

Индивидуальное задание № 4

Уравнение Шредингера. Операторы. Атом водорода. Многоэлектронные атомы

Вариант № 1

1. Коэффициент прохождения электронов через низкий потенциальный барьер равен коэффициенту отражения. Определите, во сколько раз кинетическая энергия электронов больше высоты потенциального барьера. [1,03]
2. Атом водорода находится в основном состоянии. Собственная функция, описывающая состояние электрона в атоме, имеет вид $\psi(x) = C \exp(-r/a)$, где C – некоторая постоянная. Найдите из условия нормировки постоянную C . [$C = 1/\sqrt{\pi a^3}$]
3. Определите возможные значения проекции орбитального момента импульса электрона в атоме на направление внешнего магнитного поля. Электрон находится в d -состоянии. [$0; \pm 1,05 \cdot 10^{-34}$ Дж·с; $\pm 2,11 \cdot 10^{-34}$ Дж·с]
4. Найдите максимально возможный полный момент импульса и соответствующее спектральное обозначение термина атома с электронной конфигурацией $1s^2 2s^2 2p^3 d$. [$2\sqrt{5} \hbar; {}^3F_4$]

Вариант № 2

1. Частица в бесконечно глубоком одномерном потенциальном ящике шириной L находится в возбужденном состоянии ($n = 2$). Определите, в каких точках интервала ($0 < x < L$) плотность вероятности $|\psi(x)|^2$ нахождения частицы максимальна и минимальна. Постройте график. [Максимум – при x_1 и $x_3 = 3L/4$; минимум – при $x_2 = L/2$]
2. Зная, что нормированная собственная волновая функция, описывающая основное состояние электрона в атоме водорода, имеет вид $\psi(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-r/a}$, найдите среднее расстояние $\langle r \rangle$ электрона от ядра. [$\langle r \rangle = 3a/2$]
3. Электрон в атоме водорода находится в p -состоянии. Определите возможные значения числа j и возможные значения (в единицах \hbar) полного момента импульса L_j электрона. Постройте соответствующие векторные диаграммы. [$1/2$ и $3/2$; $\frac{\sqrt{3}}{2} \hbar$ и $\frac{\sqrt{15}}{2} \hbar$]
4. Выпишите спектральные символы термов двухэлектронной системы, состоящей из одного p -электрона и одного d -электрона.

$$[{}^1P_1; {}^1D_2; {}^1F_3; {}^3P_{0,1,2}; {}^3D_{1,2,3}; {}^3F_{2,3,4}]$$

Вариант № 3

1. Кинетическая энергия электрона в два раза превышает высоту потенциального барьера. Определите коэффициент отражения и коэффициент прохождения электронов на границе барьера. [0,0295; 0,97]
2. Атом водорода находится в основном состоянии. Вычислите вероятность P того, что электрон находится внутри области, ограниченной сферой с радиусом, равным боровскому радиусу a . Волновую функцию считать известной: $\psi_{100}(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-\frac{r}{a}}$. [$P = 1 - 5/e^2 = 0,324$]
3. Электрон в атоме водорода находится в f -состоянии. Определите возможные значения числа j и возможные значения (в единицах \hbar) полного момента импульса L_j электрона. Постройте соответствующие векторные диаграммы. [$5/2$ и $7/2$; $\frac{\sqrt{35}}{2}\hbar$ и $\frac{\sqrt{63}}{2}\hbar$]
4. Найдите максимально возможный полный момент импульса и соответствующее спектральное обозначение терма атома натрия, валентный электрон которого имеет главное квантовое число $n = 4$. [$\frac{\sqrt{63}}{2}\hbar$; ${}^2F_{7/2}$]

