Atom- és molekulafizika gyakorlat

Gyakvezető: Farkas Ádám László, faradamla@gmail.com, 5.80

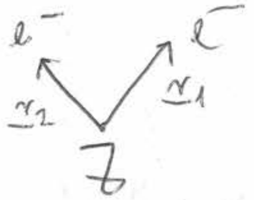
Követelmény: 2 ZH

HF-ok lesznek, személyesen is be kell mutatni őket

1. ZH: perturbációszámítás, szünet előtti utolsó órán lesz
2. ZH: spinösszeadás

Lapot lehet használni ZH-n, ha nincs írva semmi!

1. óra



$$H = H_0 + H_1$$

$$H_0 = H(1) + H(2)\ ; \quad H(1) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_i - \frac{Ze_0^2}{r_i}$$

$$H_1 = \frac{e_0^2}{|\underline{r}_1 - \underline{r}_2|} \qquad (2e^- \text{ taszítása})$$

He alapállapota: $(1s)^2$ $\qquad {}^{1}S$ ($\leftarrow 2S+1$)

$\underline{L}: L=0 \quad (\underline{L} = \underline{L}_1 + \underline{L}_2)$

Perturbálatlan sfv.: $\Phi(\overset{n}{1}\ \overset{l}{0}\ \overset{m}{0}|1)\cdot\Phi(1\,0\,0|2)\cdot {}^{1}\overset{\text{szinglett}}{X}(1,2) = \Psi_0$

melyik e^-

$^1\chi(1,2)$: spin op. sfv.

$$\underline{S} = \underline{S}_1 + \underline{S}_2 \quad {}^{1}\chi \xrightarrow{} S^2 \text{ s.é. } 0$$

$$^1\chi(1,2) = -^1\chi(2,1) \quad (\text{antiszimm.})$$

Elsőrendben keressük az alapáll.-i energiát

$$E_0 = E_0^{(0)} + E_0^{(1)}$$

$$E_0^{(0)} = \langle \Psi_0 | \underbrace{H_0 | \Psi_0}_{E_0 \cdot \Phi_0} \rangle = \sum_{s_1, s_2} \int d^3 r_1 \int d^3 r_2 \; \phi_0^*(r_1) \phi_0^*(r_2) \, {}^1\chi^T(1,2) \cdot$$

$$\cdot \underbrace{(H(1) + H(2)) \cdot \phi_0(r_1) \cdot \phi(r_2)}_{E_0 \Phi_0} \cdot {}^1\chi(1,2) =$$

Kihasználjuk, hogy a spinh. fv. normált:

$$\sum_{s_1, s_2} {}^1\chi^T(1,2) \, {}^1\chi(1,2) = 1$$

$$= 2 \cdot \underbrace{\int d^3 \underline{r} \, \phi_0^*(\underline{r}) H_0 \cdot \phi_0(\underline{r})}_{-\frac{Z^2 e_0^2}{2 a_0}} \Rightarrow \boxed{E_0^{(0)} = -\frac{e_0^2 Z^2}{a_0}}$$

Elsőrendű korrekció:

$$E_0^{(1)} = \langle \Psi_0 | H_1 | \Psi_0 \rangle = \sum_{s_1, s_2} \int d^3 \underline{r}_1 \int d^3 \underline{r}_2 \; \phi_0^*(r_1) \, \phi_0^*(r_2) \, {}^1\chi^T(1,2) \cdot \frac{e_0^2}{|\underline{r}_1 - \underline{r}_2|} \cdot$$

$$\langle \phi(\underline{r}_1)\phi(\underline{r}_2)\,|\, {}^1\chi(1,2)\rangle = \left(e_0^2 \int d^3 r_1 \int d^3 r_2 \frac{|\varphi_0(r_1)|^2 |\varphi_0(r_2)|^2}{r_{12}} \right) =$$

(Coulomb - integrál)

$$= e_0^2 \int d\Omega_1 \int_0^\infty r_1^2 dr_1 \int d\Omega_2 \int_0^\infty r_2^2 dr_2 \, \underbrace{Y_0^{0*}(\vartheta_1,\varphi_1)}_{\frac{1}{\sqrt{4\pi}}} R_{10}(r_1) \cdot$$

$$\cdot Y_0^0(\vartheta_1,\varphi_1) R_{10}(r_1) \cdot \underbrace{Y_0^{0*}(\vartheta_2,\varphi_1)}_{\frac{1}{\sqrt{4\pi}}} \cdot R_{10}(r_2) \cdot Y_0^0(\vartheta_2,\varphi_2) \cdot R_{10}(r_2) \cdot$$

$$\cdot \underbrace{\sum_{l=0}^{\infty} \frac{4\pi}{2l+1} \cdot \frac{r_<^l}{r_>^{l+1}} \cdot \sum_{m=-l}^{l} Y_l^{m*}(\vartheta_1,\varphi_1) Y_l^m(\vartheta_2,\varphi_2)}_{\frac{1}{|\underline{r}_1 - \underline{r}_2|}} =$$

$\sim$: 3 gömbfv.-t nem szeretünk, mert csak 2-t tudunk eltüntetni a szög szerinti integrállal ($\to \delta_{...}$) $\Rightarrow$

$\Rightarrow$ a 3.-at behelyettesítjük $\frac{1}{\sqrt{4\pi}}$

$$= e_0^2 \cdot \frac{4\pi}{4\pi} \cdot \sum_{l=0}^{\infty} \underbrace{\frac{1}{2l+1}}_{1 \ (l=0 \text{ marad})} \sum_{m=-l}^{l} \int r_1^2 dr_1 \int r_2^2 dr_2 \cdot R_{10}^2(r_1) \cdot R_{10}^2(r_2) \cdot$$

$$\cdot \frac{r_<^l}{r_>^{l+1}} \cdot \delta_{l0} \cdot \delta_{m0} \cdot \delta_{l0} \cdot \delta_{m0} = e_0^2 \int_0^\infty r_1^2 dr_1 \int_0^\infty r_2^2 dr_2 \cdot$$

$$\cdot \frac{R_{10}^2(r_1) R_{10}^2(r_2)}{r_>} =$$

$$= e_0^2 \int r_1^2\, dr_1 \int r_2^2\, dr_2 \; \frac{e^{-\overbrace{\frac{2Zr_1}{a_0}}^{\equiv t_1}} \cdot e^{-\underbrace{\frac{2Zr_2}{a_0}}_{\equiv t_2}}}{r_>} \cdot \left(\frac{Z}{a_0}\right)^6 \cdot 16 =$$

$$= 16\, e_0^2 \left(\frac{Z}{a_0}\right)^6 \cdot \left(\frac{a_0}{2Z}\right)^5 \cdot \int_0^\infty t_1^2\, dt_1 \int_0^\infty t_2^2\, dt_2 \cdot \frac{e^{-(t_1+t_2)}}{t_>} =$$

$$= \frac{e_0^2 Z}{2a_0} \Bigg[\underbrace{\int_0^\infty dt_1 \int_{t_1}^\infty dt_2 \cdot \frac{t_1^2 t_2^2 e^{-(t_1+t_2)}}{t_2}}_{\forall\, t_2 > t_1 \text{-re}} +$$

$$+ \underbrace{\int_0^\infty dt_2 \int_{t_2}^\infty dt_1 \, \frac{t_1^2 t_2^2 e^{-(t_1+t_2)}}{t_1}}_{\forall\, t_1 > t_2 \text{-re}} \Bigg] \underset{\substack{t_1 \leftrightarrow t_2 \text{ csere miatt} \\ \to 2\times}}{=}$$

$$= \frac{e_0^2 Z}{a_0} \int_0^\infty dt_1\, t_1^2 \cdot e^{-t_1} \underbrace{\int_{t_1}^\infty t_2 \cdot e^{-t_2}\, dt_2}_{\left[e^{-t_2}(-1-t_2)\right]_{t_1}^{\infty}} = \frac{e_0^2 Z}{a_0} \int_0^\infty dt_1 \left(t_1^3 + t_1^2\right) \cdot$$

$$\cdot\, e^{-2t_1} \underset{x \equiv 2t_1}{=} \frac{e_0^2 Z}{a_0} \int_0^\infty \frac{dx}{2} \left(\frac{x^3}{8} + \frac{x^2}{4}\right) \cdot e^{-x} = \frac{e_0^2 Z}{a_0 \cdot 8} \int_0^\infty dx \left(\frac{x^3}{2} + x^2\right) e^{-x} =$$

$$= \frac{5}{8} \cdot \frac{e_0^2}{a_0} \cdot Z$$

$$\Rightarrow E_0^{(1)} \underbrace{(= C)}_{\text{Coulomb-integrál}} = \frac{5}{8} \cdot \frac{e_0^2}{a_0} \cdot Z$$

$$E_0 = -\left(Z^2 - \frac{5}{8} Z\right) \frac{e_0^2}{a_0}$$

---

2. óra

(HF ~~fak~~)

HF fakultatív, de aki 2 hf-et bead, a ZH-n 1-2 feladatot

1 $\boxed{\text{HF}}$ p_x és p_y pálya hogyan jön ki?

(~~⇔~~) gömbfv.-ekből

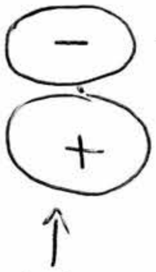
⇒ lineárkombináció

x és y ← d_{xy}

tükrözésre nem vált előjelet ↑

PROGRAMOT írni, ami ábrázolja a fv.-eket (1s, 2p, 3d)
(C-ben, Mathematicában)

~~HF~~ hogyan lehet mégis felrajzolni az s és p pályákat?
Mit ábrázolnak? (90%?)

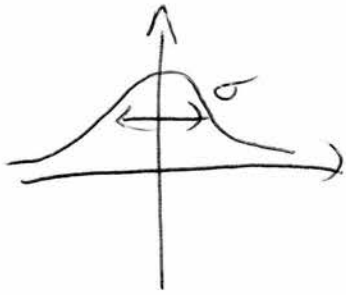


→ előjeleket is kell ábrázolni

↑ hol van ez a felület

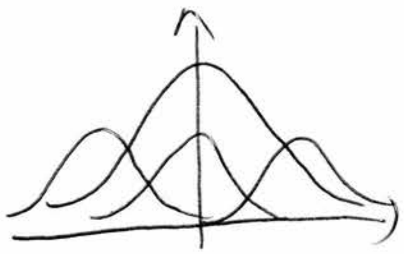
2 $\boxed{\text{HF}}$ H-szerű atomokra mi lenne, ha 1 db Gaussal számolnánk az alapállapotot?

a) csak σ paraméter (var. számítás)



$E_{1G}(\sigma_1)$

b) 3 Gauss-fv. összege



- $E_{3\sigma}(\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3)$
- $E_{5\sigma}$
- $E_{7\sigma}$
- $E_{9\sigma}$

$E_{egzakt} \longleftrightarrow$ összevetni

+ ábrázolás

$$E_0^{(1)} = \frac{5}{8}\frac{e_0^2 Z}{a_0}$$

$$E_0 = \left(Z^2 - \frac{5}{8}Z\right)\frac{e_0^2}{a_0}$$

$$J = E_{ion} = E_{He^+} - \underbrace{E_{He}}_{E_{alap}} = \left(\frac{Z^2}{2} - \frac{5}{8}Z\right)\frac{e_0^2}{a_0}$$

He^+ $\quad -\frac{Z^2}{2}\frac{e_0^2}{a_0}$

He alap

Áll.: Ha a He atom mindkét e^--ja fel lenne gerjesztve, az nagyobb lenne, mint az ion. energia

⇓

Egyik elektron gerjesztve van, a másik alapáll.-ban (1s)

$$\begin{array}{cc} & \begin{matrix} n & l & m \end{matrix} \\ a & \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\ b & \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & -1 \\ 2 & 1 & 0 \\ 2 & 1 & 1 \end{pmatrix} \end{array}$$

(a és b állapotok)

ezek degeneráltak ⇒ pert. szám.-nál keverednek

S_z sajátáll.

$|\uparrow\uparrow\rangle$

$|\uparrow\downarrow\rangle \quad |\downarrow\uparrow\rangle$

$|\downarrow\downarrow\rangle$

S sajátáll.

$\lvert\uparrow\uparrow\rangle$	
$\lvert\uparrow\downarrow\rangle+\lvert\downarrow\uparrow\rangle$	$\lvert\uparrow\downarrow\rangle-\lvert\downarrow\uparrow\rangle$
$\lvert\downarrow\downarrow\rangle$	
szimm. rész. cserére	antiszimm. rész. cserére
triplett	szinglett
$^3\chi$	$^1\chi$

$$\Rightarrow \quad {}^3\Psi_{ab} = \underbrace{\left(\frac{\phi_a(1)\phi_b(2)-\phi_a(2)\phi_b(1)}{\sqrt{2}}\right)}_{\text{antisz.}} {}^3\chi_{\substack{+1\\0\\-1}}(s_1,s_2)$$

$$^1\Psi_{ab} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\phi_a(1)\phi_b(2)+\phi_a(2)\phi_b(1)\right)\cdot {}^1\chi(s_1,s_2)$$

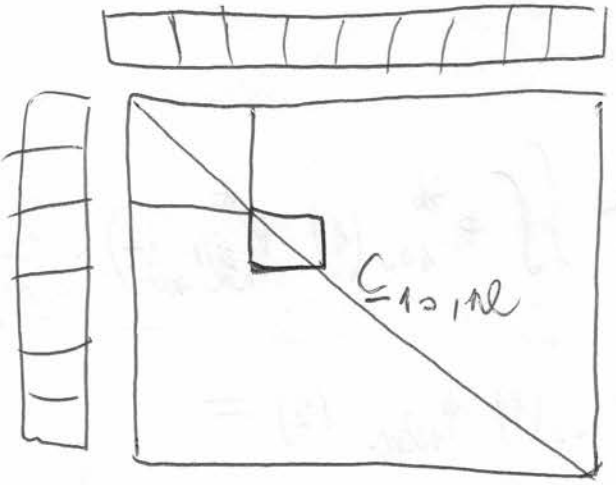
Mi lenne, ha a szimm.-t nem írnánk be előre,

hanem $\left.\begin{matrix}\phi_a(1)\phi_b(2)\\ \phi_a(2)\phi_b(1)\end{matrix}\right\}$ bázisok részeként

bázis: $\phi_{100}(1)\ \phi_{nlm}(2)$:

$\phi_{100}(1)\,\phi_{n00}(2),\ \phi_{100}(1)\,\phi_{n10}(2), \ldots$

vektor



$= \underline{\underline{H_1}}$ (elsőrendű korr.)

