial \vartheta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{d^2 \psi}{d \varphi^2} \right\} + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E + \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) \psi = 0$$

Показать, что это уравнение разделяется на два, если волновую функцию представить в виде произведения двух функций:

$$\psi(r, \vartheta, \varphi) = R(r)Y(\vartheta, \varphi),$$

где $R(r)$ — радиальная и $Y(\vartheta, \varphi)$ — угловая функции.

3.2. Уравнение для радиальной $R(r)$ функции, описывающей состояние электрона в атоме водорода, имеет вид

$$\frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR}{dr} + \left[\alpha + \frac{2\beta}{r} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R = 0$$

где α , β и l — некоторые параметры. Используя подстановку $\chi(r) = rR(r)$ преобразовать его к виду

$$\frac{d^2 \chi}{dr^2} + \left[\alpha + \frac{2\beta}{r} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] \chi = 0$$

3.3. Уравнение для радиальной функции $\chi(r)$ может быть преобразовано к виду

$$\frac{d^2 \chi}{dr^2} + \left[\alpha + \frac{2\beta}{r} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] \chi(r) = 0$$

где $\alpha = 2mE / \hbar^2$; $\beta = Ze^2 m / (4\pi\epsilon_0 \hbar^2)$; l — целое число. Найти асимптотические решения уравнения при больших числах r .

Указать, какие решения с $E > 0$ или с $E < 0$ приводят к связанным состояниям.

3.4. Найти по данным предыдущей задачи асимптотическое решение уравнения при малых r .

Указание. Считать при малых r члены α и $2\beta/r$ малыми по сравнению с $l(l+1)/r^2$. Применить подстановку $\chi(r) = r^\gamma$.

3.5. Найти решение уравнения для радиальной функции $R(r)$, описывающей основное состояние ($l = 0$), и определить энергию электрона в этом состоянии. Исходное уравнение для радиальной функции может быть записано в виде

$$\frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR}{dr} + \left[\alpha + 2 \frac{\beta}{r} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R = 0,$$

где $\alpha = 2mE / \hbar^2$; $\beta = Ze^2 m / (4\pi\epsilon_0 \hbar^2)$; l — орбитальное квантовое число.

Указание. Применить подстановку $R(r) = e^{-\gamma r}$

3.6. Атом водорода находится в основном состоянии. Собственная волновая функция, описывающая состояние электрона в атоме, имеет вид $\psi(r) = Ce^{-r/a}$, где C — некоторая постоянная. Найти из условия нормировки постоянную C .

3.7. Собственная функция, описывающая основное состояние электрона в атоме водорода, имеет вид $\psi(r) = Ce^{-r/a}$, где $a = 4\pi\epsilon_0 \hbar^2 / (e^2 m)$ (боровский радиус). Определить расстояние r , на котором вероятность нахождения электрона максимальна.

3.8. Электрон в атоме водорода описывается в основном состоянии волновой функцией $\psi(r) = Ce^{-r/a}$. Определить отношение вероятностей ω_1/ω_2 пребывания электрона в сферических слоях толщиной $\Delta r = 0,01 a$ и радиусами $r_1 = 0,5 a$ и $r_2 = 1,5 a$.

3.9. Атом водорода находится в основном состоянии. Вычислить: 1) вероятность ω_1 того, что электрон находится внутри области, ограниченной сферой радиуса, равного боровскому радиусу a ;

2) вероятность ω_2 того, что электрон находится вне этой

области;

3) отношение вероятностей ω_2/ω_1 . Волновую функцию считать известной:

$$\psi_{100}(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-r/a}$$

3.10. Зная, что нормированная собственная волновая функция, описывающая основное состояние электрона в атоме водорода, имеет вид

$$\psi(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-r/a}, \text{ найти среднее расстояние } \langle r \rangle \text{ электрона}$$

от ядра.

