

1. 两个 p 电子组成的组态中, L, S 可能的取值有哪些。(考虑自旋轨道耦合, Hund' s rule 的基态, 简并情况, 可以从自旋平行, 反平行两个方面来讨论)

2. 讨论氧分子轨道相互作用的情况, 及其对成键反键的影响。(氧原子的八个电子: $1s^2 2s^2 2p^4$)

假设交换作用可以去除体系自旋的简并度, 请讨论基态的总自旋。

3. Ce 在化合物中一般显示 3 价。如果将物质升到足够高温度, 其磁化率的贡献主要来自独立 Ce 离子提供的居里磁化率。请计算这种情况下 Ce 离子的磁矩(以玻尔磁子为单位)。

4. 含铀的化合物作为重费米子体系或混合价态体系而受到很大关注, 但要判断化合物中存在 U^{3+} 还是 U^{4+} 是非常困难的。如果将样品进行高温磁化率的测量(显示居里行为), 可以得到有效磁矩是 $3.6 \mu_B$ (准确度 1%), 是否可以依此判断样品中 U 的价态。

5. 请具体分析过渡金属中 Goodenough-Kanamori rule :

1st rule: TM d orbital # > 5 \rightarrow AFM ; 2nd rule: TM d orbital # < 5 \rightarrow FM