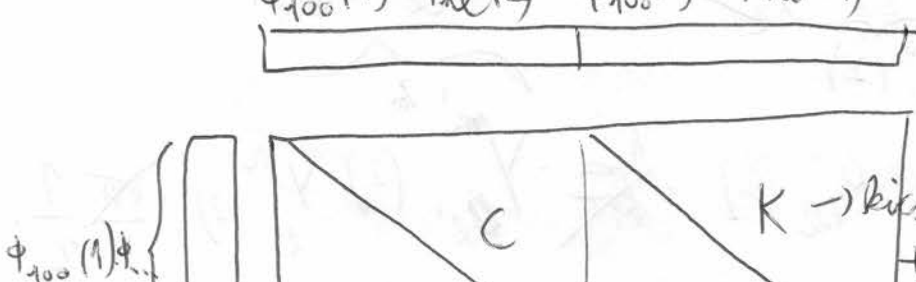
Áll. m-től nem függenek a báziselemek → a kül. m-ű ~~...~~ ~~...~~ fv-eket nem kül. meg

~~...~~ blokkdiagonális lesz a mátrix

~~a kicserélődési ∫ miatt~~

⇓

Ha a fordított hullámfv.-eket is bevesszük



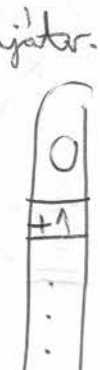
K → kicserélődési tagok (olyan, mint egy cb-kh. ∫, ha kicseréljük az e^--okat ~~a fv-eket~~)

sajátvr. pl.

sajátértékek

i.

i+D



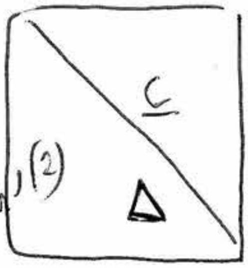
$C \pm K$

~~triplett~~ ↓

singlett ↑

$\phi_{100}(1)\,\phi_{nlm}(2)$

$\phi_{100}(1)\,\phi_{n'l'm'}(2)$



$$\Delta = e_0^2 \iint \phi^*_{100}(1)\,\phi^*_{n'l'm'}(2)\cdot\frac{1}{r_{12}}\cdot$$

$$\cdot\,\phi_{100}(1)\,\phi_{nlm}(2) =$$

$n' = n$, mert ha $n' \neq n$, akkor 0. rendben is kül.-nek az energiák!

$$= e_0^2 \iint R_{10}^2(1)\,R_{n'l'}(2)\,R_{nl}(2)\cdot \underbrace{Y_0^{0*}(1)}_{\frac{1}{\sqrt{4\pi}}}\cdot$$

$$\cdot\, Y_{l'}^{m'*}(2)\,Y_0^0(1)\,Y_l^m(2)\cdot\sum_{l_f=0}^{\infty}\frac{4\pi}{2l_f+1}\cdot\frac{r_<^{l_f}}{r_>^{l_f+1}}\sum_{m_f=-l_f}^{+l_f}$$

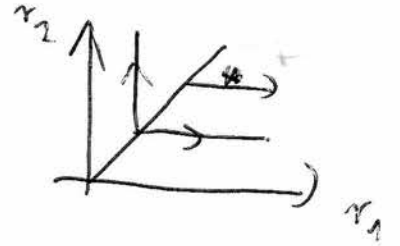
l_f: futó vált.

$$\cdot\, Y_{l_f}^{m_f*}(1)\,\underbrace{Y_{l_f}^{m_f}(2)}_{Y_0^0(2)} = \qquad \delta_{0,l_f}\,\delta_{0,m_f}$$

$$\overset{\substack{\Omega_1\checkmark\\ \varphi_1\checkmark}}{=} e_0^2\iint R_{10}^2(1)\,R_{n'l'}(2)\,R_{nl}(2)\cdot\cancel{\frac{1}{\sqrt{4\pi}}}\cdot\overbrace{Y_{l'}^{m'*}(2)\,Y_l^m(2)}^{\delta_{ll'}\cdot\delta_{mm'}}\cdot\frac{\cancel{4\pi}}{1}\cdot\frac{1}{r_>}\cdot$$

$$\cdot\,\underbrace{Y_0^0(2)}_{\cancel{\frac{1}{\sqrt{4\pi}}}} \overset{\substack{\Omega_2\checkmark\\ \varphi_2\checkmark}}{=} e_0^2\iint\frac{R_{10}^2(1)\,R_{nl}^2(2)}{r_>}\cdot\delta_{l,l'}\,\delta_{m,m'} =$$

$$= C_{10,nl} \quad \text{(Coulomb - int.)}$$

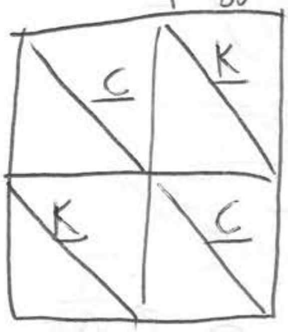


3. óra

0) Ism.: $|\phi_{100}(1)\,\phi_{nlm}(2)\rangle$ és $|\phi_{100}(2)\,\phi_{nlm}(1)\rangle$

(degenerált pert. számítás

Belátható, hogy ilyen lesz a $\hat{H}$:



$$\begin{pmatrix} \phi_{100}(1)\,\phi_{200}(2) \\ \phi_{100}(1)\cdot\phi_{21-1}(2) \\ \vdots \\ \hline \phi_{100}(2)\cdot\phi_{200}(1) \\ \phi_{100}(2)\cdot\phi_{21-1}(1) \\ \vdots \end{pmatrix}$$

} csak $n=2$ lehet, ha az első már $n=2$-es (egyébként nem lenne deg. pert. szám.)

$$C:\quad \langle\phi_{100}(1)\,\phi_{nlm}(2)|\frac{1}{V_{12}}|\phi_{100}(1)\,\phi_{nl'm'}(2)\rangle =$$

csak akkor lesz deg. pert. számítás, ha csak azonos energiájúak ($n=n'$)

$$= \langle\phi_{100}(2)\,\phi_{nlm}(1)|\frac{1}{V_{12}}|\phi_{100}(2)\,\phi_{nl'm'}(1)\rangle =$$

$$= e_0^2 \iint \frac{R_{10}^2(1)\,R_{nl}^2(2)}{r_>} = e_0^2 \int r_1^2\,dr_1 \int r_2^2\,dr_2\, \frac{R_{10}^2(r_1)\,R_{nl}^2(r_2)}{r_>} =$$

$$= C_{10,nl}\cdot\underbrace{\delta_{l,l'}\,\delta_{m,m'}}$$

$\Rightarrow$ csak diagonális elemek lesznek a blokkban

• K (kicserélődési tagok)

$$\left\langle \phi_{100}(1)\,\phi_{nlm}(2) \left| \frac{1}{r_{12}} \right| \phi_{100}(2)\,\phi_{nl'm'}(1) \right\rangle =$$

$$\left(= \left\langle \phi_{100}(2)\,\phi_{nlm}(1) \left| \frac{1}{r_{12}} \right| \phi_{100}(1)\,\phi_{nl'm'}(2) \right\rangle \right) =$$

$$= e_0^2 \iint \phi_{100}^*(1)\,\phi_{nlm}^*(2)\,\phi_{nl'm'}(1)\,\phi_{100}(2)\,\frac{1}{r_{12}} =$$

$$= e_0^2 \iint R_{10}(1)\,R_{nl}(2)\,R_{nl'}(1)\,R_{10}(2) \cdot \overbrace{Y_0^{0*}}^{\frac{1}{\sqrt{4\pi}}}(1)\,Y_l^{m*}(2) \cdot \underline{Y_{l'}^{m'}(1)} \cdot$$

$$\cdot\, Y_0^0(2) \cdot \sum_{l_f=0}^{\infty} \frac{4\pi}{2l_f+1}\,\frac{r_<^{l_f}}{r_>^{l_f+1}} \sum_{m_f=-l_f}^{l_f} \underline{Y_{l_f}^{m_f *}(1)}\,Y_{l_f}^{m_f}(2) =$$

$$\int \underline{\quad}\cdot\underline{\quad} \to \delta_{l',l_f}\,\delta_{m',m_f}$$

$$= e_0^2 \iint R_{10}(1)\,R_{10}(2)\,R_{nl}(2)\,R_{nl'}(1)\,\frac{1}{\sqrt{4\pi}}\,\underline{Y_l^{m*}(2)}\,\overbrace{Y_0^0(2)}^{\frac{1}{\sqrt{4\pi}}}\,\frac{4\pi}{2l'+1} \cdot$$

$$\cdot\, \frac{r_<^{l'}}{r_>^{l'+1}} \cdot \underline{Y_{l'}^{m'}(2)} = e_0^2\,\delta_{l',l}\,\delta_{m',m} \iint \frac{R_{10}(1)\,R_{10}(2)\,R_{nl}(1)\,R_{nl}(2)}{2l+1} \cdot \frac{r_<^{l}}{r_>^{l+1}} =$$

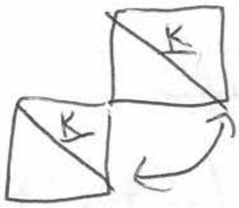
$$\int \underline{\quad}\cdot\underline{\quad} \to \delta_{ll'}\,\delta_{mm'}$$

$$= K_{10,nl} =$$

$$= \frac{e_0^2}{2l+1}\int_0^\infty r_1^2\,dr_1 \int_0^\infty r_2^2\,dr_2 \,\frac{r_<^l}{r_>^{l+1}}\, R_{10}(r_1)\, R_{10}(r_2)\, R_{nl}(r_1)\, R_{nl}(r_2)$$

(az 1-es és 2-es index felcserélhető!

$\Downarrow$ $\Downarrow$



ez a 2 blokk megegyezik!)

$n=2$ kül. m kv. számmal ugyanaz az energia járulék

$C_{1s,2s}$	0	$K_{1s,2s}$	0
0	$C_{1s,2p}$	0	$K_{1s,2p}$
$K_{1s,2s}$	0	$C_{1s,2s}$	0
0	$K_{1s,2p}$	0	$C_{1s,2p}$
$\uparrow$	$\uparrow$	$\uparrow$	$\uparrow$
$\vert\phi_{100}(1)\,\phi_{20}(2)\rangle$	$\vert\phi_{10}(1)\,\phi_{21}(2)\rangle$	$\vert\phi_{10}(2)\,\phi_{20}(1)\rangle$	$\vert\phi_{10}(2)\,\phi_{21}(1)\rangle$

s. v.	s. é.	degen.	hullámfv.	spin
$\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\0\\1\\0\end{pmatrix}$	$C_{1s,2s}+K_{1s,2s}$	$\times 1$	$\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\phi_{100}(1)\,\phi_{200}(2)+\phi_{100}(2)\,\phi_{200}(1)\right)$	$\cdot\, {}^1\chi_0(1,2)$
$\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\0\\-1\\0\end{pmatrix}$	$C_{1s,2s}-K_{1s,2s}$	$\times 3$ (spin)	$\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\phi_{100}(1)\,\phi_{200}(2)-\phi_{100}(2)\,\phi_{200}(1)\right)$	$\cdot\, {}^3\chi_{m_s}(1,2)$ $\downarrow$ 3 féle lehet

$\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}0\\1\\1\\1\end{pmatrix}$ | $C_{1s,2p}+K_{1s,2p}$ | $\times 3$ $\downarrow$ m | $\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\phi_{100}(1)\,\phi_{21m}(2)+\phi_{100}(2)\,\phi_{21m}(1)\right)\cdot {}^1\chi_0(1,2)$

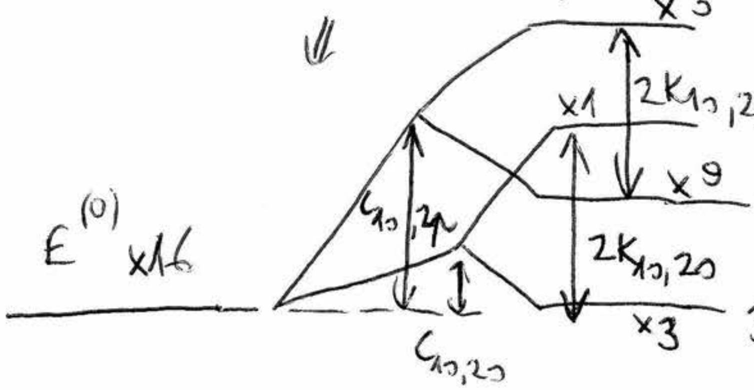
$\delta_{m,m'}$ miatt

$\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}0\\1\\0\\1\end{pmatrix}$ | $C_{1s,2p}-K_{1s,2p}$ | $\times 9$ $\uparrow$ spin és m | $\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\phi_{100}(1)\,\phi_{21m}(2)-\phi_{100}(2)\,\phi_{21m}(1)\right)\cdot {}^3\chi_{m_s}(1,2)$

$\swarrow$

16 állapot

$\Downarrow$



$2S+1$ $\quad$ L érték

$^1P=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\dots\phi_{210}+\dots\phi_{210}\right)\,{}^1\chi$

$^1S=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\dots\phi_{200}+\dots\phi_{200}\right)\,{}^1\chi$

$^3P=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\dots\phi_{21m}(2)-\dots\phi_{21m}(1)\right)\cdot{}^3\chi$

$^3S=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\phi_{100}(1)\,\phi_{200}(2)-\phi_{100}(2)\,\phi_{200}(1)\right)\cdot{}^3\chi_{m_s}(1,2)$

(kimutatható, hogy $E_{3p}<E_{1s}$)

$H=H_0+H_1$ $\qquad$ $[H,L^2]=[H,S^2]=[H,S_z]=0$

$L^2=L_1^2+L_2^2$

$\downarrow$ teljes mz. imp. mom.-a $\qquad$ $\Downarrow$ L^2, S^2 sajátállapotokat kellett kapnunk

szimm. feltét. megőrz.-vel

s. érték

$\left(\phi_{100}(1)\,\phi_{nlm}(2)\pm\phi_{100}(2)\,\phi_{nlm}(1)\right)\,{}^1_3\chi(1,2)$ $\qquad$ $C_{1s,nl}\pm K_{1s,nl}$

$L^2\left(\phi_{100}(1)\,\phi_{nlm}(2)\right)=\left(L_1^2+L_2^2\right)\left(\phi_{100}(1)\,\phi_{nlm}(2)\right)=0\cdot \text{h.t.}+\hbar^2 l(l+1)\cdot\text{h.t.}\Rightarrow$

($L_1^2 \to \hbar^2 0(0+1)$, $L_2^2 \to \hbar^2 l(l+1)$)

$\Rightarrow \boxed{L \text{ s.é. } l}$

L szerinti s.d. l ⇒ olyan állapotok kellenek csak, ahol l megegyezik a $\phi(1)\phi(2)$ és $\phi(2)\phi(1)$-ben

