

### 10.1. Двухэлектронный атом

10.1.1. Прямым вариационным методом найти энергию основного состояния двухэлектронного атома с зарядом ядра  $Z$ , используя пробную функцию в виде произведения  $1s$ -одноэлектронных кулоновских функций с эффективным зарядом  $\zeta = Z - \sigma$ , играющим роль вариационного параметра.

Вычислить отношение энергии взаимодействия электронов между собой  $U_{ee}$  и энергии их взаимодействия с ядром  $U_{en}$ .

10.1.2. Найти уровни энергии и потенциалы ионизации возбужденных состояний гелиеподобных атомов в приближении, в котором взаимодействие между электронами эффективно учитывается как экранирование заряда ядра электроном, находящимся в  $1s$ -состоянии.

10.1.3. Рассчитать энергетические уровни и потенциалы ионизации синглетного и триплетного  $2S$ -состояний двухэлектронного атома (или иона), рассматривая взаимодействие между электронами как возмущение.

Сравнить полученные результаты с экспериментальными данными для атома гелия ( $I_{\text{He}}(2^3S) \approx 4.76$  эВ,  $I_{\text{He}}(2^1S) \approx 3.97$  эВ) и иона лития  $\text{Li}^+$  ( $I_{\text{Li}^+}(2^3S) \approx 16.5$  эВ).

10.1.4. Найти среднюю энергию двухэлектронного иона с зарядом ядра  $Ze$  в состоянии, описываемом волновой функцией вида

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = C[e^{-\alpha r_1 - \beta r_2} + e^{-\beta r_1 - \alpha r_2}].$$

Воспользовавшись полученным выражением и выбрав значения параметров  $\alpha = 1$ ,  $\beta = 0.25$ , доказать существование стабильного иона водорода  $\text{H}^-$ .

10.1.5. (обязательная) Показать, что у гелиеподобных атомов все устойчивые возбужденные состояния (т.е. стабильные относительно распада на соответствующий водородоподобный атом и свободный электрон) имеют электронную конфигурацию  $1snl$ , т.е. один из электронов обязательно находится в основном,  $1s$ -состоянии.

10.1.6. Определить смещение энергетических уровней атома вследствие движения ядра. Вычислить величину смещения в атоме гелия для триплетного и синглетного состояний  $1snr$ , воспользовавшись собственными функциями в форме водородоподобных функций отдельных электронов с эффективным зарядом.

10.1.7. Найти магнитную восприимчивость  $\chi_{\text{ат}}$  атома гелия в основном состоянии, используя приближенный вид волновой функции. Рассчитать магнитную восприимчивость  $1 \text{ см}^3$  газа из атомов гелия при нормальных условиях и сравнить ее с экспериментальным значением, равным  $-8.6 \cdot 10^{-11}$ .

10.1.8. Используя известное значение  $\beta_0 = \frac{9}{2} a_0^3 = \frac{9}{2}$  ат. ед. поляризуемости атома водорода в основном состоянии, получить приближенное значение поляризуемости основного состояния атома гелия:

- полностью пренебрегая взаимодействием электронов друг с другом;
- учитывая взаимодействие между электронами, результативно, как частичное экранирование заряда ядра (эффективный заряд выбрать равным  $Z_{\text{эфф}} = 26/17$ ).

Рассчитать диэлектрическую проницаемость гелия при нормальных условиях и сравнить с экспериментальным значением.

10.1.9. Учитывая, что обменный интеграл для электронов на одном атоме  $J \sim 0.5$  эВ (для конфигурации  $(1s)^1(2s)^1$  в атоме гелия  $J \sim 0.5$  эВ), оценить температуру Кюри ферромагнетиков.