3.11. Принято электронное облако (орбиталь) графически изображать контуром, ограничивающим область, в которой вероятность обнаружения электрона составляет 0,9. Вычислить в атомных единицах радиус орбитали для 1s-состояния электрона в атоме водорода. Волновая функция, отвечающая этому состоянию, $\psi_{100}(\rho) = e^{-\rho} / \sqrt{\pi}$ где ρ — расстояние электрона от ядра, выраженное в атомных единицах.

Указание. Получающееся трансцендентное уравнение решить графически.

3.12. Волновая функция, описывающая 2s - состояние электрона в атоме водорода, имеет вид

$$\psi_{200}(\rho) = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} (2 - \rho) e^{-\rho/2}, \text{ где } \rho \text{ — расстояние электрона от}$$

ядра, выраженное в атомных единицах. Определить: 1) расстояние ρ_1 от ядра, на которых вероятность обнаружить электрон имеет максимум; 2) расстояния ρ_2 от ядра, на которых вероятность нахождения электрона равна нулю; 3) построить графики зависимости $[\psi_{200}(\rho)]^2$ от ρ и $\rho^2 [\psi_{200}(\rho)]^2$ от ρ .

3.13. Уравнение для угловой функции $Y(\vartheta, \varphi)$ в сферической системе координат может быть записано в виде

$$\frac{1}{Y} \left\{ \frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial Y}{\partial \vartheta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2 Y}{\partial \varphi^2} \right\} = -\lambda$$

где λ — некоторая постоянная. Показать, что это уравнение можно разделить на два, если угловую функцию представить в виде произведения двух функций: $Y(\vartheta, \varphi) = \Theta(\vartheta)\Phi(\varphi)$, где $\Theta(\vartheta)$ — функция, зависящая только от угла ϑ ; $\Phi(\varphi)$ — то же, только от угла φ

3.14. Угловая функция $\Phi(\varphi)$ удовлетворяет уравнению $\frac{d^2 \Phi}{d\varphi^2} + m^2 \Phi = 0$. Решить уравнение и указать значения параметра m , при которых уравнение имеет решение.

3.15. Зависящая от угла φ угловая функция имеет вид $\Phi(\varphi) = C e^{im\varphi}$. Используя условие нормировки, определить постоянную C .

3.16. Изобразить графически угловое распределение плотности вероятности нахождения электрона в атоме водорода, если угловая функция $Y_{l,m}(\vartheta, \varphi)$ имеет вид: 1) в s -состоянии ($l=0$) $Y_{0,0} = 1/\sqrt{\pi}$

2) в p -состоянии ($l=1$) при трех значениях m :

а) $m = 1$ $Y_{1,1} = \sqrt{3}/(8\pi) \sin \vartheta e^{i\varphi}$;

б) $m = 0$, $Y_{1,0} = \sqrt{3}/4\pi \cos \vartheta$,

в) $m = -1$ $Y_{1,-1} = \sqrt{3}/(8\pi) \sin \vartheta e^{-i\varphi}$.

Для построений воспользоваться полярной системой координат.

3.17. Угловое распределение плотности вероятности нахождения электрона в атоме водорода определяется видом угловой функции $Y_{l,m}(\vartheta, \varphi)$. Показать, что p -подоболочка имеет сферически симметричное распределение плотности вероятности. Воспользоваться данными предыдущей задачи.

Орбитальный момент импульса и магнитный момент

электрона

3.18. Вычислить момент импульса \mathfrak{S}_l орбитального движения электрона, находящегося в атоме: 1) в s -состоянии; 2) в p -состоянии.

3.19. Определить возможные значения проекции момента импульса \mathfrak{S}_{lz} орбитального движения электрона в атоме на направление внешнего магнитного поля. Электрон находится в d -состоянии.

3.20. Атом водорода, находившийся первоначально в основном состоянии, поглотил квант света с энергией $\varepsilon = 10,2$ эВ. Определить изменение момента импульса $\Delta\mathfrak{S}_l$ орбитального движения электрона. В возбужденном атоме электрон находится в p -состоянии.