– L szerinti s.d.:

0	1	2
S	P	D

$\boxed{ZH}$ 3 hét múlva előadás ⇄ gyakorlat (ZH is)

ZH-n kézzel írott jegyzetet lehet használni

$$C_{1s,2s} = \frac{17}{81} \cdot Z \frac{e_0^2}{a_0} = 0{,}2099$$

$$C_{1s,2p} = \frac{59}{243} \cdot Z \cdot \frac{e_0^2}{a_0} = 0{,}2428$$

$$K_{1s,2s} = \frac{16}{729} \cdot Z \frac{e_0^2}{a_0} = 0{,}02195$$

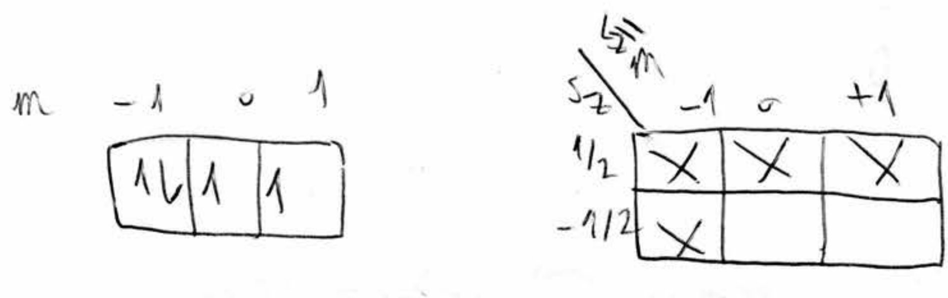
$$K_{1s,2p} = \frac{112}{6561} Z \frac{e_0^2}{a_0} = 0{,}01707$$

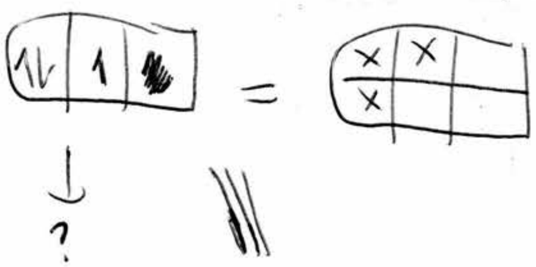
látható, hogy: $C_{1s,2p} - K_{1s,2p} < C_{1s,2s} + K_{1s,2s}$

4. óra

1) Slater-determináns

↳ mit jelentenek a "dobozok" Slater-es leírásban (elő[illegible] formalizmus)





$$\frac{1}{\sqrt{N!}} \cdot \begin{vmatrix} \varphi_{2,p,-1}(1)\cdot\alpha(1) & \varphi_{2,p,-1}(1)\cdot\beta(1) & \varphi_{2,p,0}(1)\,\alpha(1) \\ \varphi_{2,p,-1}(2)\cdot\alpha(2) & & \\ \varphi_{2,p,-1}(3)\,\alpha(3) & \dots & \end{vmatrix} =$$

ez akkor jó, ha pl. L_z-t, L^+-t akarjuk hattatni rá

$$= \frac{1}{\sqrt{3!}} \sum_{i_1,\dots,i_3} \varepsilon_{i_1 i_2 i_3}\, \phi_{2,p-1,\alpha}(i_1)\, \phi_{2,p-1,\beta}(i_2)\, \phi_{2,p,0,\alpha}(i_3) =$$

$$= \frac{1}{\sqrt{3!}} \sum_{\xi_1,\xi_2,\xi_3} \varepsilon_{\xi_1,\xi_2,\xi_3}\, \phi_{\xi_1}(1)\, \phi_{\xi_2}(2)\, \phi_{\xi_3}(3)$$

← ez pl. kin. energiánál jó, mert az részecskére hat!

$\xi_i = n\, p\, m\, \sigma$ → a pályát kódolja ξ

2) $\hat{A}$: egyrész. operátor (pl. $\hat{A} \equiv \Delta$)

több rész. r.: $\hat{A} = \sum_a \hat{A}^{(a)}$ $\quad \hat{A}^{(a)} (\equiv \Delta_a)$

(nyomtatott betűvel írjuk sokrész. -nél)

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \Big| \ldots \Big| \qquad (\text{megj.: } \xi_N \neq N)$$

$$\langle A \rangle = \langle \Psi | \hat{A} | \Psi \rangle = \sum_a \sum_{\xi_1' \ldots \xi_N'} \sum_{\xi_1 \ldots \xi_N} \sum_{s_1 \ldots s_N} \cdot \int d^3 r_1 \ldots d^3 r_N$$

$$\varepsilon_{\xi_1 \ldots \xi_N} \varepsilon_{\xi_1' \ldots \xi_N'} \frac{1}{\sqrt{N!}} \varphi^*_{\xi_1'}(1) \varphi^*_{\xi_2'}(2) \ldots \varphi^*_{\xi_N'}(N) \hat{A}^{(a)} \frac{1}{\sqrt{N!}} \varphi_{\xi_1}(1) \varphi_{\xi_2}(2) \ldots \varphi_{\xi_N}(N) =$$

$$\delta_{\xi_1' \xi_1} \qquad \varphi_{\xi_a}(a)$$

a többit elvégeztük $\to \delta$

nincs $\sum_{\xi_a''}$

$$= \frac{1}{N!} \sum_a \sum_{\xi_1' \ldots \xi_N'} \sum_{\xi_1 \ldots \xi_N} \sum_{s_a} \int d^3 r_a \; \delta_{\xi_1' \xi_1} \delta_{\xi_2' \xi_2} \ldots \delta_{\xi_N' \xi_N}$$

$$\cdot \varphi^*_{\xi_a}(a) \hat{A}^{(a)} \varphi_{\xi_a}(a) \cdot \varepsilon_{\xi_1 \ldots \xi_N} \cdot \varepsilon_{\xi_1' \ldots \xi_N'} =$$

mindkét oldalon x csere

Λ $\hookrightarrow$ 2x -ser időtunk előjelet $\hookrightarrow (+1)$

$$\cong \frac{1}{N!}\sum_a \sum_{\xi_a'} \sum_{\xi_1 \ldots \xi_N} \sum_{s_a} \int d^3 r_a \underbrace{\sum_{\xi_a \xi_1 \ldots \xi_N} \cancel{\xi}_{\xi_a' \xi_1 \ldots \xi_N}}_{\delta_{\xi_a, \xi_a'} (N-1)!} \cdot \varphi^*_{\xi_a'}(a) \cdot \hat{A}^{(a)} \varphi_{\xi_a}(a) =$$

$(N-1)!$ ennyiszer adnak nem 0-t

$$= \frac{1}{N} \sum_a \sum_{\xi_a} \sum_{s_a} \int d^3 r_a \cdot \underbrace{\varphi^*_{\xi_a}(a) \hat{A}^{(a)} \cdot \varphi_{\xi_a}(a)}_{\langle \varphi_{\xi_a} | A | \varphi_{\xi_a} \rangle} =$$

$\uparrow$ $\frac{(N-1)!}{N!}$

ez az 1e⁻ A

$$= \cancel{\frac{N}{N}} \sum_a \sum_{\xi_a} \langle \xi_a | A | \xi_a \rangle = \sum_i \langle i | A | i \rangle = \sum_i \langle i | A^{(i)} | i \rangle$$

$\xi_a \to i$

~~$\times N$~~ $\to N$ részecskére ezt kapjuk

Tanulság $\boxed{K_{össz} = \sum K_{1e^-}}$, vagyis

(előadás $\to$ 91, 92. dia) $\boxed{\langle K_{sokrész} \rangle = \sum \langle K \rangle_{egyrész}}$ ez Slaterre is igaz (a Slater szorzatok lin. komb.-ja)

3)

$$\hat{A} = \sum_{\substack{a,b \\ a\neq b}} A^{(a,b)} = \frac{1}{2} \sum_{\substack{a,b \\ a\neq b}} \frac{1}{r_{ab}}$$

$$\langle\Psi|A|\Psi\rangle = \sum_{a,b} \cdot \sum_{\xi_1'\ldots\xi_N'} \sum_{\xi_1\ldots\xi_N} \sum_{s_1\ldots s_N} \int d^3r_1 \ldots d^3r_N \cdot$$

$\sum$ csak az a és b $\sum_{\xi_a'\xi_b'}$; $\sum_{\xi_a\xi_b}$; $\sum_{s_a s_b}$ -os tagok; $d^3r_a\, d^3r_b$

$$\cdot \varphi^*_{\xi_1}(1)\ldots\varphi^*_{\xi_N}(N)\cdot\frac{1}{r_{ab}}\cdot\varphi_{\xi_1}(1)\ldots\varphi_{\xi_N}(N)\cdot\sum_{\xi_1\ldots\xi_N}\varepsilon_{\xi_1'\ldots\xi_N'}$$

$$\cdot\frac{1}{N!}\cdot\frac{1}{2} =$$

$\uparrow$

$\frac{1}{2}\cdot\frac{1}{r_{ab}}$-ből

(ξ_a és ξ_b-t előhozzuk mindkettőben) de ez az előjelen nem vált.

$$= \frac{1}{2N!}\sum_{a,b}\sum_{\xi_a',\xi_b'}\sum_{\xi_a,\xi_b}\sum_{s_a s_b}\int d^3r_a\, d^3r_b\, \varphi^*_{\xi_a'}(a)\varphi^*_{\xi_b'}(b)\cdot\frac{1}{r_{ab}}\varphi_{\xi_a}(a)\varphi_{\xi_b}(b)\cdot$$

$$\cdot \underbrace{\sum_{\xi_1\ldots\xi_N}\varepsilon_{\xi_a'\xi_b'\xi_1'\ldots\xi_N'}\cdot\varepsilon_{\xi_a\xi_b\xi_1\ldots\xi_N}\cdot\delta_{\xi_1\xi_1'}\ldots\delta_{\xi_N\xi_N'}}_{=\left(\delta_{\xi_a\xi_a'}\delta_{\xi_b\xi_b'}-\delta_{\xi_a,\xi_b'}\delta_{\xi_b\xi_a'}\right)(N-2)!}$$

$$= \frac{1}{2N(N-1)}\sum_{a,b}\cdot\sum_{\xi_a,\xi_b}\cdot\sum_{s_a,s_b}\left[|\varphi_{\xi_a}(a)|^2|\varphi_{\xi_b}(b)|^2\cdot\frac{1}{r_{ab}} - \right.$$

Coulomb-tag

$$\left.\varphi^*_{\xi_b}(a)\,\varphi^*_{\xi_a}(b)\cdot\frac{1}{r_{ab}}\cdot\varphi_{\xi_a}(a)\cdot\varphi_{\xi_b}(b)\right]$$

~~[illegible]~~ kicserélődési tag

Áll: kicserélődési tag csak azonos irányú spinekél van

DE He-nál kaptunk szinglettből is → ott mi volt más

0) ZH példák:

$J=1$ $\qquad$ $J=0$

$S_z = 1$ $\quad |\uparrow\uparrow\rangle$

$0 \quad \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle\right) \qquad \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle\right)$

$-1 \quad |\downarrow\downarrow\rangle$

Ly össze Clebsch-elés

- dolgos jelölés → milyen s. állapot?

$\boxed{\text{ZH jövő héten!}}$

1) Múlt óra vége:

$$\underset{E^{(1)}}{\overset{\shortparallel}{\langle \hat{A} \rangle}} = \frac{1}{2} \sum_{i,j} \Big\{ \sum_{s,s'} \int d^3r \, d^3r' \, \underbrace{\left[\varphi_i(r,s) \right| \left| \varphi_j(r',s') \right|^2}_{C_{ij}} \cdot \underset{\text{papíron } \alpha}{\hat{A}} -$$

$$- \underbrace{\varphi_i^*(r',s') \varphi_i(r,s) \varphi_j^*(r,s) \varphi_j(r',s') \cdot \hat{A}}_{K_{ij}} \Big\}$$

- Áll.: a kicserl. kh. csak azonos spinek között hat

Biz.: kül. spinekre

$$K_{i,j} = \sum_{s,s'} \int d^3r \, d^3r' \; \phi_i^*(r) \; \phi_i(r) \; \phi_j^*(r) \; \phi_j(r') \; \frac{e_0^2}{|r-r'|} \; .$$

$$\cdot \underbrace{\underline{\alpha(s')} \, \alpha(s) \, \underline{\beta(s')} \, \beta(s)}_{0} \qquad \text{az egyik } 0!$$

$0 \Leftarrow$ kül. spinekkel mindkét komponenst lecsavarjuk

2) $\underline{S} = \underline{S}^{(1)} + \underline{S}^{(2)}$ $\left(x, y, z \text{ komp.-ra igaz}\right)$

$$S_z^{(i)} \, |s, m_s\rangle_{(i)} = \hbar m_s \, |s, m_s\rangle \qquad \left(S_\pm = S_x \pm i S_y\right)$$

$$S_\pm^{(i)} \cdot |s, m_s\rangle_{(i)} = \hbar \sqrt{s(s+1) - m_s(m_s \pm 1)} \; |s, m_s \pm 1\rangle$$

jelölések:

$|\uparrow\rangle_{①} \equiv |1/2, +1/2\rangle_{①}$ $\qquad |\uparrow\rangle_{①} |\uparrow\rangle_{②} \equiv |\uparrow\uparrow\rangle_{①②} \to S_z = 1$

$|\downarrow\rangle_{①} \equiv |1/2, -1/2\rangle_{①}$ $\qquad \Uparrow$

- $S_z \, |\uparrow\uparrow\rangle = \left(S_z^{(1)} + S_z^{(2)}\right) |\uparrow\uparrow\rangle = \hbar\left(\frac{1}{2}|\uparrow\uparrow\rangle + \frac{1}{2}|\uparrow\uparrow\rangle\right) = \hbar \, 1 \, |\uparrow\uparrow\rangle$

  $\uparrow$ teljes S_z

- $|\uparrow\downarrow\rangle$, $|\downarrow\uparrow\rangle$ $\to$ $S_z = 0$ ~~(DE)~~

  kell $S=0$

  kell $S=1$

- $|\downarrow\downarrow\rangle$ $\qquad S_z = -1$

= ezek S_z nek s.állapotai, DE S^2-nek nem

$$|S^{(1)} - S^{(2)}| \le S \le S^{(1)} + S^{(2)}$$

$$0 \le S \le 1 \Rightarrow S = 0, 1 \text{ lehet}$$

$S=1 \quad S_z = 1, 0, -1$

$S=0 \quad S_z = 0$

$S_z = 1 \quad |\uparrow\uparrow\rangle \to$ ebből tudjuk, hogy sajátállapota S-nek (más $S_z=+1$ áll. nincs)

