1. Найти значения суммарного орбитального момента в электронной конфигурации pf.
2. Определить терм, соответствующий электронной конфигурации $2s^2 2p^5$.
3. Определить основной терм атома кальция Ca (Z=20).
4. Нижнее возбужденное состояние атома неона Ne (Z=21) – $^3P_2$. Определить спин ядра, если известно, что сверхтонкая структура этого состояния состоит из четырех компонент.
5. Сколько линий образуют головную линию Бальмера с учетом спин-орбитального взаимодействия:
6. Вычислить с помощью закона Мозли длину волны $K\alpha$-линии атома алюминия Al (Z=13):
7. Определите число подуровней, на которое расщепится уровень $^3S_1$ в слабом магнитном поле.
8. Найти магнитный момент атома натрия Na (Z=7) в основном состоянии (в магнетонах Бора).
9. Волновая функция электрона в основном состоянии атома водорода имеет вид $\psi(r)=A\exp(-\rho)$, где $\rho=r/a$, a-Боровский радиус. Написать выражение (не вычислять!) для вычисления вероятности нахождения электрона на расстоянии $r>2a$.
10. Частица массы m находится в одномерной бесконечно глубокой потенциальной яме $U(x)=\begin{cases} 0, x\in[-\frac{a}{2},\frac{a}{2}] \\ \infty, x\notin[-\frac{a}{2},\frac{a}{2}] \end{cases}$. В яме имеется возмущение $V(x)=\alpha x$. Найти в первом порядке теории возмущений энергию основного состояния частицы.
11. 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 $<|L|>$:
12. Какие из перечисленных ниже волновых функций могут быть волновыми функциями электронов в атоме гелия (Ψ – координатная часть волновой, S – спиновая часть волновой функции $S^+=\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$, $S^-=\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$):

    а) $[\Psi_a(1)\Psi_b(2)-\Psi_a(2)\Psi_b(1)]\cdot S^-(1)S^-(2)$

    б) $[\Psi_a(1)\Psi_b(2)+\Psi_a(2)\Psi_b(1)]\cdot S^+(1)S^-(2)$

    в) $\Psi_a(2)\Psi_b(1)\cdot[S^+(1)S^-(2)-S^+(2)S^-(1)]$

    г) $[\Psi_a(1)\Psi_b(2)-\Psi_a(2)\Psi_b(1)]\cdot[S^+(1)S^-(2)+S^+(2)S^-(1)]$

    д) $[\Psi_a(1)\Psi_b(2)+\Psi_a(2)\Psi_b(1)]\cdot[S^+(1)S^-(2)+S^+(2)S^-(1)]$

(1) $p - l = 1$
$f - l = 3$

Согласно правилу сложения квантовых векторов,

$L = 2, 3, 4$

---

(2) $2s^2 2p^5$

Терм будет всего один.

$l = 1$, $S = \frac{1}{2}$, т.к. имеем ^2P терм.

---

(3) Электронная конфигурация Ca:

$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2$, так как $4s$ лежит ниже, чем $3d$ (так происходит из-за того, что s электроны с большей вероятностью находятся внутри атомного остова, где экранировка заряда ядра хуже).

$4s^2$ - полностью заполнена, так что $S=0$, $l=0$ и имеем единственный терм ^1S и единственное состояние $^1S_0$

---

(4) Ne, $Z=21$, состояние $^3P_2$, то есть $J=2$

Количество уровней сверхтонкой структуры состояния определяется количеством возможных значений полного механического

момента атома $F = J + I$, где I – как раз спин ядра.

$\min\{2J+1;\ 2I+1\} = 4$, то есть

$2I+1 = 4 \Rightarrow I = \frac{3}{2}$.

Тогда возможные значения F: $1/2,\ 3/2,\ 5/2\ 7/2$

Итак, $I = 3/2$.

---

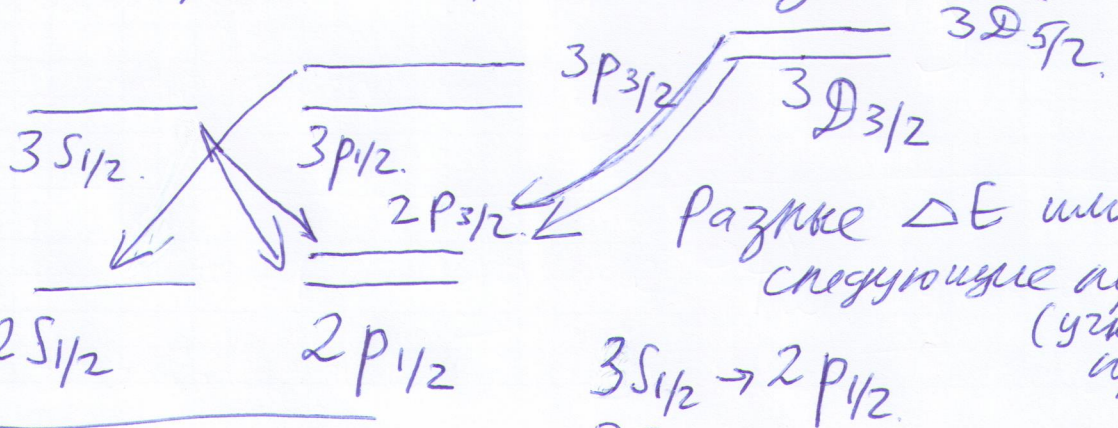
(5) Головная линия Бальмера это переход с $n=3$ на $n=2$.

