

1 Аналітичні розрахунки

Задача №1 Після опромінювання атома гідрогену, який перебуває в основному стані, світлом з довжиною хвилі λ електрон переходить у збуджений стан з $n = 3$. Знайти значення λ .

Задача №2 Довести, що середня потенціальна енергія гідрогеноподібного атома в основному стані становить $\langle U \rangle = -Z^2$ (в Хартрі).

Задача №3 Довести, що середня кінетична енергія гідрогеноподібного атома в основному стані становить $\langle T \rangle = \frac{Z^2}{2}$.

Задача №4 Для основного стану атома гідрогену знайти ймовірність знаходження електрона усередині сфери радіусом 0.53 пм.

Задача №5 Енергія іонізації атома гелію дорівнює 24,58 еВ. Знайдіть константу екраниування σ одного електрона іншим.

2 Комп'ютерні розрахунки

Задача №6 Використайте метод RHF та базис STO-3G. Побудуйте орбіталі атома Ne (Неону) та запишіть їх аналітичний вигляд через базисні функції. Знайдіть RDF, запишіть його аналітичний вигляд через знайдені орбіталі та наведіть графік.