$S_-|\uparrow\uparrow\rangle$

$$S_-|\underset{S}{1},\underset{m_S}{1}\rangle = \hbar\sqrt{S(S+1) - \underbrace{m_S(m_S-1)}_{0}}\;|\underset{S}{1},\underset{m_S}{0}\rangle = \sqrt{2}\,\hbar\,|\underset{S}{1},\underset{m}{0}\rangle$$

$$S_-|\uparrow\uparrow\rangle = \left(S_-^{(1)} + S_-^{(2)}\right)|\uparrow\rangle_{①}|\uparrow\rangle_{②} = \hbar|\downarrow\rangle_{①}|\uparrow\rangle_2 + \hbar|\uparrow\rangle_{(1)}|\downarrow\rangle_2 = \hbar\left(|\downarrow\uparrow\rangle + |\uparrow\downarrow\rangle\right)$$

$$|\uparrow\rangle_i = |s=\tfrac{1}{2}, m_s=\tfrac{1}{2}\rangle$$

$$S_-^{(i)}|\uparrow\rangle_{(i)} = \underbrace{\sqrt{\tfrac{1}{2}\underbrace{\left(\tfrac{1}{2}+1\right)}_{\frac{3}{2}} - \tfrac{1}{2}\underbrace{\left(\tfrac{1}{2}-1\right)}_{-\frac{1}{2}}}}_{1}\;\hbar\,|s=\tfrac{1}{2}, m_s=-\tfrac{1}{2}\rangle$$

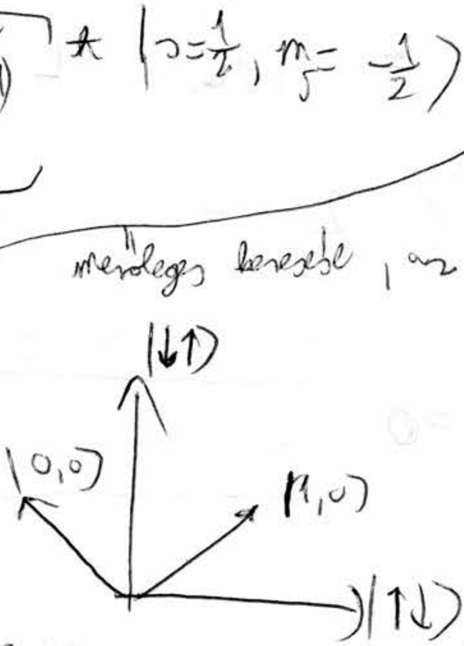
$$|1,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\downarrow\uparrow\rangle + |\uparrow\downarrow\rangle\right)$$

$$|1,-1\rangle = |\downarrow\downarrow\rangle$$

merőlegest keresek, az $S_z=0$, $|\uparrow\downarrow\rangle$, $|\downarrow\uparrow\rangle$

$$|0,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\downarrow\uparrow\rangle - |\uparrow\downarrow\rangle\right)$$

ZH-n lehet ilyen



3) páros feladat másik átírása:

	1s	2s	2p
Ne:	↑↓	↑↓	↑↓ ↑↓ ↑↓

‖

S_z \ L_z	0	0	−1	0	+1
$+1/2$	×	×	×	×	×
$-1/2$	×	×	×	×	×

$$(1s)^2(2s)^2(2p)^6$$

L_x, L_y, L_z összeadódik $L^{2(i)}$-k nem!!!

‖

csak ezek adódnak össze,

↓ $L_+ \cdot L_- =$

L=?

több e⁻-ra $\left(L_+^{(1)}+L_+^{(2)}+\dots\right)\left(L_-^{(1)}+L_-^{(2)}+\dots\right)$

(de csak akkor kapjuk ugyanazt az állapotot, ha $L_+^{(i)}L_-^{(j)}$, $L_-^{(i)}L_+^{(j)}$-nél $i=j$)

$$L^2|Ne\rangle = \left(L_z^2+\frac{1}{2}\left(L_+L_-+L_-L_+\right)\right)|Ne\rangle$$

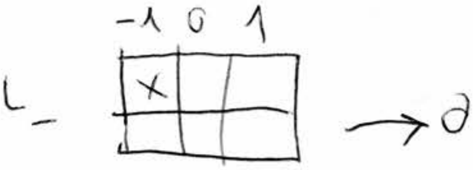
$$L_z|Ne\rangle = 2\left(0+0+(-1)+0+1\right) = 0\,|Ne\rangle$$

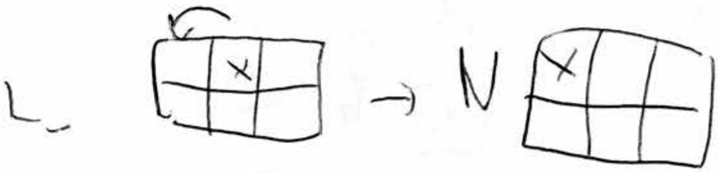
↓

a 2 spin miatt ∀ L_z áll.-ban 2 el. van

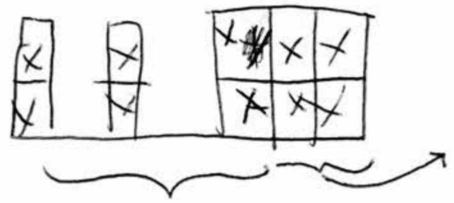
$L_{z\,Ne}=0$ $\boxed{\text{zárt héjon } L_z=0}$

(✗)





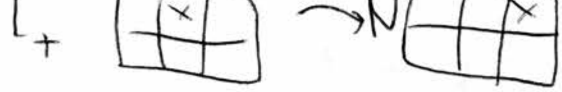
DE ha abban az áll.-ban már van e^-, akkor a Pauli-elv tiltja azt az állapotot

$\Rightarrow$ 

$L_- \Rightarrow 0$, mert a balra lévő áll. be van töltve

$L_z \Rightarrow 0$, mert nincs kisebb L_z értékű állapot

$L_-|Ne\rangle = 0$

hasonlóan 

DE a betöltés miatt

$$L_+|Ne\rangle = 0$$

$$\Rightarrow L^2|Ne\rangle = \hbar^2 \overset{L_z^2\text{-ből}}{0} |Ne\rangle$$

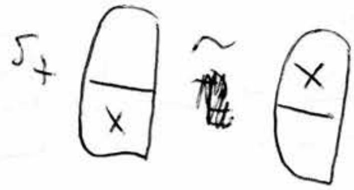
$$\overset{\text{definíció}}{\equiv} L(L+1)$$

$\Rightarrow$ Ne: $L=0$

$S_z |Ne\rangle = 5\cdot\frac{1}{2} + 5\left(-\frac{1}{2}\right) = 0$

$S_+ |Ne\rangle = 0\ |Ne\rangle$

$S_- |Ne\rangle = 0\ |Ne\rangle$



$\Rightarrow S_{Ne} = 0$

teljes spin

l (csak betűvel)

$\Rightarrow$ Ne alapállapota: $\boxed{{}^{1}S_{0}}$ $\quad {}^{2S+1}$, j

$\underline{J} = \underline{L} + \underline{S}$

$|\underline{L} - \underline{S}| \le J \le |\underline{L} + \underline{S}|$

$\underbrace{|0-0|}_{0} \le J \le \underbrace{0+0}_{0}$

${}^{2S+1}l_j$

$\Rightarrow J = 0$

$\boxed{Be}$ Be-ra ugyanezt kapnánk

(zárt héj, zárt alhéjra ugyanezt kapjuk)

ZH-ban

- lehet: $C_{1s,3p}$ $\quad$ pl. $f\binom{1s2}{3d1}$

$\underbrace{\phantom{C_{1s,3p}}}_{\text{ezt kell kiszámolni}}$

- He-ra: • magasabb pályákra gerjeszt $C_{1s,5p}$ ← ha ezeket megadják ↙ mi lesz a sorrend?
  • betöltés $\mathcal{M}S_L\left({}^{2S+1}\ell_j\right)$
  • hányszorosan degenerált a pálya
- több e^- rsz:

kinetikus energia = ? → ezt kell kiszámolni ha $K = \sum_{n=1}^{N} K_n$

- több e^- rsz: perturbációszám korrekciója (C, K-ból)

- spinek számolása (összeadása) (mai óra)
- e^- konfig.: doboz ↔ Slater-det
- doboz ↔ kvantumszámok (mai óra)

kézzel írott jegyzetet
kiadott szürke papírt } lehet használni
~~vasút nem~~ számológép

bolyai.elte.hu/~kaadomda/atmol/

↳ itt lesznek a ZH eredmények

7. óra

ZH javítás

1) $$C_{2s,2s} = C_{nl,1s} = e_0^2 \int_0^\infty dr_1 r_1^2 \int_0^\infty dr_2 r_2^2 \; \frac{R_{20}^2(r_1)\cdot R_{20}^2(r_2)}{r_>} =$$

$$= 2\cdot e_0^2 \int_0^\infty dr_1 r_1^2 \int_{r_1}^\infty dr_2 \; r_2 \cdot \left(\frac{Zr_1}{a_0}-2\right)^2 \cdot \left(\frac{Zr_2}{a_0}-2\right)^2 \cdot \left(\frac{Z}{a_0}\right)^6 \cdot \frac{1}{8^2} e^{-\frac{Zr_1}{a_0}} e^{-\frac{Zr_2}{a_0}} =$$

$$= \frac{Ze_0^2}{64}\cdot \frac{Z^6}{a_0^6}\cdot\left(\frac{a_0}{Z}\right)^5 \cdot \int_0^\infty dt_1\, t_1^2\cdot (t_1-2)^2\cdot e^{-t_1} \cdot \underbrace{\int_{t_1}^\infty dt_2\, \underbrace{t_2(t_2-2)^2}_{t_2^3-4t_2^2+4t_2} e^{-t_2}}_{e^{-t_1}\left(t_1^3+3t_1^2+6t_1-16-4(t_1^2+2t_1+2)+4(t_1+1)\right) = e^{-t_1}\left(t_1^3-t_1^2+2t_1+2\right)} =$$

$$t_i := \frac{Zr_i}{a_0}$$

$$= \frac{e_0^2 Z}{32 a_0}\cdot \int_0^\infty dt_1\, e^{-2t_1}\left(t_1^7 - t_1^6 + 2t_1^5 + 2t_1^4 - 4t_1^6 + 4t_1^5 - 8t_1^4 - 8t_1^3 + 4t_1^5 - 4t_1^4 + 8t_1^3 + 8t_1^2\right) =$$

$x = 2t$

$$= \frac{e_0^2 Z}{a_0 \cdot 32} \int_0^\infty \frac{dx}{2^8} e^{x} \left(\overset{\cancel{n}}{x}^7 - 10 \cdot x^6 + 40 \cdot x^{\cancel{5}} - 80 \cdot x^4 + 256 \cdot x^2 \right)$$

$$\cdot \left(7! - 10 \cdot 6! + 40 \cdot 5! - 80 \cdot 4! + 256 \cdot 2! \right) = \frac{77}{512}$$

2) $|1, m_{j1}\rangle \otimes |1, m_{j2}\rangle \qquad \hat{J}$

$$J_z |1, m_1\rangle |1, m_2\rangle = \left(j_z^{(1)} + j_z^{(2)}\right) |1, m_1\rangle |1, m_2\rangle = (m_1 + m_2)\hbar \, |1, m_1\rangle |1, m_2\rangle$$

$J = 2$

$J_z^{max} \quad m_1 = m_2 = 1 \qquad J_z = 2 \Rightarrow J = 2$

$$|2,2\rangle = |1,1\rangle |1,1\rangle \qquad j_- |1, m\rangle = \underbrace{\sqrt{1 \cdot 2 - m(m-1)}}_{\sqrt{2} \text{ za } m = 1, 0} |1, m-1\rangle$$

- $J_- |2,2\rangle = \sqrt{2 \cdot 3 - 2 \cdot 1} \, |2,1\rangle = 2 \cdot |2,1\rangle$

$$|2,1\rangle = \frac{1}{2} J_- \left(|1,1\rangle |1,1\rangle \right) = \frac{1}{2} \left(j_-^{(1)} + j_-^{(2)} \right) |1,1\rangle |1,1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|1,0\rangle |1,1\rangle + |1,1\rangle |1,0\rangle \right)$$

- $J_- |2,1\rangle = \underbrace{\sqrt{2 \cdot 3 - 1 \cdot 0}}_{\sqrt{6}} \, |2,0\rangle = \sqrt{6} \, |2,0\rangle$

$$|2,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}} \left(j_-^{(1)} + j_-^{(2)} \right) \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|1,1\rangle |1,0\rangle + |1,0\rangle |1,1\rangle \right) = \frac{1}{\sqrt{6}} \Big(2 \, |1,0\rangle |1,0\rangle +$$

$$+ |1,1\rangle \cdot |1,-1\rangle + |1,-1\rangle \cdot |1,1\rangle \Big)$$

- $J_- |2,0\rangle = \sqrt{2 \cdot 3 - 0} \, |2,-1\rangle = \sqrt{6} \, |2,-1\rangle$

$$|2,-1\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}} \left(j_-^{(1)} + j_-^{(2)} \right) \cdot \frac{1}{\sqrt{6}} \left(2 |1,0\rangle |1,0\rangle + |1,1\rangle |1,-1\rangle + |1,-1\rangle |1,1\rangle \right) =$$

$$= \frac{1}{6}\sqrt{2}\left(3|1,-1\rangle|1,0\rangle + 3|1,0\rangle|1,-1\rangle\right) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|1,-1\rangle|1,0\rangle + |1,0\rangle|1,-1\rangle\right)$$

- $|2,-2\rangle = |1,-1\rangle|1,-1\rangle$

■ $J = 1$

- $\langle 2,1|1,1\rangle = 0 \qquad \langle 1,1|1,1\rangle = 1 \qquad \alpha|1,1\rangle|1,0\rangle + \beta|1,0\rangle|1,1\rangle$

$\alpha + \beta = 0 \qquad \alpha^2 + \beta^2 = 1 \qquad \alpha = \frac{1}{\sqrt{2}} \quad \beta = -\frac{1}{\sqrt{2}}$

$$|1,1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|1,1\rangle|1,0\rangle - |1,0\rangle|1,1\rangle\right)$$

- $J_-|1,1\rangle = \sqrt{2}|1,0\rangle$

$$|1,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(j_-^{(1)} + j_-^{(2)}\right)\frac{1}{\sqrt{2}}\left(|1,1\rangle|1,0\rangle - |1,0\rangle|1,1\rangle\right) =$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\cancel{0\cdot|1,0\rangle|1,0\rangle} + |1,1\rangle\cdot|1,-1\rangle - |1,-1\rangle|1,1\rangle\right)$$