$n=2$: $^2S_{1/2}$, $^2P_{1/2}$, $^2P_{3/2}$ → возможные состояния.

$n=3$: $^2S_{1/2}$, $^2P_{1/2}$, $^2P_{3/2}$, $^2D_{3/2}$, $^2D_{5/2}$

Причём уровни с одинаковым J имеют одинаковую энергию, то есть вырождены.

Если это нарисовать, то выглядит так.



Разные ΔE имеют следующие переходы (учитываем правила отбора)

$3S_{1/2} \to 2P_{1/2}$

$3S_{1/2} \to 2P_{3/2}$

$3P_{3/2} \to 2S_{1/2}$

$3D_{3/2} \to 2P_{3/2}$

$3D_{5/2} \to 2P_{3/2}$

Итого, 5 линий

(6) Закон Мозли сам по себе это экспериментальный результат.

$\sqrt{\omega} \sim Z - \delta$

Нам же нужна формула. Она выглядит так.

$$\hbar\omega = R_y \cdot \left\{ \frac{(Z-\delta_1)^2}{n_1^2} - \frac{(Z-\delta_2)^2}{n_2^2} \right\},$$

где δ_1 и δ_2 — постоянные экранирования.

K_α — это переход с $n_2 = 2$ на $n_1 = 1$.

Al: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^1$

Для n_2 постоянная экранирования $\delta_2 \approx 2$.
Для n_1 постоянная экранирования $\delta_1 \approx 1$

Т.е. имеем: $\hbar\omega = R_y \left\{ (Z-1)^2 - \frac{(Z-2)^2}{4} \right\} \approx$

$\approx \frac{3}{4}(Z-1)^2 R_y \approx 1500$ эВ.

$$\frac{hc}{\lambda} = E \Rightarrow \lambda = \frac{hc}{E} \approx 8\,\text{Å}$$

---

(7) Слабое МП — это поле, энергия взаимодействия спинов и орб. моментов атома с которым много меньше спин-орбитального взаимодействия.

В слабом МП расщепление происходит на $2J+1$ компоненту, то есть в нашем случае будет триплет.

(8) Магнитный момент ядра не учитываем, т.к. он много меньше магнитного момента электронной оболочки.

Основное состояние Na $\quad {}^2S_{1/2}$, то есть есть только спиновый мех. момент.

$$\vec{M_S} = -2\mu_B \cdot \vec{S}$$

это так случилось из-за g фактора.

$$|M_S| = 2\mu_B\sqrt{S\cdot(S+1)} = 2\mu_B\cdot\sqrt{\frac{3}{4}} = \sqrt{3}\,\mu_B,$$

где $\mu_B = \dfrac{e\hbar}{2m}$

Итак, $\boxed{\dfrac{M}{\mu_B} = \sqrt{3}}$

(9) $$P(r>2a) = \int_{2a}^{\infty} \overbrace{A^2 e^{-2\rho}}^{\psi\cdot\psi^*} \cdot \overbrace{4\pi r^2 dr}^{dV}$$

В принципе, этот $\int$-л можно посчитать по частям.

(10) Волновая функция основного состояния чётная, оператор возмущения нечётный

$$\Rightarrow \int_{-a/2}^{+a/2} \psi^*(x)\cdot V(x)\cdot\psi(x)\,dx = 0 \Rightarrow \delta E_0 = 0,$$ поэтому

Энергия основного состояния будет просто

$$\boxed{E_0 = \frac{\hbar^2}{2m}\cdot\left(\frac{\pi}{a}\right)^2}$$

отсчитывается от дна ямы!

(11) $\psi = A\left(\phi_{2,1,1} - \phi_{2,1,-1} + 2\phi_{1,0,0}\right)$

Хотим, чтобы $\int \psi\psi^* dV = 1 \Rightarrow$

ф-СФ

$\Rightarrow A^2(1+1+4) = 1 \Rightarrow A = \frac{1}{\sqrt{6}}$.

Тогда $P_1 = C_1^2 = \frac{1}{6}$ – вероятность обнаружить $\bar{e}$ в состоянии с $\phi_1 \rightarrow$

$P_2 = C_2^2 = \frac{1}{6}$ $\rightarrow$ в состоянии ϕ_2

$P_3 = C_3^2 = \frac{4}{6} = \frac{2}{3} \rightarrow$ в состоянии ϕ_3.

$\rightarrow$ + одинаковые вероятности

В 1 и 2 состоянии проекции l имеют разные знаки, а в 3 состоянии l и $m_l = 0 \Rightarrow \langle |L| \rangle = 0$.

(12) $\Psi_{итог} = \Psi(r)\cdot S(\delta_i)$ – должна быть антисимметр, так как электрон это фермион.

Поэтому либо $\Psi(r) = \Psi(-r)$ и $S(\delta_1,\delta_2) = -S(\delta_2,\delta_1)$, либо наоборот.

Этому условию удовл. (а) и (г)

В (а) $\Psi(r)$ – АС, $S(\delta_i)$ – симм. Аналогично в (г).