10.1.10. **(обязательная)** Найти энергию основного состояния системы двух тождественных частиц с гамильтонианом

$$H = \frac{1}{2} [\vec{p}_1^2 + \vec{r}_1^2 + \vec{p}_2^2 + \vec{r}_2^2] + \frac{k}{2} (\vec{r}_1 - \vec{r}_2)^2.$$

- Найти точное решение уравнения Шредингера.
- Решить задачу с помощью приближения Хартри.

## 10.2. Сложные атомы

10.2.1. **(обязательная)** В текущей версии русскоязычной Википедии (13.10.2014) в статье «Спектральный терм» сказано:

«Спектральный терм или электронный терм атома, молекулы или иона — конфигурация (состояние) электронной подсистемы, определяющая энергетический уровень».

[https://ru.wikipedia.org/wiki/%D0%A1%D0%BF%D0%B5%D0%BA%D1%82%D1%80%D0%B0%D0%BB%D1%8C%D0%BD%D1%8B%D0%B9\\_%D1%82%D0%B5%D1%80%D0%BC](https://ru.wikipedia.org/wiki/%D0%A1%D0%BF%D0%B5%D0%BA%D1%82%D1%80%D0%B0%D0%BB%D1%8C%D0%BD%D1%8B%D0%B9_%D1%82%D0%B5%D1%80%D0%BC)

Найти (по возможности все) ошибки в этом определении.

10.2.2. Оценить значения потенциалов ионизации основного  $^2S$ - (электронная конфигурация  $(1s)^2 2s$ ) и первого возбужденного  $^2P$ -состояний (электронная конфигурация  $(1s)^2 2p$ ) литиеподобного атома, считая, что взаимодействие электронов, находящихся в основном состоянии, с «возбужденным» электроном сводится к экранировке на две величины заряда ядра.

10.2.3. Найти орбитальные волновые функции возможных состояний системы трех эквивалентных  $p$ -электронов.

10.2.4. Определить основные термы атомов N, Cl и ионов  $N^+$ ,  $Cl^+$ .

10.2.5. (**обязательная**) Найти возможные термы конфигураций  $(np)^2$ ,  $(np)^3$ ,  $(nd)^2$  и  $(nd)^3$ .

10.2.6. Каковы мультиплетность  $2S+1$  и полный орбитальный момент  $L$  основного состояния атома с электронной конфигурацией  $(nl)^k$  сверх заполненных оболочек?

10.2.7. Найти число состояний, связанных с конфигурацией  $(nl)^x$ .

10.2.8. Указать атомные термы, возможные для электронной конфигурации  $(nl)^2$ .

10.2.9. Найти пределы изменения множителя Ланде  $g$  при заданных значениях  $L$  и  $S$ .

### 10.3. Модель Томаса-Ферми

10.3.1. (**обязательная**) В модели Томаса - Ферми вычислить отношение энергии взаимодействия электронов между собой  $U_{ee}$  и энергии их взаимодействия с ядром  $U_{en}$  в атомах с  $Z \gg 1$ .

10.3.2. В рамках модели Томаса - Ферми для нейтрального атома найти зависимость от  $Z$

- a) среднего расстояния между электроном и ядром;
- b) средней энергии кулоновского взаимодействия между электронами в атоме;
- c) средней кинетической энергии электронов;
- d) энергии, необходимой для полной ионизации атома;
- e) средней скорости электронов в атоме;
- f) среднего момента количества движения электрона;
- g) среднего радиального квантового числа электрона.

10.3.3. Выразить приближенно энергию атома через электронную плотность  $\rho(r)$  согласно модели Томаса - Ферми.

В случае атома лития сравнить полученные значения с экспериментальными:  $I(^2S) = 5.37$  эВ и  $I(^2P) = 3.52$  эВ

10.3.4. Оценить порядок величины поляризуемости томас-фермиевской модели атома, т.е. отношения дипольного момента  $d$  "томас-фермиевских" электронов, возникающего под действием приложенного электрического поля, к величине напряженности  $E$ .

Сравнить со вкладом в поляризуемость атома валентных электронов.