Вариант № 4

1. Волновая функция частицы, находящейся в одномерной прямоугольной потенциальной яме шириной L , задана функцией $\psi(x) = Ax(L - x)$. Убедившись в том, что эта функция удовлетворяет граничным условиям, найдите нормировочный коэффициент. [$A = 30^{1/2}L^{-5/2}$]
2. Атом водорода находится в основном состоянии. Вычислите отношение вероятности того, что электрон находится вне области, ограниченной сферой с радиусом, равным боровскому радиусу a , к вероятности того, что электрон находится внутри области, ограниченной сферой с радиусом, равным боровскому радиусу a . Волновую функцию считать известной: $\psi_{100}(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-\frac{r}{a}}$. [$\delta = \frac{5/e^2}{1 - 5/e^2} = 2,09$]
3. Вычислите полную энергию и орбитальный момент импульса электрона, находящегося в $2p$ -состоянии в атоме водорода. [$-3,4$ эВ; $1,48 \cdot 10^{-34}$ Дж·с]
4. Атом находится в состоянии со спиновым числом $S = 1$, имея полный момент импульса $\hbar\sqrt{6}$. Угол между спиновым и полным моментами импульса равен $54,7^\circ$. Напишите спектральный терм этого состояния. [3D_2]

Вариант № 5

1. На пути электрона с дебройлевской длиной волны 0,1 нм находится потенциальный барьер высотой 120 эВ. Определите длину волны де Бройля после прохождения барьера. [218 пм]
2. Атом водорода находится в основном состоянии. Найдите отношение вероятности того, что электрон находится внутри области, ограниченной сферой с радиусом, равным боровскому радиусу a , к вероятности того, что электрон находится вне области, ограниченной сферой с радиусом, равным боровскому радиусу a . Волновую функцию считать известной:

$$\Psi_{100}(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-\frac{r}{a}}. \left[\delta = \frac{e^2}{5} - 1 = 0,478 \right]$$

3. Определите возможные значения орбитального момента количества движения электрона в возбужденном атоме водорода, если атом в основном состоянии поглотил фотон с энергией 10,2 эВ. [0; 1,41ħ]
4. Найдите максимально возможный полный момент импульса и соответствующее спектральное обозначение терма атома натрия, валентный электрон которого имеет главное квантовое число $n = 3$.

$$\left[\frac{\sqrt{35}}{2} \hbar; {}^2D_{5/2} \right]$$

Вариант № 6

1. Частица находится в бесконечно глубоком одномерном потенциальном ящике в основном состоянии. Какова вероятность нахождения частицы в левой крайней трети ящика? [0,195]
2. Волновая функция, описывающая $2s$ -состояние электрона в атоме водорода, имеет вид: $\Psi_{200}(\rho) = \frac{1}{4\sqrt{2\pi a^3}} (2 - \rho) \exp(-\frac{\rho}{2})$, где $\rho = r/a$ – расстояние электрона от ядра, выраженное в атомных единицах. Определите расстояние ρ от ядра, на котором вероятность обнаружить электрон имеет максимум. [$\rho = 0,76$ и $5,24$]
3. Каковы возможные значения полного момента импульса электрона, находящегося в d -состоянии? Чему при этом равны углы между спиновым и орбитальными моментами импульса электрона? [$\frac{\sqrt{35}}{2} \hbar; \frac{\sqrt{15}}{2} \hbar; 61^\circ 51'; 135^\circ$]
4. Найдите возможные типы термов атома, электронная конфигурация незаполненной подоболочки которого nd^2 . [${}^1S_0, {}^1D_2, {}^1G_4, {}^3P_{0,1,2}, {}^3F_{2,3,4}$]

Вариант № 7

1. Электрон находится в бесконечно глубоком одномерном потенциальном ящике шириной L . Определите среднее значение координаты $\langle x \rangle$ электрона ($0 < x < L$). [$\langle x \rangle = L/2$]
2. Волновая функция, описывающая $2s$ -состояние электрона в атоме водорода, имеет вид:
$$\psi_{200}(\rho) = \frac{1}{4\sqrt{2\pi a^3}}(2 - \rho)\exp\left(-\frac{\rho}{2}\right)$$
, где ρ – расстояние электрона от ядра, выраженное в атомных единицах ($\rho = r/a$, где a – первый боровский радиус). Определите расстояние ρ от ядра, на котором вероятность обнаружить электрон равна нулю. [$\rho = 0, 2$ и ∞]
3. Определите угол между орбитальными моментами импульсов двух электронов, один из которых находится в d -состоянии, другой – в f -состоянии, если искомый угол максимальный. [$160^\circ 35'$]
4. Атом находится в состоянии со спиновым квантовым числом $S = 1$, имея полный момент импульса $\sqrt{6}\hbar$. Угол между спиновым и полным моментами импульса атома $\vartheta = 54,7^\circ$. Напишите спектральный терм этого состояния. [3D_2]