3.21. Используя векторную модель атома, определить наименьший угол, который может образовать вектор \mathfrak{S}_l момента импульса орбитального движения электрона в атоме с направлением внешнего магнитного поля. Электрон в атоме находится в d -состоянии.

3.22. Электрон в атоме находится в f -состоянии. Найти орбитальный момент импульса \mathfrak{S}_l электрона и максимальное значение проекции момента импульса $\mathfrak{S}_{lz \max}$ на направление внешнего магнитного поля.

3.23. Момент импульса \mathfrak{S}_l орбитального движения электрона в атоме водорода равен $1,83 \cdot 10^{-34}$ Дж·с. Определить магнитный момент μ_l , обусловленный орбитальным движением электрона.

3.24. Вычислить полную энергию E , орбитальный момент импульса \mathfrak{S}_l и магнитный момент μ_l электрона, находящегося в $2p$ -состоянии в атоме водорода.

3.25. Может ли вектор магнитного момента μ_l орбитального движения электрона установиться строго вдоль линий магнитной индукции?

3.26. Определить возможные значения магнитного момента μ_l , обусловленного орбитальным движением электрона в

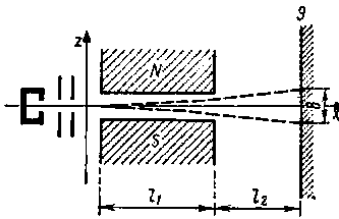
возбужденном атоме водорода, если энергия ε возбуждения равна 12,09эВ.

Спиновый момент импульса и магнитный момент электрона

3.27. Вычислить спиновый момент импульса \mathfrak{S}_s электрона и проекцию \mathfrak{S}_{sz} этого момента на направление внешнего магнитного поля.

3.28. Вычислить спиновый магнитный момент μ_s электрона и проекцию магнитного момента $\mu_s z$ на направление внешнего поля.

3.29. Почему для обнаружения спина электрона в опытах Штерна и Герлаха используют пучки атомов, принадлежащих первой группе периодической системы, причем в основном состоянии?



3.30. Атомы серебра, обладающие скоростью $v = 0,6$ км/с, пропускаются через узкую щель и направляются перпендикулярно линиям индукции неоднородного магнитного поля (опыт Штерна и Герлаха). В поле

протяженностью $l = 6$ см пучок расщепляется на два. Определить степень неоднородности $\partial B/\partial z$ магнитного поля, при которой расстояние b между компонентами расщепленного пучка по выходе его из поля равно 3 мм. Атомы серебра находятся в основном состоянии.

3.31. Узкий пучок атомарного водорода пропускается в опыте Штерна и Герлаха через поперечное неоднородное ($\partial B/\partial z = 2$ кТл/м) магнитное поле протяженностью $l = 8$ см. Скорость v атомов водорода равна 4 км/с. Определить расстояние b между компонентами расщепленного пучка атомов по выходе его из магнитного поля. Все атомы водорода в пучке находятся в основном состоянии.

3.32. В опыте Штерна и Герлаха узкий пучок атомов цезия (в

основном состоянии) проходит через поперечное неоднородное магнитное поле и попадает на экран Э. Какова должна быть степень неоднородности $\partial B/\partial z$ магнитного поля, чтобы расстояние b между компонентами расщепленного пучка на экране было равно 6 мм? Принять $l_1 = l_2 = 10$ см. Скорость атомов цезия равна 0,3 км/с.

3.33. Узкий пучок атомов рубидия (в основном состоянии) пропускается через поперечное неоднородное магнитное поле протяженностью $l = 10$ см. На экране Э, отстоящем на расстоянии $l_2 = 20$ см от магнита, наблюдается расщепление пучка на два. Определить силу F_z , действующую на атомы рубидия, если расстояние b между компонентами пучка на экране равно 4 мм и скорость v атомов равна 0,5 км/с.

