

## Первые модели атомов

1. Считая, что энергия ионизации атома водорода  $E=13.6$  эВ, найдите его радиус, согласно модели Томсона.
2. Найти относительное число частиц рассеянных в интервале углов от  $\theta_1$  до  $\theta_2$  в опыте Резерфорда.
3. Найдите диапазон спектральной серии Лаймана для водорода, т.е. длины волн, соответствующие головной линии и границе серии.
4. Найдите разность длин волн  $\Delta\lambda$  между головными линиями серии Бальмера и Лаймана для ионов  ${}^4\text{He}^+$ .
5. Головная линия какой серии может быть возбуждена фотоном видимого диапазона ( $\lambda_{\min}=400$  нм –  $\lambda_{\max}=750$  нм) в дважды ионизованном атоме лития  $\text{Li}^{++}$  ( $Z=3$ )?
6. Протон и мюон могут образовывать водородоподобную систему – мезоатом. Масса мюона в 207 раз больше массы электрона. Найти радиус боровской орбиты и энергию основного состояния мезоатома.

## Основы квантовой механики

7. Волновая функция равна  $\exp(ikx)$  на отрезке  $[-1/2a, 1/2a]$  и равна нулю при всех других значениях  $x$ . Чему равно стандартное отклонение  $x$ ? ( $k$  - действительное).
8. Найти величину плотности потока вероятности для волновой функции  $\psi(x) = A(\exp(ikx) - 0,5\exp(-ikx))$ .
9. Показать, что для частицы, движущейся в потенциальном поле  $U(x, t)$ , справедлива теорема Эренфеста

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

(угловые скобки означают усреднение по квантовому состоянию).

10. Состояние частицы описывается нормированной волновой функцией  $\psi(x)$ , запишите выражение для вероятности того, что модуль импульса частицы имеет значение от  $p$  до  $p+dp$ .
11. При измерении координаты свободной частицы получено значение  $x_0$ .  
а) Чему равна волновая функция  $\psi(x)$  сразу после измерения? б) Сразу же после этого проводится измерение импульса частицы. Какие значения  $p$ , и с какой плотностью вероятности будут получены?
12. Состояние частицы в свободном пространстве характеризуется волновой функцией  $\psi(x, y, z) = A(y, z)\sin kx$ . Какие значения  $x$  - проекции импульса могут быть измерены в этом случае?
13. Волновая функция электрона имеет вид  $\psi(r, \theta, \varphi) = R(r)\sin\theta\cos\varphi$ . Какие и с какой вероятностью значения  $L_z$  и  $L^2$  могут быть измерены в этом состоянии?
14. Найти собственные значения и собственные векторы операторов  $\hat{s}_z$  и  $\hat{s}^2$ .
15. Измерение z-компоненты спина электрона дало значение  $S_z = \frac{\hbar}{2}$ . Найдите  $\langle S_x^2 \rangle$ .

16. Частица массы  $m$  находится в одномерной бесконечно глубокой потенциальной

$$\text{яме } U(x) = \begin{cases} 0, & x \in \left[-\frac{a}{2}, \frac{a}{2}\right] \\ \infty, & x \notin \left[-\frac{a}{2}, \frac{a}{2}\right] \end{cases}. \text{ В яме имеется малое возмущение}$$

$$V(x) = \begin{cases} V_0, & x \in \left[-\frac{a}{4}, \frac{a}{4}\right] \\ 0, & x \notin \left[-\frac{a}{4}, \frac{a}{4}\right] \end{cases}.$$

Найти в первом порядке теории возмущений энергию основного состояния частицы.

17. В сферической системе координат электрон в атоме водорода характеризуется волновой функцией:  $\psi(r, \theta, \varphi) = A(\varphi_{2,1,1} - \varphi_{2,1,-1} + 2\varphi_{1,0,0})$ , где  $\varphi_{n,l,m}$  – волновая функция стационарного состояния с квантовыми числами  $n, l, m$ ,  $A$  – константа. Найти среднее значение модуля момента импульса  $\langle |L| \rangle$ .

18. Напишите выражение для зависящей от времени волновой функции основного состояния электрона в прямоугольной яме шириной  $a$  с бесконечно высокими стенками.

19. Электрон в бесконечной яме шириной  $a$  характеризуется волновой функцией  $\psi = \frac{i}{\sqrt{5}}\varphi_1 - \frac{2}{\sqrt{5}}\varphi_2$ , где  $\varphi_n$  – нормированные волновые функции стационарного состояния с квантовыми числами  $n$ . Какие значения энергии и с какой вероятностью могут быть измерены в этом состоянии?

20. Найти минимальный угол, который составляет с осью  $Z$  орбитальный момент электрона в  $p$  – состоянии.

