



# 结构化学习题参考答案



2025/4/16





## 14. 碳原子的基谱项及激发态 $p^1d^1$ 的所有可能的谱项。

解: (1)C  $2p^2$   $\begin{array}{ccc} 1 & 0 & -1 \end{array}$  ,  $L=1$ ,  $S=1$ ,  $J=2,1,0$ ,



半充满前,  $J$ 值越小能级越低。所以基谱支项为 ${}^3P_0$

(2)  $p^1d^1$  :

由 $l_1=1$ ,  $l_2=2$ , 得  $L=3,2,1$ ;

由 $s_1=1/2$ ,  $s_2=1/2$ , 得  $S=1,0$

则 $np^1nd^1$ 的光谱项为 ${}^3F$ ,  ${}^3D$ ,  ${}^3P$ ,  ${}^1F$ ,  ${}^1D$ ,  ${}^1P$



15. 确定Cr, Cu, Br的基谱支项。

**24Cr**  $4s^1 3d^5$

m	0	2	1	0	-1	-2
	↑	↑	↑	↑	↑	↑

$S=3, L=0, J=3$

基谱项  $^7S_3$

**29Cu**  $4s^1 3d^{10}$

$S=1/2, L=0, J=1/2$

基谱项  $^2S_{1/2}$



$S=1/2, L=1, J=3/2$

基谱项  ${}^2P_{3/2}$



## 6. 已知 $^{44}\text{Ru}$ 的基谱支项为 $^5F_5$ , 确定Ru的基组态。

解:  $^{44}\text{Ru}$   $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^6$

(1)  $5s^2 4d^6 \rightarrow$

m	0	2	1	0	-1	-2
	$\boxed{\uparrow \downarrow}$	$\boxed{\uparrow \downarrow}$	$\boxed{\uparrow}$	$\boxed{\uparrow}$	$\boxed{\uparrow}$	$\boxed{\uparrow}$

$5s$                            $4d$

$$L = \sum m_i = 2, \quad S = \sum m_{si} = 2, \quad J = 4, 3, 2, 1, 0$$

超过半充满, 基谱项为  $^5D_4$



(2)  $5s^14d^7 \rightarrow$

m	0	2	1	0	-1	-2
	↑	↑↓	↑↓	↑	↑	
	5s		4d			

$$L = \sum m_i = 3, \quad S = \sum m_{si} = 2, \quad J = 5, 4, 3, 2, 1$$

超过半充满，基谱项为  ${}^5F_5$

综上可确定Ru的基组态为：

$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^6 4d^7 5s^1$

填空题 6分



光谱支项 $^3D_2$ 所表征的状态中，原子的轨道角动量为 [Blank 1]，原子的自旋角动量为 [Blank 2]，原子的总角动量为 [Blank 3]。



# 结构化学期中考试

**2025年4月23日上午 9: 55 - 11: 30 (共95分钟)**

考试范围：前三章

考试题型：

- 一. 选择题（13题，共26分）
- 二. 填充题（9题，共38分）
- 三. 计算题和简述题（3题，共36分）