

1.原子中设轨道角动量量子数 $L=2$, 问: (1) $L_x^2+L_y^2$ 的极小值是什么? (2) $L_x^2+L_y^2$ 的极大值是什么? (3) 设 $M_L=1$, 则 $L_x^2+L_y^2=?$ (4) 从这里能够确定 L_x 和 L_y 的值吗?

2.钙原子 ($Z=20$) 基态的电子组态是 $4s4s$, 若其中一个电子被激发到 $5s$ 态 (中间有 $3d$ 和 $4p$ 态), 当它由 $4s5s$ 组态向低能态直至基态跃迁时, 可产生哪些光谱跃迁? 画出能级跃迁图 (钙原子能级属 耦合, 三重态为正常次序)。

3.与银的单晶表面平行的原子层间距为 0.20388nm , 试计算对波长为 0.17892nm 的 X 射线发生衍射的布拉格角. 如果这是一个用来测量 X 射线波长的实验, 那么为了保证波长的最后一位数字的有效性, 测量布拉格角的精确度必须为多少?

4.给出电子态 $1s^2 2s^2 2p^5 3p^1$ 在 L-S 耦合下形成的所有的原子态, 并用相应的原子态符号表示。

答案:

1.解:

$$\because L=2, M_L=\pm 2, \pm 1, 0 \quad \therefore L_z=\pm 2\hbar, \pm \hbar, 0$$

$$|L|^2=L(L+1)\hbar^2=6\hbar^2 \quad L_{z\max}=2\hbar \quad L_{z\min}=0.$$

$$\text{又: } |L|^2=L_z^2+L_y^2+L_x^2 \quad \therefore L_x^2+L_y^2=|L|^2-L_z^2 \quad (2 \text{ 分})$$

$$(1) (L_x^2+L_y^2)_{\min}=|L|^2-L_{z\max}^2=(6-4)\hbar^2=2\hbar^2 \quad (2 \text{ 分})$$

$$(2) (L_x^2+L_y^2)_{\max}=|L|^2-L_{z\min}^2=(6-0)\hbar^2=6\hbar^2 \quad (2 \text{ 分})$$

$$(3) L=2, M_L=1, \text{ 则 } L_z=\hbar$$

$$\text{则 } L_x^2+L_y^2=|L|^2-L_z^2=(6-1)\hbar^2=5\hbar^2 \quad (2 \text{ 分})$$

$$(4) \text{ 从这里只能确定 } L_x^2+L_y^2 \text{ 的值, 而不能确定 } L_x \text{ 和 } L_y \text{ 的值.} \quad (2 \text{ 分})$$

----(10 分)

2.解:

可能的原子态: (4 分)

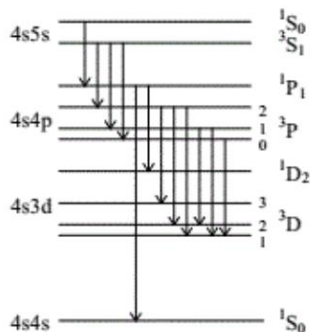
$4s4s: {}^1S_0$;

$4s3d: {}^1D_2, {}^3D_{3,2,1}$;

$4s4p: {}^1P_1, {}^3P_{2,1,0}$;

$4s5s: {}^1S_0, {}^3S_1$ 。

能级跃迁图: (6 分)



----(10 分)

3.解::

利用布拉格条件,可得

$$\sin\theta = \frac{n\lambda}{2d} = \frac{n \times 0.17892}{2 \times 0.20388} = 0.43879n. \quad (4 \text{ 分})$$

$$\text{可取 } n=1,2, \text{ 于是有 } \theta_1 = 26^\circ 2' \text{ 和 } \theta_2 = 61^\circ 21'. \quad (2 \text{ 分})$$

$$\text{对上式取微分, 可得: } \cos\theta d\theta = \frac{nd\lambda}{2d}. \quad (2 \text{ 分})$$

$$\text{在将 } \frac{n}{2d} = \frac{\sin\theta}{\lambda} \text{ 代入上式, 即得: } d\theta = \tan\theta \frac{d\lambda}{\lambda}. \quad (2 \text{ 分})$$

$$\text{按题意, 要求波长最后一位数字精确, 即要求 } \frac{d\lambda}{\lambda} \approx 2 \times 10^{-5}$$

$$\text{因此测量 } \theta \text{ 的精确度分别为 } 0.04' \text{ 和 } 0.13'. \quad (2 \text{ 分})$$

----(12 分)

4.解:

由于 $2p^5$ 与 $2p^1$ 互补, 故 $1s^2 2s^2 2p^5$ 形成的谱项与 $1s^2 2s^2 2p^1$ 是相同的, 所以题中的电子组态化为 $1s^2 2s^2 2p^1 3p^1$. (5 分)

原子态由 $2p^1 3p^1$ 决定, $l_1=l_2=1, s_1=s_2=1/2$, 在 $L-S$ 耦合下有: $L=2, 1, 0; S=1, 0$; 可形成的原子态为

$$^3S_1, \quad ^3P_{2, 1, 0}, \quad ^3D_{3, 2, 1}, \quad ^1S_0, \quad ^1P_1, \quad ^1D_2 \quad (5 \text{ 分})$$