3.34. Узкий пучок атомов серебра при прохождении неоднородного ($\partial B/\partial z = 1$ кТл/м) магнитного поля протяженностью $l_1 = 4$ см расщепился на два пучка. Экран для наблюдения удален от границы магнитного поля на расстояние $l_2 = 10$ см. Определить (в магнетонах Бора) проекции $\mu_{J,r}$ магнитного момента атома на направление вектора магнитной индукции, если расстояние b между компонентами расщепленного пучка на экране равно 2 мм и атомы серебра обладают скоростью $v = 0,5$ км/с.

Застройка электронных оболочек

3.35. Какое максимальное число s -, p - и d -электронов может находиться в электронных K -, L - и M - слоях атома?

3.36. Используя принцип Паули, указать, какое максимальное число N_{max} электронов в атоме могут иметь одинаковыми следующие квантовые числа: 1) n, l, m, m_s' ; 2) n, l, m ; 3) n, l ; 4) n .

3.37. Заполненный электронный слой характеризуется квантовым числом $n = 3$. Указать число N электронов в этом слое, которые имеют одинаковые следующие квантовые числа:

1) $m_s = +1/2$;

2) $m = 2$; 3) $m_s = -1/2$ и $m = 0$; 4) $m_s = +1/2$ и $l=2$.

3.38. Найти число N электронов в атомах, у которых в основном состоянии заполнены: 1) K - и L -слои, $3s$ -оболочка и наполовину $3p$ -оболочка; 2) K -, L - и M -слои и $4s$ -, $4p$ - и $4d$ -оболочки. Что это за атомы?

3.39. Написать формулы электронного строения атомов: 1) бора; 2) углерода; 3) натрия.

Векторная модель атома. Спектральные термы

3.40. Как можно согласовать использование векторной модели атома с соотношением неопределенностей для проекций момента импульса?

3.41. Электрон в атоме водорода находится в p -состоянии. Определить возможные значения квантового числа j и возможные значения (в единицах \hbar) полного момента импульса \mathfrak{J}_j электрона. Построить соответствующие векторные диаграммы.

3.42. В возбужденном атоме гелия один из электронов находится в p -состоянии, другой в d -состоянии. Найти возможные значения полного орбитального квантового числа L и соответствующего ему момента импульса \mathfrak{J}_L (в единицах \hbar). Построить соответствующие векторные диаграммы.

3.43. Определить угол φ между орбитальными моментами импульсов двух электронов, один из которых находится в d -состоянии, другой — в f -состоянии, при следующих условиях: 1) полное орбитальное квантовое число $L = 3$; 2) искомый угол — максимальный;

3) искомый угол — минимальный.

3.44. Система из трех электронов, орбитальные квантовые числа l_1, l_2, l_3 которых соответственно равны 1, 2, 3, находятся в S -состоянии. Найти угол $\varphi_{1,2}$ между орбитальными моментами импульса первых двух электронов.

3.1. Каковы возможные значения полного момента импульса \mathfrak{J}_j электрона, находящегося в d -состоянии? Чему равны при

этом углы φ между спиновым моментом импульса и орбитальным?

3.2. Спиновый момент импульса двухэлектронной системы определяется квантовым числом $S = 1$. Найти угол φ между спиновыми моментами импульса обоих электронов.

3.3. Система, состоящая из двух электронов, находится в состоянии с $L = 2$. Определить возможные значения угла φ между орбитальным моментом импульса p -электрона и полным орбитальным моментом импульса \mathfrak{T}_J системы.

3.48. Найти возможные значения угла между спиновым моментом импульса и полным моментом: 1) одноэлектронной системы, состоящей из d -электрона; 2) двухэлектронной системы с $J = 2$.

3.49. Определить возможные значения (в единицах \hbar) проекции \mathfrak{T}_{sz} спинового момента импульса электронной системы, находящейся в состоянии 3D_3 , на направление полного момента.

3.50. Определить возможные значения квантового числа J электронной системы, для которой: 1) $S = 2$ и $L = 1$; 2) $S = 1$ и $L = 3$. Найти (в единицах \hbar) возможные значения полного момента импульса \mathfrak{T}_J системы и построить соответствующие векторные диаграммы.