■ $J = 0$

$|0,0\rangle : \langle 1,0|0,0\rangle = 0 = \langle 2,0|0,0\rangle$

$$|0,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}\left(|1,1\rangle|1,-1\rangle + |1,-1\rangle|1,1\rangle - |1,0\rangle|1,0\rangle\right)$$

- $\langle 1,-1|2,-1\rangle \Rightarrow |1,-1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(-|1,-1\rangle|1,0\rangle + |1,0\rangle|1,-1\rangle\right)$

$+ \qquad -$

DE $|1\ -1\rangle = J_-|1\ 0\rangle \ldots$ → ez megköti az előjelet

3) $\overset{\alpha\ \beta}{\boxed{1\downarrow}}$ $\boxed{1\downarrow}$ $\boxed{\uparrow|\uparrow|\uparrow}$ alapáll. (N)

a) Slater
$$\varphi = \frac{1}{\sqrt{7!}} \begin{vmatrix} \psi_{100}(x_1)\,\alpha(s_1) & \psi_{100}(x_2)\,\alpha(s_2) & \dots & \psi_{100}(x_7)\,\alpha(s_7) \\ \psi_{100}(x_1)\,\beta(s_1) & & & \\ \psi_{200}(x_1)\,\alpha(s_1) & & & \vdots \\ \psi_{200}(x_1)\,\beta(s_1) & & & \\ \psi_{21-1}(x_1)\,\alpha(s_1) & & & \\ \psi_{210}(x_1)\,\alpha(s_1) & & & \\ \psi_{21+1}(x_1)\,\alpha(s_1) & & \dots & \psi_{211}(x_7)\,\alpha(s_7) \end{vmatrix}$$

$r_i, \vartheta_i, \varphi_i = x_i$

b) $\hat{I}^2 = I_z^2 + \frac{1}{2}\left(I_+I_- + I_-I_+\right)$

$S_z\varphi = \hbar\left(\frac{1}{2}-\frac{1}{2}+\frac{1}{2}-\frac{1}{2}+3\cdot\frac{1}{2}\right)\varphi = \hbar\,\frac{3}{2}\varphi$

$S_+\varphi = 0$

$L_z\varphi = \hbar\left(2\cdot 0 + 2\cdot 0 + -1 + 0 + 1\right)\varphi = 0$

$L_-\varphi = 0$

$L_+\varphi = 0$

$s_-|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\rangle = \sqrt{\frac{1}{2}\cdot\frac{3}{2}-\frac{1}{2}\frac{1}{2}}\,|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\rangle$

$\underbrace{S_+S_-\varphi}_{} = 3\cdot \underbrace{s_+s_-}_{\frac{1}{2}}|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\rangle = \frac{3}{2}|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\rangle$

akkor $\neq 0$,
ha maga a p pályán
lévő!! e^--ra hatnak

$s_+|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\rangle = \sqrt{\frac{1}{2}\cdot\frac{3}{2}-\frac{1}{2}\cdot\frac{1}{2}}\,|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|\frac{1}{2}\frac{1}{2}\rangle$

$$\Rightarrow S^2\psi = \left(\frac{9}{4}+\frac{3}{2}\right)\hbar^2\psi = \frac{3}{2}\left(\frac{3}{2}+1\right)\hbar^2\psi$$

$\Leftarrow$

$S=\frac{3}{2}$ $\quad S_z=\frac{3}{2}$

$L=0$ $\quad L_z=0$

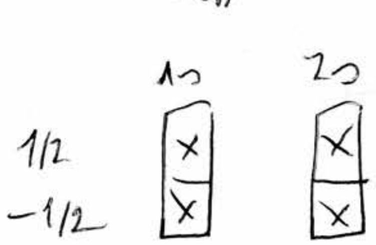
$J=3/2$ $\quad J_z=3/2$

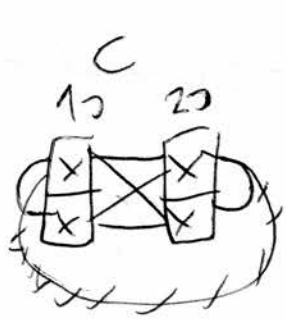
$^4S_{3/2} \rightarrow J=\frac{3}{2} \Rightarrow$ 4x-es degenerált

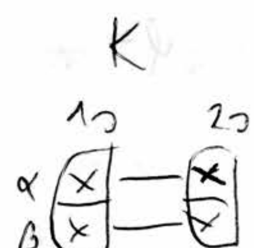
4) $(1s)^2(2s)^2$

a) $E^0 = 2\cdot E_1 + 2E_2 = 2\left(-\frac{Z^2 e_0^2}{2a_0}\left(\frac{1}{1^2}+\frac{1}{2^2}\right)\right)$

b) $E^{(1)}_{korr} = ?$







csak azonos spin között van ~~[illegible]~~ kicserélődés

$$E^{(1)}_{korr} = C_{1s1s} + C_{2s,2s} + 4C_{1s,2s} - 2K_{1s,2s}$$

$$E^{(1)}_{tot} = E^0 + E^{(1)}_{korr}$$

$\underline{\cdot \text{óra}}$

1) ~~Zeeman felhasadás~~ atomok mágneses térben

^2p állapot (B) $\qquad S = \frac{1}{2} \quad L = 1$

$$\hat{V} = A \underline{L}\,\underline{S} + \mu_B \cdot \left(L_z + 2S_z \right) \cdot B\hbar$$

	$\vert\sqcup, \frac{1}{2}\rangle$	$\vert\sqcup, -\frac{1}{2}\rangle$
S_+	0	$\hbar\vert\sqcup, \frac{1}{2}\rangle$
S_-	$\hbar\vert\sqcup, -\frac{1}{2}\rangle$	0

$$|L, L_z, S, S_z\rangle \equiv |L_z, S_z\rangle \quad \text{jó}$$

ha B nagy, ez a bázis jó

(egyébként $|L S J, J_z\rangle$)

$$\underline{L}\,\underline{S} = \frac{1}{2}\left(L_+ S_- + L_- S_+ \right) + L_z S_z$$

	$\vert 1, \sqcup\rangle$	$\vert 0, \sqcup\rangle$	$\vert -1, \sqcup\rangle$
L_+	0	$\sqrt{2}\hbar\vert 1, \sqcup\rangle$	$\sqrt{2}\hbar\vert 0, \sqcup\rangle$
L_-	$\sqrt{2}\hbar\vert 0, \sqcup\rangle$	$\sqrt{2}\hbar\vert -1, \sqcup\rangle$	0

$$\hat{V}\,|1, 1/2\rangle = A\hbar^2 \left(\frac{1}{2}\,\big| \overbrace{0 + 0}^{0} \big) + (1)\left(\frac{1}{2}\right) |1, 1/2\rangle \right) + B\mu_B \hbar\,(1 + 2 \cdot 1/2)\, |1, 1/2\rangle$$

$$= \left(\frac{A\hbar^2}{2} + 2\mu_B B\hbar \right) \; |1, 1/2\rangle$$

$$\hat{V}\,|1, -1/2\rangle = A\hbar^2 \left[\frac{1}{2}\left(0 + \sqrt{2}\,|0, 1/2\rangle\right) + (1)\left(-\frac{1}{2}\right) |1, -1/2\rangle \right] + \mu_B B\hbar \underbrace{\left(1 + 2 \cdot \left(-\frac{1}{2}\right)\right)}_{0} \cdot$$

$$\cdot |1, -1/2\rangle = \frac{A\hbar^2}{2}\sqrt{2}\,|0, 1/2\rangle - \frac{A\hbar^2}{2}\,|1, -1/2\rangle$$

$$\hat{V}\,|0, 1/2\rangle = A\hbar^2 \left[\frac{1}{2}\left(\sqrt{2}\,|1, -1/2\rangle + 0 \right) + 0 \cdot \frac{1}{2}\,|0, 1/2\rangle \right] + \mu_B B\hbar \left(0 + 2 \cdot \frac{1}{2} \right) |0, \tfrac{1}{2}\rangle =$$

$$= \frac{A\hbar^2}{2}\sqrt{2}\,|1,-1/2\rangle + \mu_B B\hbar\,|0,1/2\rangle$$

$$\hat{V}\,|0,-1/2\rangle = A\hbar^2\Big[\underset{L_-S_+}{\underset{\uparrow}{\tfrac{1}{2}}}\big(\sqrt{2}\,|-1,1/2\rangle + \underset{L_+S_-}{\underset{\uparrow}{0}}\big) + \underset{L_z\cdot S_z}{\underset{\uparrow}{0}}\cdot\left(-\tfrac{1}{2}\right)|0,-1/2\rangle\Big] +$$

$$+\mu_B B\hbar\left(0+2\cdot\left(-\tfrac{1}{2}\right)\right)|0,-1/2\rangle = \frac{A\hbar^2}{2}\sqrt{2}\,|-1,1/2\rangle - \mu_B B\hbar\,|0,-1/2\rangle$$

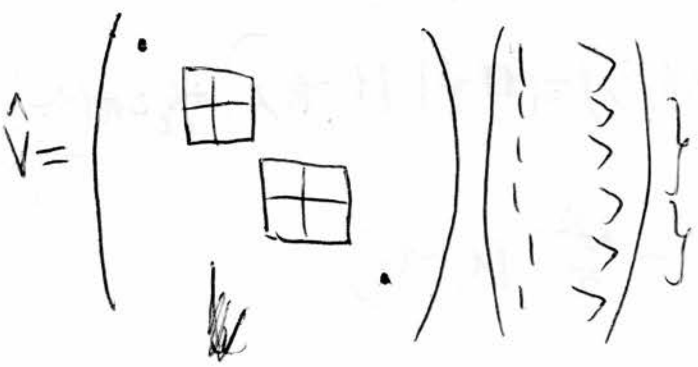
$$\hat{V}\,|-1,1/2\rangle = A\hbar^2\Big[\tfrac{1}{2}\big(0+\sqrt{2}\,|0,-1/2\rangle\big) + (-1)\cdot\tfrac{1}{2}\,|-1,1/2\rangle\Big] + \mu_B B\hbar\underbrace{\left(-1+2\cdot\tfrac{1}{2}\right)}_{0}|-1,1/2\rangle =$$

$$= \frac{A\hbar^2}{2}\sqrt{2}\,|0,-\tfrac{1}{2}\rangle - \frac{A\hbar^2}{2}\,|-1,\tfrac{1}{2}\rangle$$

$$\hat{V}\,|-1,-\tfrac{1}{2}\rangle = A\hbar^2\Big[\tfrac{1}{2}(0+0) + (-1)\left(-\tfrac{1}{2}\right)|-1,-1/2\rangle\Big] + \mu_B B\hbar\left(-1+2\left(-\tfrac{1}{2}\right)\right)|-1,-\tfrac{1}{2}\rangle =$$

$$= \left(\frac{A\hbar^2}{2} - 2\mu_B B\hbar\right)|-1,-1/2\rangle$$

$\Downarrow$



erekat önsekevete $\hat{V}$

$|1,-1/2\rangle \quad |0,1/2\rangle \qquad\qquad |0,-1/2\rangle \quad |-1,1/2\rangle$

$(*)$

$\hat{V}\,|1,1/2\rangle = E_1\,|1,1/2\rangle$

$\vdots$

$\hat{V}\,|-1,1/2\rangle = E_6\,|1,-1/2\rangle$

$\hat{V}$

$$\begin{pmatrix} -\frac{A\hbar^2}{2} & A\hbar^2\frac{\sqrt{2}}{2} \\ A\hbar^2\frac{\sqrt{2}}{2} & \mu_B B\hbar \end{pmatrix} \begin{pmatrix} |1,-1/2\rangle \\ |0,1/2\rangle \end{pmatrix}$$

$E_{2,3}$:

$E^2 - E\left(-\frac{A\hbar^2}{2} + \mu_B B\hbar\right) - \mu_B B\hbar\frac{A\hbar^2}{2} - \frac{A^2\hbar^4}{2} = 0$

$$E_{2,3} = \frac{-\frac{A\hbar^2}{2} + \mu_B B\hbar \pm \sqrt{\frac{9}{4}A^2\hbar^4 + A\hbar^2\mu_B B\hbar + \mu_B^2 B^2\hbar^2}}{2}$$

$(*) \rightarrow \hat{V}$

$$\begin{pmatrix} -\mu_B\hbar B & A\hbar^2\frac{\sqrt{2}}{2} \\ A\hbar^2\frac{\sqrt{2}}{2} & -\frac{A\hbar^2}{2} \end{pmatrix} \quad \begin{matrix} |0,-1/2\rangle \\ |-1,\frac{1}{2}\rangle \end{matrix}$$

$E^2 - E\left(-\mu_B\hbar B - \frac{A\hbar^2}{2}\right) + \frac{A\hbar^3\mu_B B}{2} - \frac{A^2\hbar^4}{2}$

$$E_{4,5} = \frac{-\mu_B\hbar B - \frac{A\hbar^2}{2} \pm \sqrt{\frac{9}{4}A^2\hbar^4 - \frac{A\hbar^3}{2}\mu_B B + \mu_B^2 B^2\hbar^2}}{2}$$

sajátenergiák

$E_1 = \frac{A\hbar^2}{2} + 2\mu_B B\hbar$

$\Rightarrow \quad E_{2,3} = -\frac{A\hbar^2}{4} + \frac{\mu_B B\hbar}{2} \pm \frac{1}{2}\sqrt{\frac{9}{4}A^2\hbar^4 + A\hbar^2\mu_B B\hbar + \mu_B^2 B^2\hbar^2}$

$E_{4,5} = -\frac{A\hbar^2}{4} - \frac{\mu_B B\hbar}{2} \pm \frac{1}{2}\sqrt{\frac{9}{4}A^2\hbar^4 - A\hbar^2\mu_B B\hbar + \mu_B^2 B^2\hbar^2}$

$E_6 = \frac{A}{2}\hbar^2 - 2\mu_B\hbar B$

~~Houd~~
Spec. esetek

$$1-\frac{1}{2} \le J \le 1+1/2$$
$$\frac{1}{2} \le J \le \frac{3}{2}$$

	Energia	Deg.
$J \to 3/2$	$E_{LS} = \frac{A\hbar^2}{2}$	$\times 4$
$J \to 1/2$	$E_{LS} = -A\hbar^2$	$\times 2$

(1) $B=0$

Tudjuk, hogy:

$$E_{LS} = \frac{A}{2}\hbar^2\left[J(J+1) - L(L+1) - S(S+1)\right]$$

Egyezik-e az eredménnyel? $(B=0)$

$$E_1 = \frac{A\hbar^2}{2} \qquad E_4 = \frac{A\hbar^2}{2}$$
$$E_2 = \frac{A\hbar^2}{2} \qquad E_5 = -A\hbar^2$$
$$E_3 = -A\hbar^2 \qquad E_6 = \frac{A\hbar^2}{2}$$