Вариант № 8

1. Моноэнергетический поток электронов с энергией 100 эВ падает на низкий потенциальный барьер бесконечной ширины. Определите высоту потенциального барьера, если известно, что 4 % падающих на барьер электронов отражается. [55,6 эВ]
2. Электрон в атоме водорода описывается в основном состоянии волновой функцией
$$\psi_{100}(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-\frac{r}{a}}$$
. Определите вероятность P пребывания электрона в атоме внутри сферы с радиусом $2a$. [$P = 1 - 15e^{-4} = 0,726$]
3. Найдите возможные значения полных моментов импульса атома, находящегося в состоянии 4P . [$\frac{\sqrt{35}}{2}\hbar; \frac{\sqrt{15}}{2}\hbar; \frac{\sqrt{3}}{2}\hbar$]
4. Найдите максимально возможный полный момент импульса и соответствующее спектральное обозначение терма атома натрия, валентный электрон которого имеет главное квантовое число $n = 5$.

$$\left[\frac{3\sqrt{11}}{2}\hbar; {}^2G_{9/2}\right]$$

Вариант № 9

1. Вычислите отношение вероятностей P_1/P_2 нахождения электронов на первом и втором энергетических уровнях в интервале $L/4$, равноудаленном от стенок одномерной потенциальной ямы шириной L с бесконечно высокими стенками. [5,22]
2. Вычислите среднее значение кинетической энергии для $1s$ -электрона в атоме водорода. [$\langle T \rangle = me^4/(2\hbar^2)$]
3. Определите угол между орбитальными моментами импульсов двух электронов, один из которых находится в d -состоянии, другой – в f -состоянии, если искомый угол минимален. [45°]
4. Определите максимально возможный орбитальный момент импульса атома в состоянии, мультиплетность которого равна пяти и кратность вырождения по J – семи. Напишите спектральное обозначение соответствующего терма. [$\hbar\sqrt{30}$; 5H_3]

Вариант № 10

1. Частица массой 10^{-19} кг со скоростью 20 м/с движется в положительном направлении оси x , встречая на своем пути бесконечно широкий прямоугольный потенциальный барьер высотой 100 эВ. Определите вероятность отражения волн де Бройля от этого барьера. [0,146]
2. Волновая функция частицы массой m для основного состояния в одномерном потенциальном поле $U(x) = A \exp(-\alpha x^2)$, где A и α – некоторые постоянные. Найдите с помощью уравнения Шредингера постоянную α и энергию E частицы в этом состоянии. [$\alpha = \frac{m\omega}{2\hbar}$; $E = \frac{\hbar\omega}{2}$, где $\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$]
3. Вычислите для $1s$ -электрона среднюю величину r^2 . [$\langle r^2 \rangle = 3a_0^2$]
4. Найдите кратность вырождения состояния 2P с максимально возможным полным моментом импульса. [4] [Пять d -электронов]

Вариант № 11

1. Частица в одномерной прямоугольной потенциальной яме шириной L с бесконечно высокими стенками находится в возбужденном состоянии ($n = 2$). Определите вероятность обнаружения частицы в области $3L/8 \leq x \leq 5L/8$. [0,091]
2. Определите среднее значение функции $1/r$ для $1s$ -электрона в атоме водорода. [$\langle 1/r \rangle = 1/a$]
3. Атом находится в состоянии со спиновым числом $S = 1$, имея полный момент импульса $\hbar\sqrt{6}$. Угол между спиновым и полным моментами импульса равен $54,7^\circ$. Напишите спектральный терм этого состояния. [3D_2]
4. Выпишите спектральные символы термов двухэлектронной системы, состоящей из одного p -электрона и одного d -электрона.