3.51. Определить возможные значения квантового числа J , соответствующего полному моменту импульса \mathfrak{T}_s электронной системы, у которой $L = 3$, а S принимает следующие значения: 1) $3/2$; 2) 2 ; 3) $5/2$; 4) 4 . Построить соответствующие векторные диаграммы.

3.52. Записать основные термы для следующих атомов: 1) H; 2) He; 3) Be; 4) Li; 5) B.

3.53. Перечислить возможные термы для следующих состояний атомов: 1) 2S ; 2) 2P ; 3) 4P ; 4) 5D .

3.54. Определить кратности вырождения следующих термов: 1) ${}^2D_{3/2}$; 2) 3F_2 3) 1F .

3.55. Объяснить на основе векторной модели атома наличие

двух систем термов (синглетных и триплетных) в атомах с двумя валентными электронами.

3.56. Определить возможные мультиплетности $(2S+1)$ термов следующих атомов: 1) Li; 2) Be; 3) B; 4) C; 5) N.

3.57. Выписать все возможные термы для комбинации p - и d -электронов по типу связи Рассель — Саундерса. Дать их спектральные обозначения.

Магнитный момент атома. Атом в магнитном поле

3.58. Вычислить множитель Ланде g для атомов с одним валентным электроном в состояниях S и P .

3.59. Вычислить множитель Ланде g для атомов, находящихся в синглетных состояниях.

3.60. Определить магнитный момент μ_J атома в состоянии 1D . Ответ выразить в магнетонах Бора (μ_B).

3.61. Вычислить магнитный момент μ_J атома в состоянии 3P_2 . Ответ выразить в магнетонах Бора.

3.62. Атом находится в состоянии $^2D_{3/2}$. Найти число возможных проекций магнитного момента на направление внешнего поля и вычислить (в магнетонах Бора) максимальную проекцию $\mu_{Jz, max}$

3.63. Вычислить в магнетонах Бора магнитный момент μ_J атома водорода в основном состоянии.

3.64. Атом находится в состоянии 1F . Найти соответствующий магнитный момент μ_{Jz} и возможные значения его проекции μ_{Jz} на направление внешнего магнитного поля.

3.65. Максимальная проекция $\mu_{Jz, max}$ магнитного момента атома, находящегося в состоянии 2D , составляет четыре магнетона Бора. Определить мультиплетность $(2S+1)$ соответствующего терма.

3.66. На сколько составляющих расщепляется в опыте Штерна и Герлаха пучок атомов, находящихся в состояниях: 1) $^2P_{3/2}$, 2) 1D ; 3) 5F_1 .

3.67. Определить максимальные проекции $\mu_{Jz, max}$ магнитных

моментов атомов ванадия (4F), марганца (6S) и железа (5D), если известно, что пучки этих атомов при прохождении через сильно неоднородное магнитное поле по методу Штерна и Герлаха расщепляются соответственно на 4, 6 и 9 составляющих. (В скобках указаны состояния, в которых находятся атомы.)

3.68. Вычислить частоты ω_L ларморовой прецессии электронных оболочек атомов: 1) в магнитном поле Земли ($B = 5 \cdot 10^{-5}$ Тл);

2) в поле, магнитная индукция B которого равна 50 Тл.

3.69. Найти угловую скорость прецессии магнитных моментов атомов, помещенных в магнитное поле ($B = 10$ мТл) в случае, когда атомы находятся в состояниях: 1) 1P ; 2) ${}^1P_{3/2}$.

3.70. Определить максимальную энергию U_{\max} магнитного взаимодействия атома, находящегося в состоянии 1D с магнитным полем, индукция которого: 1) $B=1$ Тл; 2) $B=50$ Тл. Ответ выразить в электрон-вольтах.

Эффект Зеемана

3.71. Какое магнитное поле в случае эффекта Зеемана следует считать: 1) «слабым», 2) «сильным»?