✓

(2) $E_{magn.} \ll E_{LS}$ $\quad (\mu_B B\hbar \ll A\hbar^2)$

$$E_{LS} + \mu_B B \cdot g \cdot J_z \qquad g = 1 + \frac{J(J+1) - L(L+1) + S(S+1)}{2J(J+1)}$$

$J = \frac{1}{2}$ $\qquad$ $J = \frac{3}{2}$

$$g_{\frac{1}{2}} = 1 + \frac{\frac{1}{2}\cdot\frac{3}{2} - 1\cdot 2 + \frac{1}{2}\cdot\frac{3}{2}}{2\cdot\frac{1}{2}\cdot\frac{3}{2}} = \frac{2}{3} \qquad g_{\frac{3}{2}} = 1 + \frac{\frac{3}{2}\cdot\frac{5}{2} - 1\cdot 2 + \frac{1}{2}\cdot\frac{3}{2}}{2\cdot\frac{3}{2}\cdot\frac{5}{2}} = \frac{4}{3}$$

Egyezik-e?

$$E_{2/3} = \frac{1}{2}\left(-\frac{A\hbar^2}{2} + \mu_B B\hbar \pm \frac{3}{2}A\hbar^2 \underbrace{\sqrt{1+\frac{4\mu_B B\hbar}{9A\hbar^2}}}_{1+\frac{2}{9}\frac{\mu_B B\hbar}{A\hbar^2}}\right) = \begin{cases} \frac{1}{2}A\hbar^2 + \frac{2}{3}\mu_B B\hbar & \leftarrow J = 3/2 \quad J_z = \frac{1}{2} \\ -A\hbar^2 + \frac{1}{3}\mu_B \hbar B & \leftarrow J = \frac{1}{2} \quad J_z = \frac{1}{2} \end{cases}$$

$g_{3/2}\cdot\frac{1}{2}$ $\qquad$ $g_{1/2}\cdot\frac{1}{2}$

$$g_{\frac{3}{2}} \cdot \left(-\frac{1}{2}\right)$$

$$E_{4,5} = \begin{cases} \frac{A\hbar^2}{2} - \frac{2}{3}\mu_B B\hbar \\ -A\hbar^2 - \frac{1}{3}\mu_B B\hbar \end{cases}$$

$J = \frac{3}{2}$ $J_z = -\frac{1}{2}$

$J = \frac{1}{2}$ $J_z = -\frac{1}{2}$

$$g_{\frac{1}{2}} \cdot \left(-\frac{1}{2}\right)$$

$$E_1 = \frac{A\hbar^2}{2} + 2\mu_B B\hbar$$

$J = \frac{3}{2}$ $J_z = \frac{3}{2}$

$$g_{\frac{3}{2}} \cdot \frac{3}{2}$$

$$E_6 = \frac{A\hbar^2}{2} - 2\mu_B \hbar B$$

$J = \frac{3}{2}$ $J_z = -\frac{3}{2}$

$$g_{3/2} \cdot \left(-\frac{3}{2}\right)$$

megkaptuk az összes

(3) $A = 0$ (nincs SL-csat.) → csak mágneses

$$\mu_B B \, (m_L + 2m_S)$$

$$E_1 = 2\mu_B B\hbar = \left(1 + 2\cdot\frac{1}{2}\right)\mu_B B\hbar$$

$$E_{2,3} = \frac{\mu_B B\hbar \pm \mu_B B\hbar}{2} = \begin{cases} \mu_B B\hbar \\ 0 \end{cases}$$

$$E_{4,5} = \frac{-\mu_B B\hbar \pm \mu_B B\hbar}{2} = \begin{cases} 0 \\ -\mu_B B\hbar \end{cases}$$

$$E_6 = -2\mu_B \hbar B$$

8. óra

(folyt.)

$$\hat{V} = A\,\underline{L}\,\underline{S} + \mu_B (L_z + 2S_z)\frac{B}{\cancel{\hbar}}$$

③ $A = 0$

$$E = \mu_B B \hbar\,(M_L + 2M_S)$$

	$E/\mu_B B\hbar$
$\lvert 1, 1/2\rangle$	~~$E/\mu_B B\hbar$~~ $1+2\cdot 1/2 = 2$
$\lvert 1, -1/2\rangle$	$1+2\cdot(-1/2) = 0$
$\lvert 0, 1/2\rangle$	$0+2\cdot(+1/2) = 1$
$\lvert 0, -1/2\rangle$	$0+2\cdot(-1/2) = -1$
$\lvert -1, 1/2\rangle$	$-1+2\cdot(1/2) = 0$
$\lvert -1, -1/2\rangle$	$-1+2\cdot(-1/2) = -2$

$\downarrow$

ilyenkor ezek

jó sajátállapotok

Variációszámítás

1) a) Normálás

$$u(\alpha, r) = N \cdot e^{-\alpha r} \qquad \underline{\text{áll.:}}\ N = \left(\frac{\alpha^3}{\pi}\right)^{1/2}$$

$$1 = \int d^3r\ u^2(\alpha, r) = N^2 \int d\Omega \int_0^\infty dr\ r^2 \cdot e^{-2\alpha r} = 4\pi N^2 \int_0^\infty dr\ r^2 \cdot e^{-2\alpha r} =$$

$y = 2\alpha r$

$$= 4\pi N^2 \cdot \frac{1}{(2\alpha)^3} \underbrace{\int_0^\infty dy\ y^2 \cdot e^{-y}}_{2} = \frac{\pi}{\cancel{2}} \cdot \frac{N^2 \cancel{2}}{\alpha^3}$$

$-3f$

$\Downarrow$

$$\Rightarrow 1 = \frac{\pi}{\alpha^3} N^2 \Rightarrow \underline{\underline{N = \left(\frac{\alpha^3}{\pi}\right)^{1/2}}}$$

b) Spin. szimm. → szimm. térbeli $\quad \Phi = \left(u(\alpha, r_1) \cdot u(\beta, r_2) + u(\beta, r_1) u(\alpha, r_2) \right) N$

<u>átfedési integrál</u> $\quad$ <u>Áll:</u> $N = \dfrac{1}{\left(2(1+S^2)\right)^{1/2}}$ ahol S

$$S = \int d^3 r \; u(\alpha, r) u(\beta, r) = \frac{(\alpha\beta)^{3/2}}{\pi} \int d\Omega \int_0^\infty dr\, r^2 \, e^{-(\alpha+\beta) r} = \frac{\cancel{4\pi}(\alpha\beta)^{3/2}}{\cancel{\pi}} \cdot \frac{1}{(\alpha+\beta)^3} \cdot$$

$(\alpha+\beta) r = y$

$$\underbrace{\int_0^\infty dy \, y^2 e^{-y}}_{2!} = \frac{8(\alpha\beta)^{3/2}}{(\alpha+\beta)^3} = \frac{8 x^{3/2}}{(1+x)^3} = S$$

$\frac{\beta}{\alpha} = x$

Normálás:

$$1 = N^2 \int d r_1^3 \int d r_2^3 \left(\underbrace{u^2(\alpha, r_1)}_{1} \underbrace{u^2(\beta, r_2)}_{1} + \underbrace{u^2(\beta, r_1)}_{1} \underbrace{u^2(\alpha, r_2)}_{1} + 2 \underbrace{u(\alpha, r_1) u(\beta, r_1)}_{S} \right.$$

$$\left. \underbrace{u(\alpha, r_2) \cdot u(\beta, r_2)}_{S} \right) = N^2 (1 + 1 + 2S^2) = 2 N^2 (1 + S^2)$$

$$\underline{\underline{N = \frac{1}{\sqrt{2 \cdot (1+S^2)}}}}$$

$$H = -\frac{1}{2}\left(\Delta_1 + \Delta_2\right) - \left(\frac{Z}{r_1} + \frac{Z}{r_2}\right) + \frac{1}{r_{12}} \leftarrow \text{a.e.}$$

$\langle\phi|$ $\qquad |\phi\rangle\langle\phi| \qquad |\phi\rangle\langle\phi|\ |\phi\rangle$

Kin.: $\langle\phi|-\frac{1}{2}(\Delta_1+\Delta_2)|\phi\rangle = \frac{-1}{2(2(1+S^2))}\int d^3r_1 \int d^3r_2 \Big[u(\alpha,r_1)\,u(\beta,r_2) +$

$u(\beta,r_1)\,u(\alpha,r_2)\Big]\cdot\Big[u(\beta,r_2)\,\Delta_1 u(\alpha,r_1) + u(\alpha,r_2)\,\Delta_1 u(\beta,r_1) +$

$+ u(\alpha,r_1)\,\Delta_2 u(\beta,r_2) + u(\beta,r_1)\,\Delta_2 u(\alpha,r_2)\Big] \underset{\uparrow}{=}$

simm. $r_1 \leftrightarrow r_2$ -ra $\downarrow$ $2\times$

$= \frac{-2}{4(1+S^2)}\int d^3r_1 \int d^3r_2 \Big[\overset{\int d^3r_2 \to 1}{u^2(\beta,r_2)}\,u(\alpha,r_1)\,\Delta_1 u(\alpha,r_1) +$

$\overset{\int d^3r_2 \to 1}{u^2(\alpha,r_2)}\,u(\beta,r_1)\,\Delta_1 u(\beta,r_1) + \underbrace{u(\alpha,r_2)\,u(\beta,r_2)}_{\int d^3r_2 \to S}\,u(\alpha,r_1)\,\Delta_1 u(\beta,r_1) +$

$+ \underbrace{u(\alpha,r_2)\,u(\beta,r_2)}_{\int d^3r_2 \to S}\,u(\beta,r_1)\,\Delta_1 u(\alpha,r_1) =$

$= \frac{-1}{2(1+S^2)}\int d^3r_1 \Big[u(\alpha,r_1)\,\Delta u(\alpha,r_1) + S\cdot u(\beta,r_1)\,\Delta u(\alpha,r_1) +$

$+ S\cdot u(\alpha,r_1)\cdot\Delta u(\beta,r_1) + u(\beta,r_1)\,\Delta u(\beta,r_1)\Big) = (*)$

wn:

$$\Delta u(\alpha, r) = \left(\frac{\alpha^3}{\pi}\right)^{1/2} \left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{d}{dr}\right) e^{-\alpha r} = \left(\frac{\alpha^3}{\pi}\right)^{1/2} \left[\alpha^2 - \frac{2\alpha}{r}\right] e^{-\alpha r}$$

$$(*) = \frac{-1}{2(1+S^2)} \underbrace{\int d\Omega}_{4\pi} \int dr\, r^2 \Big[\frac{\alpha^3}{\pi} e^{-2\alpha r}\left(\alpha^2 - \frac{2\alpha}{r}\right) + \frac{\beta^3}{\pi} e^{-2\beta r}\left(\beta^2 - \frac{2\beta}{r}\right) +$$

$$+ 2S\frac{(\alpha\beta)^{3/2}}{\pi} \cdot e^{-(\alpha+\beta) r} \cdot \left[\alpha^2 - \frac{2\alpha}{r} + \beta^2 - \frac{2\beta}{r}\right] \Big] = (**)$$

1. tag
$$\frac{4\cancel{\pi}\alpha^3}{\cancel{\pi}} \int_0^\infty dr\, r^2 \left(\alpha^2 - \frac{2\alpha}{r}\right) e^{-2\alpha r} = \frac{1}{2}\int_0^\infty dy\, y^2 \left(\alpha^2 - \frac{4\alpha^2}{y}\right) e^{-y} = -\alpha^2$$

$$y = 2\alpha r$$

$$\frac{1}{2}\left(\alpha^2 2! - 4\alpha^2 1!\right)$$

2. tag
$$4(\alpha\beta)^{3/2} \cdot \int_{-\infty}^{\infty} dr \cdot r^2 \left(\alpha^2 + \beta^2 - \frac{2\alpha}{r} - \frac{2\beta}{r}\right) \cdot e^{-(\alpha+\beta) r} =$$

$$y = (\alpha+\beta) r$$

$$= \frac{4(\alpha+\beta)^{3/2}}{(\alpha+\beta)^3} \int_0^\infty dy\, y^2 \Big(\alpha^2 + \beta^2 - 2(\alpha+\beta)\frac{(\alpha+\beta)}{y}\Big) e^{-y} = \frac{-16 \cdot (\alpha\beta)^{5/2}}{(\alpha+\beta)^3} = -2S\alpha\beta$$

$$\underbrace{2(\alpha^2+\beta^2) - 2(\alpha+\beta)^2 \cdot 1!}_{-4\alpha\beta}$$

biztos ?

$$(**) = \frac{-1}{2(1+S^2)} \left(-\alpha^2 - \beta^2 - 4S^2\alpha\beta\right) = \frac{\alpha^2 + \beta^2 + 4S^2\alpha\beta}{2(1+S^2)} = K$$

-41

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

$$\langle \phi | \frac{1}{r_{12}} | \phi \rangle = \frac{2}{2(1+S^2)} \int d^3r_1 \int d^3r_2 \cdot \Big[u^2(\alpha, r_1) \cdot u^2(\beta, r_2) + u(\alpha, r_1) \cdot$$

ϕ $r_1 \leftrightarrow r_2$-re

szimm., és r_{12} is

$$\cdot u(\beta, r_2)\, u(\alpha, r_2)\, u(\beta, r_2) \Big] \cdot \frac{1}{r_{12}} =$$

$$= \frac{1}{1+S^2} \int_0^\infty dr_1\, r_1^2 \int d\Omega_1 \int d\Omega_2 \int_0^\infty dr_2\, r_2^2 \Big(\frac{\alpha^3\beta^3}{\pi^2} e^{-2\alpha r_1} e^{-2\beta r_2} +$$

$$+ \frac{\alpha^3\beta^3}{\pi^2} \cdot e^{-(\alpha+\beta)\cdot(r_1+r_2)} \Big] \sum_{l=0}^\infty \frac{4\pi}{2l+1} \frac{r_<^l}{r_>^{l+1}} \underbrace{\sum_{m=-l}^{l} Y_l^m(\vartheta_1, \varphi_1) Y_l^m(\vartheta_2, \varphi_2)}_{} =$$