$$[{}^1P_1; {}^1D_2; {}^1F_3; {}^3P_{0,1,2}; {}^3D_{1,2,3}; {}^3F_{2,3,4}]$$

Вариант № 12

1. Частица массой m находится в одномерной прямоугольной потенциальной яме шириной L с бесконечно высокими стенками. Оцените с помощью соотношения неопределенностей минимально возможную энергию частицы. Принять, что $\Delta x \approx L$; $\Delta p_x \approx p$. [$E_{\min} \approx \hbar^2 / (2mL^2)$]
2. Атом водорода находится в основном состоянии. Вычислите вероятность P того, что электрон находится вне области, ограниченной сферой с радиусом, равным боровскому радиусу a . Волновую функцию считать известной: $\psi_{100}(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-r/a}$. [$P = 5/e^2 = 0,676$]
3. Спиновый момент импульса двухэлектронной системы определяется квантовым числом $S=1$. Найдите угол между спиновыми моментами импульса обоих электронов. [$71^\circ 31'$]
4. Найдите максимально возможный орбитальный момент импульса атома, находящегося в состоянии, мультиплетность которого пять и кратность вырождения по J равна семи. Укажите спектральный символ этого состояния. [$\hbar\sqrt{30}$; 5H_3]

Вариант № 13

1. Электрон с энергией 4,9 эВ движется в положительном направлении оси x , встречая на своем пути прямоугольный барьер высотой 5 эВ. При какой ширине барьера вероятность прохождения электрона через него будет равна 0,2? [0,495 нм]
2. Зная, что нормированная собственная волновая функция, описывающая основное состояние электрона в атоме водорода, имеет вид $\psi(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-r/a}$, найдите средний электростатический потенциал $\langle \phi_0 \rangle$, создаваемый электроном в центре атома водорода.
3. Вычислите орбитальный момент импульса электрона, находящегося в атоме в s -состоянии. [0]
4. Найдите кратность вырожденных состояний 3D и 4F с максимально возможными значениями полного момента импульса. [7; 10]

Вариант № 14

1. Электрон в одномерной прямоугольной потенциальной яме шириной L с бесконечно высокими стенками находится в возбужденном состоянии ($n = 4$). Определите вероятность обнаружения электрона в первой четверти ямы. [0,25]
2. Частица находится в сферически-симметричном потенциальном поле в стационарном состоянии $\psi = (1/\sqrt{2\pi a})e^{-r/a}/r$, где r – расстояние от центра ядра. Найдите среднее значение r . [$\langle r \rangle = a/2$]
3. Вычислите орбитальный момент импульса электрона, находящегося в атоме в p -состоянии. [$1,41 \cdot 10^{-34}$ Дж·с]
4. Напишите спектральное обозначение терма, кратность вырождения которого равна семи, а квантовые числа L и S связаны соотношением $L = 3S$. [3F_3]

Вариант № 15

1. При каком отношении высоты потенциального барьера к энергии электрона, падающего на барьер, коэффициент отражения равен 0,5? [0,971]
2. Атом водорода находится в основном состоянии. Собственная функция, описывающая состояние электрона в атоме, имеет вид $\psi(x) = C \exp(-r/a)$, где C – некоторая постоянная. Найдите из условия нормировки постоянную C . [$C = 1/\sqrt{\pi a^3}$]
3. Атом водорода, находившийся первоначально в основном состоянии, поглотил квант света с энергией 10,2 эВ. Определите изменение орбитального момента импульса электрона. [$1,48 \cdot 10^{-34}$ Дж·с]
4. Выпишите спектральные символы термов двухэлектронной системы, состоящей из одного p -электрона и одного d -электрона.
[${}^1P_1; {}^1D_2; {}^1F_3; {}^3P_{0,1,2}; {}^3D_{1,2,3}; {}^3F_{2,3,4}$]