3.72. Состояния атома характеризуются двумя спектральными термами. Указать квантовые числа S , L и возможные значения квантового числа J для состояний: 1) 1S и 1P ; 2) 1S и 1F . Изобразить для этих состояний схему энергетических уровней при отсутствии магнитного поля.

3.73. Состояние атома характеризуется двумя спектральными термами. Указать возможные значения квантового числа J для состояний: 1) 2S и 2P ; 2) 3P и 2D 3) 3S и 3D . Изобразить для этих состояний схему энергетических уровней с учетом спин-орбитального взаимодействия (естественного мультиплетного расщепления) при отсутствии магнитного поля.

3.74. Определить возможные значения квантового числа m_J и изобразить на схеме расщепление энергетических уровней атома

в магнитном поле для состояний, определяемых спектральными термами: 1) 2S ; 2) ${}^2P_{3/2}$; 3) ${}^2D_{5/2}$; 4) 1F .

3.75. Построить схему возможных энергетических переходов в слабом магнитном поле между состояниями атома, определяемыми следующими термами: 1) ${}^2P_{1/2} \rightarrow {}^2S$; 2) ${}^2P_{3/2} \rightarrow {}^2S$; 3) ${}^2D_{3/2} \rightarrow {}^2P_{3/2}$

3.76. Вычислить смещение $\Delta\omega$ спектральных линий при сложном (аномальном) эффекте Зеемана в случае перехода атома из состояния, определяемого термом ${}^2P_{1/2}$, в состояние — ${}^2S_{1/2}$. В качестве единицы смещения принять нормальное (лоренцово) смещение $\Delta\omega = (\mu_B/\hbar)B$.

4. СПЕКТРЫ МОЛЕКУЛ

Основные формулы

- Приведенная масса двухатомной молекулы

$$\mu = m_1 m_2 / (m_1 + m_2),$$

где m_1 и m_2 — массы атомов, входящих в состав молекулы.

- Собственная круговая частота осциллятора

$$\omega = \sqrt{\beta / \mu},$$

где β — коэффициент квазиупругой силы.

- Нулевая собственная волновая функция одномерного квантового гармонического осциллятора

$$\psi_0 = C_0 \exp\left(-\alpha^2 x^2 / 2\right)$$

где параметр $\alpha = \sqrt{\mu\omega / \hbar}$

- Энергия колебания гармонического осциллятора

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

где n — колебательное квантовое число ($n = 0, 1, 2, 3, \dots$).

Для квантового числа n существует правило отбора, согласно которому $\Delta n = \pm 1$.

- Нулевая энергия

$$E_0 = \frac{1}{2} \hbar \omega$$

- Энергия колебания ангармонического осциллятора

$$E_v = \hbar \omega [(v + \frac{1}{2}) - \gamma(v + \frac{1}{2})^2],$$

где v — колебательное квантовое число ($v = 0, 1, 2, \dots$); γ — коэффициент ангармоничности; Δv — любое целое число. Для квантового числа v нет правила отбора, поэтому Δv может принимать любые целочисленные значения.

- Разность энергий двух соседних колебательных уровней

$$\Delta E_{v+1, v} = \hbar \omega [1 - 2\gamma(v + 1)]$$

- Максимальное значение квантового числа v

$$v_{max} = \frac{1}{2\gamma} - 1$$

- Максимальная энергия колебательного движения

$$E_d = \hbar \omega (4\gamma).$$

- Энергия диссоциации двухатомной молекулы

$$E_d = \frac{\hbar \omega}{4\gamma} (1 - 2\gamma).$$

- Момент инерции двухатомной молекулы относительно оси, проходящей через ее центр инерции перпендикулярно прямой, соединяющей ядра атомов,

$$J = \mu d^2$$

где μ — приведенная масса молекулы; d — межъядерное расстояние.

- Вращательная постоянная

$$B = \hbar^2 / (2J).$$

- Энергия вращательного движения двухатомной молекулы

$$E_{\mathcal{Y}} = B\mathcal{Y}(\mathcal{Y} + 1),$$

где \mathcal{Y} — вращательное квантовое число ($\mathcal{Y} = 0, 1, 2, \dots$).