<u>all:</u> $\int d\Omega\, Y_l^m(\vartheta, \varphi) = \sqrt{4\pi}\, \delta_{l0} \delta_{m0}$

$$\cdot \sqrt{4\pi} \cdot \frac{1}{\sqrt{4\pi}} = \sqrt{4\pi} \cdot Y_0^0$$

$$= \frac{\alpha^3\beta^3}{\pi^2} \cdot 4\pi \cdot 4\pi \cdot \frac{1}{1+S^2} \left[\int dr_1 \int dr_2 \frac{r_1^2 r_2^2}{r_>} \Big[e^{-2\alpha r_1} e^{-2\beta r_2} + e^{-(\alpha+\beta)(r_1+r_2)} \Big] \right]$$

$$= \frac{16\,\alpha^3\beta^3}{1+S^2} \left[\int_0^\infty dr_2\, r_2^2\, e^{-2\beta r_2} \cdot \int_{r_2}^\infty dr_1 \frac{\overbrace{r_1^2}^{r_1}}{r_1} \cdot e^{-2\alpha r_1} + \int_0^\infty dr_1\, r_1^2 \cdot e^{-2\alpha r_1} \int_{r_1}^\infty dr_2\, r_2 \cdot e^{-2\beta r_2} + \right.$$

$$+\ 2\cdot\int_0^\infty dr_2\, r_2^2 \int_0^\infty dr_1\cdot r_1\cdot e^{-(\alpha+\beta)\cdot(r_1+r_2)}\Bigg] = \ \dots$$

$\sim\alpha$

$r_1 \leftrightarrow r_2$-ben

szimm. az integrandus

9. óra

a) folyt.

$$\langle \phi \,|\, \frac{1}{r_{12}} \,|\, \phi\rangle = \frac{16\alpha^3\beta^3}{1+S^2}\int_0^\infty dr_1 \int_0^\infty dr_2\, \frac{r_1^2 r_2^2}{r_>}\left(e^{-2\alpha r_1} e^{-2\beta r_2} + e^{-(\alpha+\beta)(r_1+r_2)}\right) =$$

$$= \frac{16\alpha^3\beta^3}{1+S^2}\Bigg[\int_0^\infty dr_1 \int_{r_1}^\infty dr_2\, r_1^2\, e^{-2\alpha r_1}\, r_2\, e^{-2\beta r_2} + \int_0^\infty dr_2 \int_{r_2}^\infty dr_1\, r_2^2\cdot e^{-2\beta r_2}\cdot r_1 e^{-2\alpha r_1} +$$

$$+\ 2\cdot\int_0^\infty dr_2\cdot r_2^2\cdot e^{-(\alpha+\beta) r_2}\int_{r_2}^\infty dr_1\, r_1\cdot e^{-(\alpha+\beta) r_1}\Bigg] = (*)$$

Mz:

$$\int_A^\infty dr\cdot r e^{-Br} = \frac{1}{B^2}\int_{BA}^\infty t e^{-t} dt = \frac{1}{B^2}\left[-(1+t)\, e^{-t}\right]_{AB}^\infty =$$

$t = Br$

$$= \frac{1}{B^2}(1+AB)\cdot e^{-AB}$$

$$(A) = \frac{16\alpha^3\beta^3}{1+S^2}\left[\frac{1}{4\alpha^2}\int_0^\infty dr_2\, r_2^2 (1+2\alpha r_2)\cdot e^{-2(\alpha+\beta)r_2} + \right.$$

$$+ \frac{1}{4\beta^2}\cdot\int_0^\infty dr_1\, r_2^2\, (1+2\beta r_1)\cdot e^{-2(\alpha+\beta)r_1} + \frac{2}{(\alpha+\beta)^2}\int_0^\infty dr_2\cdot r_2^2\cdot$$

$$\left.(1+(\alpha+\beta)r_2\right] e^{-2(\alpha+\beta)\cdot r_2} = \frac{16\alpha^3\beta^3}{1+S^2}\left[\frac{1}{4\alpha^2}\left(\frac{2}{8(\alpha+\beta)^3} + \frac{2\alpha\cdot 6}{16(\alpha+\beta)^4}\right) + \right.$$

$$\left. + \frac{1}{4\beta^2}\left(\frac{2}{8(\alpha+\beta)^3} + \frac{2\beta\cdot 6}{16(\alpha+\beta)^4}\right) + \frac{2}{(\alpha+\beta)^2}\left(\frac{2}{8(\alpha+\beta)^3} + \frac{6(\alpha+\beta)}{2\cdot(\alpha+\beta)^4}\right)\right] =$$

$$= \frac{\alpha\beta}{(1+S^2)(\alpha+\beta)^3}\left[\alpha^2+\beta^2+3\alpha\beta + \frac{20\,\alpha^2\beta^2}{(\alpha+\beta)^2}\right] \sim \alpha\cdot \Omega(x) \quad \frac{\beta}{\alpha}=x$$

ZH-ra érteni kell a levezetést! Ha ~~[illegible]~~ van ami változtatás az elejében, hogyan változik a vége?

1) H_2^+ ion:

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{N}}\left(\phi_{1s}(a|\underline{r}) + \phi_{1s}(b|\underline{r})\right) \qquad \phi_{1s}(a|\underline{r}) = \frac{1}{\sqrt{\pi}}e^{-r_a}$$

$$S = \langle \phi_{1s}(a|r) \,|\, \phi_{1s}(b|r)\rangle = \int d^3r\ \frac{1}{\pi}e^{-(r_a+r_b)} =$$

elliptikus koordináták:

$$\frac{r_a+r_b}{R} = \xi,\quad \frac{r_a-r_b}{R} = \eta,\quad \varphi,\quad d^3r = \frac{R^3}{8}(\xi^2-\eta^2)\,d\xi\, d\eta\, d\varphi$$

$$= \int_0^{2\pi} d\varphi \int_{-1}^{1} d\eta \int_1^\infty d\xi \cdot \frac{1}{\pi} \cdot e^{-R\xi} \cdot \frac{R^3}{8}\left(\xi^2-\eta^2\right) = \frac{R^3}{4}\int_{-1}^{1} d\eta \int_1^\infty d\xi \left(\xi^2-\eta^2\right) e^{-R\xi} =$$

$$= \frac{R^3}{4}\int_1^\infty d\xi \left(2\xi^2 - \frac{2}{3}\right) e^{-R\xi} = \frac{R^3}{2}\left\{\left[e^{-R\xi}\left(\frac{\xi^2}{-R} - \frac{2\xi}{(-R)^2} + \frac{2}{(-R)^3}\right)\right]_1^\infty - \right.$$

$$\left. - \frac{1}{3}\left[\frac{e^{-R\xi}}{-R}\right]_1^\infty \right\} = \frac{R^3}{2} e^{-R}\left(\frac{1}{R} + \frac{2}{R^2} + \frac{2}{R^3} - \frac{1}{3R}\right) = e^{-R}\left(\frac{1}{3}R^2 + R + 1\right) = S$$

$$\cancel{\frac{2}{3R}} + \cancel{\frac{1}{R^2}} + \cancel{\frac{1}{R^3}}$$

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{N}}\left(\phi_{1s}(a|\underline{r}) + \phi_{1s}(b|\underline{r})\right)$$

$$\langle\Psi|\Psi\rangle = \frac{1}{N}\left(\underbrace{\langle\phi_a|\phi_a\rangle}_{1} + \underbrace{\langle\phi_b|\phi_b\rangle}_{1} + 2\underbrace{\langle\phi_a|\phi_b\rangle}_{S}\right) = \frac{2(1+S)}{N} = 1$$

$$\Downarrow$$

$$N = 2(1+S)$$

$$\hat{H} = \overbrace{-\frac{\Delta}{2} - \frac{1}{r_a}}^{H_a} - \frac{1}{r_b} + \frac{1}{R}$$

$$E = \frac{\langle\Psi|H|\Psi\rangle}{\langle\Psi|\Psi\rangle} = \frac{1}{2(1+S)}\left(\underbrace{\langle\phi_a|H|\phi_a\rangle}_{H_{aa}} + \underbrace{\langle\phi_b|H|\phi_b\rangle}_{H_{bb}} + \right.$$

$$H_{aa} = H_{bb}$$

(mert ugyanazt fejezik ki)

$$\left. + \underbrace{\langle\phi_a|H|\phi_b\rangle}_{H_{ab}} + \underbrace{\langle\phi_b|H|\phi_a\rangle}_{H_{ba}}\right) =$$

$$H_{ab} = H_{ba}$$

$$= \frac{2(H_{aa}+H_{ba})}{2(1+S)} = \frac{H_{aa}+H_{ba}}{1+S}$$

$$H_{aa} = \langle \phi_a | \hat{H}_a + \frac{1}{R} - \frac{1}{r_b} | \phi_a \rangle = -\frac{1}{2}\langle \phi_a | \phi_a \rangle + \frac{1}{R}\langle \phi_a | \phi_a \rangle -$$

$$- \underbrace{\langle \phi_a | \frac{1}{r_b} | \phi_a \rangle}_{:= E_{aa}} = -\frac{1}{2} + \frac{1}{R} - E_{aa}$$

$$H_{ba} = \langle \phi_b | \hat{H}_a + \frac{1}{R} - \frac{1}{r_b} | \phi_a \rangle = -\frac{1}{2}\langle \phi_b | \phi_a \rangle + \frac{1}{R}\langle \phi_b | \phi_a \rangle -$$

$$- \underbrace{\langle \phi_b | \frac{1}{r_b} | \phi_a \rangle}_{E_{ba}} = \left(-\frac{1}{2} + \frac{1}{R}\right) S - E_{ba}$$

$$E_{aa} = \frac{1}{\pi} \underbrace{\int_0^{2\pi} d\varphi}_{2\pi} \cdot \frac{R^3}{8} \int_1^{\infty} d\xi \int_{-1}^{1} d\eta \underbrace{(\xi^2 - \eta^2)}_{\cancel{(\xi-\eta)}(\xi+\eta)} \frac{e^{-R(\xi+\eta)}}{\frac{R}{2}\cancel{(\xi-\eta)}} = \quad \leftarrow \frac{1}{r_b} = \frac{R}{2}\underbrace{(\xi-\eta)}_{\frac{2r_b}{R}}$$

$$= \frac{R^2}{2} \int_1^{\infty} d\xi \int_{-1}^{1} d\eta \, (\xi+\eta) e^{-R(\xi+\eta)} = \frac{R^2}{2}\left(\int_{-1}^{1} d\eta \, e^{-R\eta} \int_1^{\infty} d\xi \cdot \xi \cdot e^{-R\xi} + \right.$$

$$\left. + \int_1^{\infty} e^{-R\xi} d\xi \cdot \int_{-1}^{1} d\eta \cdot \eta \cdot e^{-R\eta} \right) = \frac{R^2}{2}\left[\left(\frac{e^{-R\eta}}{-R}\right)_{-1}^{1} \cdot \left(e^{-R\xi}\left(\frac{\xi}{-R} - \frac{1}{(-R)^2}\right)\right]_1^{\infty} + \right.$$

$$\left. + \left[\frac{e^{-R\xi}}{-R}\right]_1^{\infty} \cdot \left(e^{-R\eta}\left(\frac{\eta}{-R} - \frac{1}{(-R)^2}\right)\right]_{-1}^{1} \right] =$$

$$= \frac{R^2}{2}\left\{\left(\frac{e^{-R} - e^{R}}{-R}\right)\left(e^{-R}\left(\frac{1}{R} + \frac{1}{R^2}\right)\right) + \frac{e^{-R}}{R}\cdot\left(e^{-R}\left(\frac{1}{-R} - \frac{1}{R^2}\right) - e^{R}\cdot\left(\frac{-1}{-R} - \frac{1}{R^2}\right)\right)\right\}$$

$$= \frac{R^2}{2}\left(e^{-2R}\left(-\frac{1}{R^2} - \frac{1}{R^3}\right) - \frac{1}{R^2} - \frac{1}{R^3}\right) + 1\cdot\left(\cancel{\frac{1}{R^2}} + \frac{1}{R^3}\right) - \cancel{\frac{1}{R^2}} + \frac{1}{R^3}\Bigg)\Bigg) =$$

$$= \frac{1}{R}\left(1 - e^{-2R}(R+1)\right)$$

$$\underline{\underline{E_{ba}}} = \frac{1}{4\pi}\underbrace{2\pi}_{\int d\varphi} \cdot \frac{R^3}{8}\int_{-\infty}^{\infty} d\xi \int_{-1}^{1} d\eta\, (\xi^2 - \eta^2)\cdot\frac{\overbrace{e^{-R\xi}}^{e^{-(r_a + r_b)}}}{\frac{R}{2}(\xi - \eta)} =$$

$$= \frac{R^2}{2}\int_1^{\infty} d\xi \int_{-1}^{1} d\eta\, (\xi + \eta)\; e^{-R\xi} = \frac{R^2}{2}\int_1 d\xi\, (2\xi + 0)\, e^{-R\xi} =$$

$$= R^2 \int_1^{\infty} d\xi\, \xi \cdot e^{-R\xi} = \underline{\underline{e^{-R}(R+1)}}$$

10. da

1) (Adyf.)

$$E_{aa} = \frac{1}{R}\left\{1 - e^{-2R}(1+R)\right\}$$

$$E_{ab} = e^{-R}(R+1)$$

$$E = \frac{H_{aa} + H_{ab}}{1+S} = \frac{\left(-\frac{1}{2} + \frac{1}{R}\right) - E_{aa} + \left(-\frac{1}{2} + \frac{1}{R}\right)S - E_{ab}}{1+S} =$$

$$= -\frac{1}{2} + \frac{1}{R} - \frac{E_{aa} + E_{ab}}{1+S} = -\frac{1}{2} + \frac{1}{R} - \frac{\frac{1}{R}\left\{1 - e^{-2R}(1+R)\right\} + e^{-R}(1+R)}{1 + e^{-R}\left(1 + R + \frac{R^2}{3}\right)}$$

- Ennek lehet keresni R szerint a minimumát
- további var. számítás: $Z' = \alpha Z$ → α szerint variáltatunk