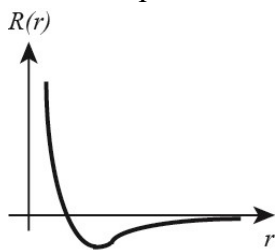
21. Найти минимальный угол, который составляет с осью  $Z$  спин электрона в  $d$  – состоянии.

22. Волновая функция состояния некоторой квантовой системы, как функция полярного угла, имеет вид  $\psi(\varphi) = A \sin^3 \varphi$ , где  $A = \text{const}$ . Найти среднее значение  $L_z$ .

### Квантовомеханическая модель атома водорода

23. Определить средние значения кинетической и потенциальной энергии электрона в атоме водорода, если известно, что его радиальная волновая функция НЕ проходит через начало координат и дважды пересекает ось абсцисс.

24. Определить среднее расстояние от электрона до ядра в атоме водорода в состоянии, радиальная волновая функция которого изображена на рисунке.



25. Определить энергетический спектр стационарных состояний

трехмерного изотропного гармонического осциллятора  $U = \frac{m\omega^2 r^2}{2}$ .

Определить энергию и кратность вырождения четвертого энергетического уровня.

26. Состояние частицы в трехмерном сферически симметричном гармоническом потенциале  $U = \frac{m\omega^2 r^2}{2}$  задается функцией:  $\psi(x, y, z) = Axy \exp\left(-\frac{x^2 + y^2 + z^2}{2a^2}\right)$ , где

$$a = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$$

- Определить, какие значения энергии, квадрата момента импульса и z-проекции момента импульса могут быть измерены в таком состоянии и с какой вероятностью?
27. Определить наиболее вероятное удаление от электрона до ядра в атоме H в состоянии, радиальная волновая функция которого линейно выходит из начала координат и не имеет других нулей.
28. Найти среднее значение модуля кулоновской силы, действующей на электрон в атоме водорода, в состоянии, где главное квантовое число равно 2, а z-проекция момента импульса не равна нулю.
29. Известно, что электрон в атоме водорода находится в состоянии со средней потенциальной энергией  $\langle U \rangle = -\frac{Ry}{2}$  и орбитальным моментом  $L = \hbar$ , ненулевой z-проекцией момента импульса. Записать волновую функцию электрона в таком состоянии, вычислить вероятность обнаружения электрона на расстоянии от ядра, меньшем  $a_0$ .
30. Определить разность энергий между основным и первым возбужденным s-состояниями частицы массой  $m$  в трехмерной сферически симметричной прямоугольной яме бесконечной глубины и радиуса  $R$ .
31. Используя формулу тонкой структуры, найти величину тонкого расщепления уровня атома водорода, если известно, что среднее значение потенциальной энергии электрона в этом состоянии  $\langle U \rangle = -\frac{Ry}{8}$ , а значение орбитального момента таково, что можно при измерении получить 7 значений его проекции.
32. Используя формулу тонкой структуры, найти величину тонкого расщепления уровня атома водорода в состоянии, полная энергия которого равна  $E = -\frac{Ry}{9}$ , а z-проекция орбитального момента равна  $-2\hbar$ .
33. Найти среднее значение потенциальной и кинетической энергии электрона в  $2p$  состоянии водородоподобного иона  $\text{He}^+$ .
34. Найти среднее значение потенциальной и кинетической энергии электрона в  $3s$  состоянии водородоподобного иона  $\text{Li}^{++}$ .

### Многоэлектронные атомы

35. Определить возможную мультиплетность термина  $\nu$ , если в атоме  ${}_{13}^{27}\text{Al}$  возбуждены электроны из незамкнутой оболочки.
36. Желтый дублет натрия ( $\lambda_1 = 589.00$  нм и  $\lambda_2 = 589.59$  нм) соответствует переходу  $3p \rightarrow 3s$ . Используя правило интервалов Ланде, найти константу связи  $A$ .
37. Используя правило интервалов Ланде, нарисуйте схему уровней тонкой структуры основного термина атома кислорода ( $Z=8$ ).

38. Квантовый дефект основного состояния калия  $\sigma = 2.23$ . Найти красную границу фотоионизации калия  ${}^{39}_{19}\text{K}$  из основного состояния.
39. Записать терм основного состояния атома углерода  ${}^{12}_6\text{C}$ .
40. Найти атом с наименьшим атомным номером, основной терм незамкнутой подболочки которого имеет вид  ${}^5D_0$ ;
41. Сверхтонкая структура основного состояния атома, имеющего конфигурацию  $p^4$ , состоит из трех компонент. Определить спин ядра.
42. Найти количество компонент сверхтонкой структуры основного состояния атома  ${}^{27}_{13}\text{Al}$ , если спин его ядра равен  $\frac{5}{2}$ .
43. Найти разность энергий связи  $K$  и  $L$  электронов ванадия ( $Z=23$ ).
44. Найти напряжение на рентгеновской трубке с антикатодом из никеля  $\text{Ni}$  ( $Z=23$ ), если разность длин волн  $K\alpha$ -линии и коротковолновой границы сплошного рентгеновского спектра равна 84 пм.