- Спектроскопическое волновое число

$$\nu = 1/\lambda,$$

где λ — длина волны излучения.

- Энергия ε фотона излучения связана с спектроскопическим волновым числом ν соотношением

$$\varepsilon = 2\pi h c \nu,$$

где c — скорость распространения электромагнитного излучения.

Задачи

Колебательный спектр двухатомной молекулы

4.1. Изобразить графически зависимость $\psi_0(x)$ и $[\psi_0(x)]^2$ Для нулевой собственной волновой функции осциллятора.

4.2. Используя условие нормировки, определить нормировочный множитель C_0 нулевой собственной волновой функции осциллятора.

4.3. Рассматривая молекулу как квантовый гармонический осциллятор, находящийся в основном состоянии ($n = 0$), найти амплитуду A классических колебаний, выразив ее через параметр α .

4.4. Гармонический осциллятор находится в основном состоянии ($n = 0$). Какова вероятность W обнаружения частицы в области $(-A < x < A)$, где A — амплитуда классических колебаний?

4.5. Определить среднюю потенциальную энергию $\{U(x)\}$ гармонического осциллятора, находящегося в основном состоянии, выразив ее через нулевую энергию E_0 .

4.6. Собственная круговая частота ω_0 колебаний молекулы водорода равна $8,08 \cdot 10^{14} \text{ с}^{-1}$. Найти амплитуду A классических колебаний молекулы.

4.7. Зная собственную круговую частоту ω_0 колебаний молекулы CO ($\omega_0 = 4,08 \cdot 10^{14} \text{ с}^{-1}$), найти коэффициент β квазиупругой силы.

4.8. Определить энергию $E_{\text{возб}}$ возбуждения молекулы HCl с нулевого колебательного энергетического уровня на первый, если известны собственная круговая частота $\omega_0 = 5,63 \cdot 10^{14} \text{ с}^{-1}$ и

коэффициент ангармоничности $\gamma = 0,0201$.

4.9. Определить число N колебательных энергетических уровней, которое имеет молекула HBr , если коэффициент ангармоничности $\gamma = 0,0208$.

4.10. Во сколько раз отличаются максимальная и минимальная (отличная от нуля) разности двух соседних энергетических уровней для молекулы H_2 ($\gamma = 0,0277$)?

4.11. Определить максимальную колебательную энергию E_{max} молекулы O_2 , для которой известны собственная круговая частота $\omega = 2,98 \cdot 10^{14} \text{ с}^{-1}$ и коэффициент ангармоничности $\gamma = 9,2 \cdot 10^{-3}$.

4.12. Определить энергию диссоциации D (в электрон-вольтах) молекулы CO , если ее собственная частота $\omega = 4,08 \cdot 10^{14} \text{ с}^{-1}$ и коэффициент ангармоничности $\gamma = 5,83 \cdot 10^{-3}$. Изобразить на потенциальной кривой схему колебательных энергетических уровней и отметить на ней энергию диссоциации.

4.13. Найти коэффициент ангармоничности γ молекулы N_2 , если ее энергия диссоциации $D = 9,80 \text{ эВ}$ и собственная круговая частота ($\omega = 4,1 \cdot 10^{14} \text{ с}^{-1}$). На потенциальной кривой изобразить схему энергетических уровней молекулы и отметить на ней энергию диссоциации.

4.14. Молекула NO переходит из низшего возбужденного состояния в основное. Определить длину волны γ испущенного при этом фотона, если собственная круговая частота $\omega = 3,59 \cdot 10^{14} \text{ с}^{-1}$ и коэффициент ангармоничности $\gamma = 8,73 \cdot 10^{-3}$. На потенциальной кривой изобразить схему колебательных энергетических уровней молекулы и отметить на ней соответствующий энергетический переход.

