

计算和简述题 <期中>

1. 已知质量为  $m$  的微观粒子在正方形无限深势阱 ( $a=b$ ) 中运动的波函数为

$$\Psi_{n_x n_y}(x, y) = \sqrt{\frac{4}{ab}} \sin \frac{n_x \pi x}{a} \sin \frac{n_y \pi y}{b}$$

- 1) 试求体系能量最低的前 3 个能级值, 指出每个能级的简并度;  
2) 指出每个状态下的节面位置和最易于出现的最可几位置。

解: 1)	$n_x$	$n_y$	$n_x^2 + n_y^2$	$\Psi_{n_x n_y}$	简并度	能级值
	1	1	2	$\Psi_{1,1}$	1	$\frac{2h^2}{8ma^2}$
	1	2	5	$\Psi_{1,2}, \Psi_{2,1}$	2	$\frac{5h^2}{8ma^2}$
	2	1				
	2	2	8	$\Psi_{2,2}$	1	$\frac{8h^2}{8ma^2}$

2) 状态  $\Psi_{1,1}$  节面位置 没有节面  
 $\sin \frac{\pi x}{a} \sin \frac{\pi y}{a}$  最易于出现最可几位置  $(\frac{a}{2}, \frac{a}{2})$   $\frac{\partial \Psi}{\partial x} \Rightarrow \frac{\partial \Psi}{\partial y} \Rightarrow$

$\Psi_{1,2}$	一个节面在 $y = \frac{a}{2}$ 处	$p=0$	$(\frac{a}{2}, \frac{a}{4})$	$(\frac{a}{2}, \frac{3a}{4})$
$\Psi_{2,1}$	一个节面在 $x = \frac{a}{2}$ 处		$(\frac{a}{4}, \frac{a}{2})$	$(\frac{3a}{4}, \frac{a}{2})$
$\Psi_{2,2}$	两个节面, 分别在 $x = \frac{a}{2}$ 处和 $y = \frac{a}{2}$ 处		$(\frac{a}{4}, \frac{a}{4})$	$(\frac{a}{4}, \frac{3a}{4})$
			$(\frac{3a}{4}, \frac{a}{4})$	$(\frac{3a}{4}, \frac{3a}{4})$

2. 请给出硫原子所有的光谱项及光谱支项, 并说明哪个是能量最低的光谱支项

$^{16}\text{S}: [\text{Ne}] 3s^2 3p^4$   $3p^4 \Leftrightarrow 3p^4$   $3s^2 3p^4 \rightarrow p^2$

$m_1$	电子 1	$m_2$	电子 2
1	0	-1	0
2	1	0	1
1	0	-1	0
0	-1	-2	1

- $M_L$
- (1)  $M_L = 2, 1, 0, -1, 2$   $L=2, S=0$   $^1D$
  - (2)  $M_L = 1, 0, -1$   $L=1, S=1$   $^3P$
  - (3)  $M_L = 0$   $L=0, S=0$   $^1S$

硫原子的光谱项为  $^1D, ^3P, ^1S$

光谱项  $^1D$  的光谱支项为:  $^1D_2$

$^3P$   $^3P_2, ^3P_1, ^3P_0$   
 $^1S$   $^1S_0$

最低的为  $^3P_2$



期中

1. 三键立方势阱中7个电子的体系自旋度  $(2S+1)$  为 (3)

$(n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) \hbar^2$

$n_x$	$n_y$	$n_z$
1	1	1
2	1	1
1	2	1
1	1	2
2	2	1
1	2	2
2	1	2

$8ma^2$

6  $\uparrow\downarrow$   $\uparrow\downarrow$   $\uparrow\downarrow$

9  $\uparrow\downarrow$   $\uparrow$   $\uparrow$

$s = \frac{1}{2}$

$S = 1$

2. 当交换原子中2个电子时, 下列说法错误的表述是 (A)

- A. 体系的波函数不变 (B) 体系的波函数变号 (C)  $|\Psi|^2$  不变

3. 顺磁性大小  $^{12}\text{C}_2$   $(\sigma_{1s})^2 (\sigma_{1s}^*)^2 (\sigma_{2s})^2 (\sigma_{2s}^*)^2 (\pi_{2py})^2 (\pi_{2pz})^2$

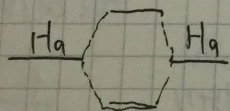
$B_2 > C_2$   $(\pi_{2py})^1 (\pi_{2py})^1$

4. 在自旋场作用下, 电子原子的能量与下列哪些量子数有关  $n, l, m$

如果没有自旋场, 则为  $n, l$

5. 在成键变分法中, 对两个原子形成化学键起主导作用的是 D

- (A) 重叠积分  $S_{ab}$  (B) 重叠积分平方  $S_{ab}^2$
- (C) 库仑积分  $H_{aa}$  (D) 交换积分  $H_{ab}$



6. 键级  $= \frac{1}{2} (\text{成键数} - \text{反键数})$

7. 若坐标算符取坐标本身, 动量算符应写成 (以一维运动为例)

$\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}$   $-i\hbar \frac{d}{dx}$

8. 对氢原子1s态, 在  $r$  核附近处有最大值, 径向波函数在  $r$  为  $a_0$  处有极大值