

## Héjfizika zárthelyi II.

1. Az  $O_2$  molekula alapállapotának jele  ${}^3\Sigma_g^-$ . Milyen kvantumszámok olvashatóak le ebből?
2. Adja meg a  $g$  Landé faktor értékeit egy atom (pl.  $Fe$ )  ${}^5D$  állapotaira!
3. A  $He$  atom variációs hullámfüggvényét

$$\Phi(\mathbf{r}_1, s_1, \mathbf{r}_2, s_2) = \frac{u(\alpha|\mathbf{r}_1)u(\beta|\mathbf{r}_2) + u(\beta|\mathbf{r}_1)u(\alpha|\mathbf{r}_2)}{[2(1+S^2)]^{\frac{1}{2}}} \chi(s_1, s_2)$$

$$u(\alpha|\mathbf{r}) = \left(\frac{\alpha^3}{\pi}\right)^{\frac{1}{2}} e^{-\alpha r}, \quad u(\beta|\mathbf{r}) = \left(\frac{\beta^3}{\pi}\right)^{\frac{1}{2}} e^{-\beta r}$$

$$S = \int d^3r u(\alpha|r)u(\beta|r) = 8 \frac{(\alpha\beta)^{\frac{3}{2}}}{(\alpha+\beta)^3}$$

alakban vesszük fel. Mutassa meg, hogy a potenciális energia átlagértéke ebben az állapotban:

$$\langle \Phi | -\frac{Z}{r_1} - \frac{Z}{r_2} | \Phi \rangle = -Z(\alpha + \beta)$$

4. A  $H_2^+$  molekulaion egy gerjesztett állapot variációs hullámfüggvénye elliptikus koordinátákban:

$$\Psi(\mathbf{r}) = e^{-c\xi\eta}.$$

Írja fel az

$$E[\Psi] = \frac{\langle \Psi | H | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle}$$

energiafunkcionált a  $c$  variációs paraméter függvényében!