Вращательный спектр двухатомной молекулы

4.15. Найти момент импульса \mathfrak{J} двухатомной молекулы, соответствующий низшему возбужденному состоянию.

4.16. Определить изменение $\Delta \mathfrak{Z}$ момента импульса двухатомной молекулы при переходе ее с первого вращательного уровня на второй.

4.17. Определить угловую скорость ω вращения молекулы S_2 , находящейся на первом возбужденном вращательном уровне. Межъядерное расстояние $d = 189$ пм.

4.18. Вычислить вращательную постоянную B для молекулы CO, если межъядерное расстояние $d = 113$ пм. Ответ выразить в миллиэлектрон-вольтах.

4.19. Найти момент импульса \mathfrak{Z} молекулы кислорода, вращательная энергия $E_{\mathfrak{Z}}$ которой равна 2,16 мэВ.

4.20. Найти момент инерции J и межъядерное расстояние d молекулы CO, если интервалы ΔE между соседними линиями чисто вращательного спектра испускания молекул CO равны 0,4 мэВ.

4.21. Определить для молекулы HCl вращательные квантовые числа \mathfrak{Z} двух соседних уровней, разность энергий $\Delta E_{\mathfrak{Z}+1, \mathfrak{Z}}$ которых равна 7,86 мэВ.

4.22. Для молекулы N_2 найти: 1) момент инерции J , если межъядерное расстояние $d = 110$ пм; 2) вращательную постоянную B ; 3) изменение $|\Delta E|$ энергии при переходе молекулы с третьего вращательного энергетического уровня на второй. Относительная атомная масса $A_N = 14$.

4.23. Для молекулы O_2 найти: 1) приведенную массу μ ; 2) межъядерное расстояние d , если вращательная постоянная $B = 0,178$ мэВ; 3) угловую скорость ω вращения, если молекула находится на первом вращательном энергетическом уровне. Относительная атомная масса $A_O = 16$.

4.24. Для молекулы NO найти: 1) момент инерции J молекулы, если межъядерное расстояние $d = 115$ пм; 2) вращательную постоянную B молекулы; 3) температуру T , при которой средняя кинетическая энергия поступательного движения молекулы равна энергии, необходимой для ее возбуждения на первый вращательный энергетический уровень.

Относительные атомные массы A_N и A_O равны соответственно 14 и 16.

4.25. Установить числовое соотношение между энергией ϵ излучения и спектроскопическим волновым числом $\bar{\nu}$.

4.26. Найти расстояние d между ядрами молекулы CH , если интервалы $\Delta\bar{\nu}$ между соседними линиями чисто вращательного спектра испускания данной молекулы равны 29 см^{-1} .

4.27. Определить, на сколько изменится импульс молекул азота при испускании спектральной линии с длиной волны $\lambda = 1250 \text{ мкм}$, которая принадлежит чисто вращательному спектру.

4.28. Длины волн λ_1 и λ_2 двух соседних спектральных линии в чисто вращательном спектре молекулы HC1 соответственно равны 117 и 156 мкм. Вычислить вращательную постоянную (см^{-1}) для молекулы HC1 .

4.29. Будет ли монохроматическое электромагнитное излучение с длиной волны $\lambda = 3 \text{ мкм}$ возбуждать вращательные и колебательные уровни молекулы HF , находящейся в основном состоянии?

4.30. Определить кратность вырождения энергетического уровня двухатомной молекулы с вращательным квантовым числом J .

Список литературы

1. Чертов А.Г., Воробьев А.А. Задачник по физике [Текст]: учеб. пособие для вузов.-7-е изд., перераб. и доп. -М.: Издательство Физико-математической литературы, 2003.-640 с.
2. Паничев С.А. Строение атомов и молекул. Тюмень. Изд-во ТюмГУ. 2008. – 381 с
3. Б.Я. Симкин, М.Е. Клецкий, М.Н. Глуховцев. Задачи по теории строения молекул. Изд. ФЕНИКС, Ростов-на-Дону. 2003. – 272 с.