### Взаимодействие квантовой системы с излучением

45. Частица массы  $m$  и зарядом  $e$  находится в прямоугольной потенциальной яме  $U(x) = \begin{cases} 0, & x \in (0, L) \\ \infty, & x \notin (0, L) \end{cases}$ . Вычислить матричный  $d_{12}$  элемент оператора дипольного момента  $\hat{d} = ex$ .
46. Частица массы  $m$  и зарядом  $e$  находится в параболической потенциальной яме  $U(x) = \frac{m\omega^2 x^2}{2}$ . Вычислить матричный  $d_{01}$  элемент оператора дипольного момента  $\hat{d} = e\hat{x}$ .
47. Атом водорода находится в возбужденном состоянии  $4p_{3/2}$ . В какие состояния атом может перейти в результате спонтанного излучения фотона. Решить задачу в дипольном приближении.
48. Найти длины волн спектральных линий, возникающих при каскаде переходов возбужденного атома натрия из состояния  $4s$  в основное состояние  $3s$ . Квантовые дефекты  $s$ - и  $p$ - состояний равны  $\Delta_s = 1.37$  и  $\Delta_p = 0.88$ .
49. Атом углерода находится на терме  ${}^3D$ , принадлежащем электронной конфигурации  $2p4p$ . В какие нижележащие термы электромагнитные переходы разрешены в дипольном приближении?
50. Какие переходы возможны между термами конфигураций  $2p^2$  и  $2p3s$  в атоме углерода? Сколько компонент имеет тонкая структура каждой из спектральных линий?
51. Атом лития переходит из возбужденного состояния  $3d$  в состояние с меньшей энергией с испусканием фотона. Определить, сколько спектральных линий будет излучаться в этом случае с учетом тонкой структуры.

### Атом в поле внешних сил

52. Вычислить множитель Ланде для состояния  ${}^5F_1$ .

53. Определить эффективный магнитный момент атома (в магнетонах Бора) в состоянии  ${}^2D_{5/2}$ .
54. Найти эффективный магнитный момент атома хрома в основном состоянии. Его электронная конфигурация  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^5 4s$ .
55. Оценить величину индукции магнитного поля  $B$ , при котором эффект Зеемана (слабое поле) сменяется эффектом Пашена и Бака (сильное поле).
56. На сколько компонент расщепится пучок атомов фтора ( $Z=9$ ), находящихся в основном состоянии, в эксперименте Штерна-Герлаха в случае слабого и сильного магнитных полей?
57. Рассмотреть расщепление спектральной линии для перехода  ${}^3S_1 \rightarrow {}^3P_2$  в слабом магнитном поле  $B$ . Определить сдвиг  $\Delta\omega$  отдельных компонент относительно невозмущенной линии.
58. На сколько компонент расщепится спектральная линия перехода  ${}^1F_3 \rightarrow {}^1D_2$  в слабом и сильном магнитном поле?

### Молекулы

59. Какие молекулярные термы образуют атомы водорода и хлора ( $Z=17$ ), находящиеся в основном состоянии?
60. Какие молекулярные термы могут образовывать атомы Na ( $Z=11$ ) и F ( $Z=9$ ), если атом фтора находится в основном, а атом натрия – в нижнем возбужденном состоянии?
61. Эффективный потенциал взаимодействия ядер в двухатомной молекуле может быть аппроксимирован выражением  $U(R) = D[1 - e^{-\alpha(R-R_0)}]^2$ , где  $R_0$  - равновесное расстояние между ядрами. Найти энергию нулевых колебаний молекулы, если массы атомов одинаковы и равны  $M$ .
62. Энергия нулевых колебаний двухатомной молекулы равна  $E_0$ . Найти вклад колебательной степени свободы в молярную теплоемкость двухатомного идеального газа.
63. Определить межъядерное расстояние в молекуле HBr, если частоты линий её вращательного спектра разделены интервалом  $\Delta\omega$ . Приведенная масса молекулы HBr равна  $\mu$ .
64. Сколько линий содержит вращательный спектр молекулы CO, момент инерции которой  $I = 1,44 \cdot 10^{-46}$  кг м<sup>2</sup>, а собственная частота колебаний  $\omega = 4,1 \cdot 10^{14}$  Гц?