2) Hund-szabályok

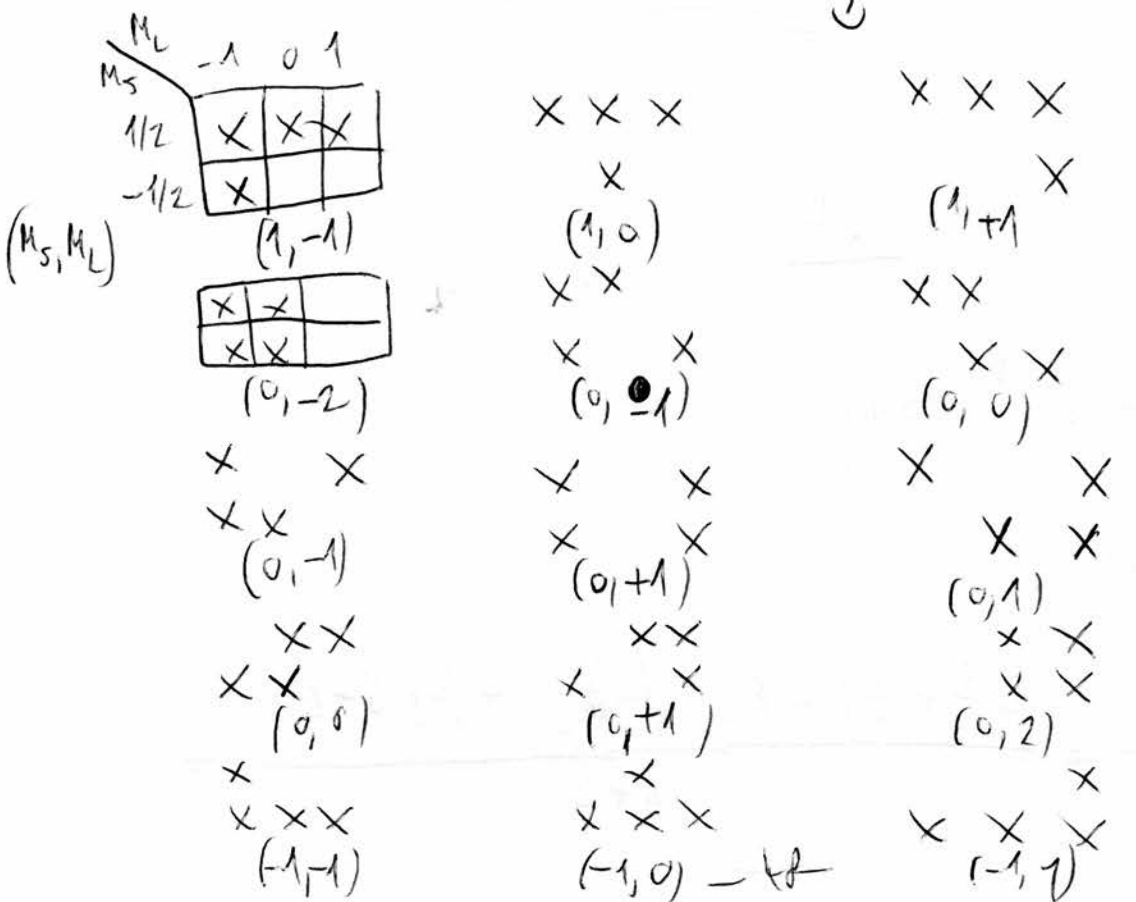
(1) S max

(2) L max lehetséges állapotok terén

(3) $\underbrace{\bar{e}\text{-ok}}_{\text{száma a külső héjon}} \leq 2l+1$ $J \to \min$ $J = |L-S|$

-||- $> 2l+1$ $J \to \max$ $J = L+S$

O: $(1s)^2 (2s)^2 (2p)^4$ $\binom{6}{2} = 15$



M_L \ M_S	+1	0	-1
-2		I	
-1	I	II	I
0	I	III	I
1	I	II	I
2		I	

$\left.\begin{array}{l} L=2 \\ S=0 \end{array}\right\} {}^1D$

kiválasztjuk a max. vetülettel megkapható állapotokat

	1	0	-1
-2			
-1			
0		1	
1			
2			

$\left.\begin{array}{l} S=0 \\ L=0 \end{array}\right\} {}^1S$

$\longleftarrow$ $\left.\begin{array}{l} L=1 \\ S=1 \end{array}\right\} {}^3P$

	+1	0	-1
-2			
-1	1	1	1
0	1	11	1
+1	1	1	1
+2			

spin L-ből

${}^1D \quad (1\cdot 5 = 5\times \text{ degen.})$

${}^3P \quad (3\cdot 3 = 9\times)$

${}^1S \quad (1\cdot 1 = 1\times)$

ilyen állapotok vannak $\rightarrow$ Hund I

$${}^3P < {}^1S, {}^1D$$

$\downarrow$ $\leftarrow$ Hund-II

$${}^3P < {}^1D < {}^1S$$

Hund-III $\downarrow$

$S=1 \quad L=1 \quad J=2$

$\Downarrow \quad 4 > \overset{2L+1}{3} \Rightarrow J \max$

$\boxed{{}^3P_2}$ az alapállapot

(alapállapothoz elég a dobozokat nézni

pl. $L_z=3$, $S_z=5$ $\Rightarrow$ $\cancel{L=3}$, $\cancel{S=5}$

nincs, áll. nincs

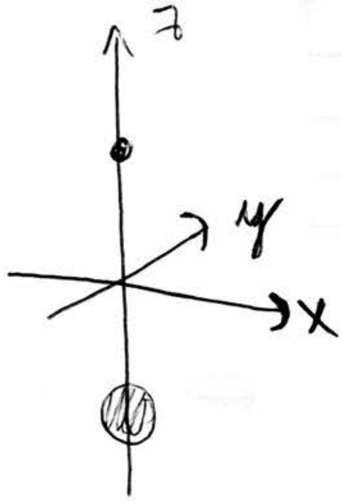
max. vetületből

3) Szimmetriák:

$\hat{L}_z$-nek $\hbar\Lambda$-val s.é.

$\Lambda = 0 \quad 1 \quad 2 \quad 3$

$\Sigma \quad \Pi \quad \Delta \quad \Phi$



y-z sík $\sigma_v = \pm 1$

inverzió: gerade, ungerade
$+1 \qquad -1$

$^{2S+1}\Sigma^{\pm, *}_{g/u}$

Ha a 2 atom azonos:

x, y sík $\sigma_d = \pm 1 \qquad +1 \qquad -1$
nincs * $\qquad$ *

O_2:

$^3\Sigma_g^- \qquad ^1\Sigma_g^+$

Λ : $0 \qquad 0 \quad (\Sigma)$

inverzió: $+1 \;(g) \qquad +1 \;(g)$

S : $1 \;(3) \qquad 0 \;(1)$

σ_v : $-1 \;(-) \qquad +1 \;(+)$

σ_d : $+1 \qquad +1$ (nincs *)

4) Hartree - Fock egyenletek

Be: $(1s)^2 \; (2s)^2$

úgy képzeljük el, hogy a 4 e^- kialakít egy teret, majd ebbe tesszük bele ~~az egyiket~~ egy új e^--t (ami valójában az egyik ~~régi~~ e^-)

$$\left.\begin{aligned}
\varphi_1(\underline{r},s) &= \phi_{1s}(\underline{r})\,\alpha(s)\\
\varphi_2(\underline{r},s) &= \phi_{1s}(\underline{r})\,\beta(s)\\
\varphi_3(\underline{r},s) &= \phi_{2s}(\underline{r})\,\alpha(s)\\
\varphi_4(\underline{r},s) &= \phi_{2s}(\underline{r})\,\beta(s)
\end{aligned}\right\}
\quad
\begin{vmatrix}
\varphi_1(r_1,s_1) & \varphi_1(r_2,s_2) & \varphi_1(r_3,s_3) & \dots\\
\varphi_2(r_1,s_1) & \ddots & & \\
\varphi_3(r_1,s_1) & & \ddots & \\
\varphi_4(\underline{r}_1,s_1) & \dots & & \ddots
\end{vmatrix}$$

$$H = \underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta - \frac{Ze_0^2}{|\underline{r}|}}_{H^{(1)}} + \frac{e_0^2}{|\underline{r}_{12}|}$$

$\hookrightarrow C \rightarrow U(\underline{r})$

$\hookrightarrow K \rightarrow \dots$

a 4 e^- által létrehozott Cb.-tér

$$U(\underline{r}) = \sum_{s'} \int d^3r' \frac{e_0^2}{|\underline{r}-\underline{r}'|}\Big(|\phi_{1s}(\vec{r}\,')|^2\cdot\alpha^2(s') + |\phi_{1s}(\vec{r}\,')|^2\cdot\beta^2(s') +$$

$$+ |\phi_{2s}(\underline{r}')|^2\cdot\alpha^2(s') + |\phi_{2s}(\underline{r}')|^2\cdot\beta^2(s')\Big) =$$

$$= 2\int d^3r' \frac{e_0^2}{|\vec{r}-\vec{r}\,'|}\cdot\left(|\phi_{1s}(\vec{r}\,')|^2 + |\phi_{2s}(\vec{r}\,')|^2\right)$$

mert 2 e^- van 1s és 2 e^- a 2s pályán

$$\hat{K}\,\varphi_{1s}(\vec{r})\,\alpha(s) = \sum_{s'} \int d^3r' \frac{e_0^2}{|\vec{r}-\vec{r}'|}\,\varphi_{1s}(\vec{r}')\,\alpha(s')\,\cdot$$

$$\cdot\Big(\varphi_{1s}(r)\,\alpha(s)\,\varphi_{1s}^*(r')\,\alpha(s') + \cancel{\varphi_{1s}(r)\,\beta(s)\,\varphi_{1s}^*(r')\,\beta(s')} +$$

$$+\ \varphi_{2s}(r)\,\alpha(s)\,\varphi_{2s}^*(r')\,\alpha(s') + \cancel{\varphi_{2s}(r)\,\beta(s)\,\varphi_{2s}^*(r')}\,\beta(s')\Big) =$$

$\sum_{s'} \alpha(s')\,\alpha(s') = 1$

$\sum_{s'} \alpha\,\beta(s')$-val esek kiesnek

$$= \int d^3r' \frac{e_0^2}{|\underline{r}-\underline{r}'|}\Big(|\varphi_{1s}(r')|^2\,\varphi_{1s}(r) +$$

$$+\ \varphi_{1s}(r')\,\varphi_{2s}^*(r')\,\varphi_{2s}(r)\Big)$$

$$\Downarrow$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta - \frac{Ze_0^2}{r} + 2\int d^3r' \frac{e_0^2}{|\underline{r}-\underline{r}'|}\left(|\varphi_{1s}(\vec{r}')|^2 + |\varphi_{2s}(\vec{r}')|^2\right)\right]\varphi_{1s}(\underline{r}) +$$

$$- \int d^3r' \frac{e_0^2}{|\underline{r}-\underline{r}'|}\Big(|\varphi_{1s}(r')|^2\,\varphi_{1s}(\underline{r}) + \varphi_{1s}(r')\,\varphi_{2s}^*(r')\,\varphi_{2s}(r)\Big) =$$

$$= \varepsilon_1\,\varphi_{1s}(\underline{r})$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta - \frac{Ze_0^2}{r} + 2\int d^3r' \frac{e_0^2}{|\underline{r}-\underline{r}'|}\left(|\varphi_{1s}(r')|^2 + |\varphi_{2s}(r')|^2\right)\right]\varphi_{2s}(\underline{r}) +$$

$$- \int d^3r' \frac{e_0^2}{|\underline{r}-\underline{r}'|}\Big(|\varphi_{2s}(r')|^2\,\varphi_{2s}(\underline{r}) + \varphi_{2s}(r')\,\varphi_{1s}^*(r')\,\varphi_{1s}(r)\Big) =$$

$$= \varepsilon_2\,\varphi_{2s}(\underline{r})$$

ZH-n lehet:

- szimmetriák
- Hund-szabály
- H-F.-egy.
- elliptikus integrálok
- variációs módszer
- spin-pálya-kh.

integrálokat nem kell végigszámolni, füzetből lehet eredményt használni

ATOM- ÉS MOLEKULAFIZIKA GYAKORLAT

1. ZÁRTHELYI (2013. 10. 15.)

1. Mutassuk meg, hogy a $C_{2s,2s}$ Coulomb-integrál értéke $\frac{77}{512}\frac{e_0^2}{a_0}Z$!

2. Vegyük a $\boldsymbol{j}^{(1)}$ és $\boldsymbol{j}^{(2)}$ egyrészecske operátorokat, mely komponenseire teljesülnek a szokásos kommutációk: $\left[j_k^{(a)}, j_l^{(b)}\right] = i\hbar\delta_{a,b}\epsilon_{klm}j_m^{(a)}$. Ezek a vektoroperátorok az alábbi módon hatnak a $\left|1, m^{(a)}\right\rangle_{(a)}$ alakban felírt egyrészecskés sajátállapotaikon:

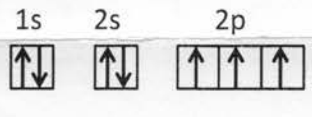
$$\boldsymbol{j}^{(a)}\boldsymbol{j}^{(a)}\left|1, m^{(a)}\right\rangle_{(a)} = 2\hbar^2\left|1, m^{(a)}\right\rangle_{(a)}$$

$$j_z^{(a)}\left|1, m^{(a)}\right\rangle_{(a)} = \hbar m^{(a)}\left|1, m^{(a)}\right\rangle_{(a)}$$

Ahol $a = 1, 2$ és $m^{(a)} = -1, 0, 1$ értékeket vehet föl.

Legyen $\boldsymbol{J} = \boldsymbol{j}^{(1)} + \boldsymbol{j}^{(2)}$! (Azaz $J_i = j_i^{(1)} + j_i^{(2)}$.) Az $\left|1, m^{(1)}\right\rangle_{(1)}\left|1, m^{(2)}\right\rangle_{(2)}$ szorzatokból állítsuk elő J_3 és $\boldsymbol{J}\boldsymbol{J}$ összes szimultán sajátfüggvényét!

3. A nitrogén alapállapota a megszokott ,,kémia órai" jelöléssel:



(a) Írjuk fel a hozzá tartozó Slater-determinánst!

(b) Mutassuk meg, hogy ez az állapot $\boldsymbol{L}^2$, L_z, $\boldsymbol{S}^2$, S_z, $\boldsymbol{J}^2$, J_z sajátállapot! Mik a sajátértékek? Írjuk fel az állapot jelét is!

(c) Hány különböző állapotot jelölhet az előbb megkapott jel? (∃ degeneráció!)

4. A Be atom alapállapoti konfigurációja: $(1s)^2(2s)^2$. Ennek az állapotnak peturbáció számítással határozzuk meg az energiáját! Perturbációs tagnak tekintsük az elektron-elektron taszítást!

(a) A perturbáció nullad rendjében mennyi az állapot energiája?

(b) Mennyi az elsőrendű energiakorrekció? Mennyi az állapot elsőrendű perturbációszámítással kapott energiája?

Néhány Coulomb-, iletve kicserélődési-integrál értéke: $C_{1s,1s} = \frac{5}{8}\frac{e_0^2}{a_0}Z$, $C_{1s,2s} = \frac{17}{81}\frac{e_0^2}{a_0}Z$, $K_{1s,2s} = \frac{16}{729}\frac{e_0^2}{a_0}Z$, $C_{2s,2s} = \frac{77}{512}\frac{e_0^2}{a_0}Z$. Amennyiben további integrálok is szükségesek, akkor használjuk azok betűs-indexes jelölését!

Jó munkát kívánok!

Atom- és molekulafizika gyakorlat

2. Zárthelyi (2013. 12. 11.)

1. Hund-szabályok alapján adjuk meg az $(1s)^2(2s)^2(2p)^3$ elektronszerkezetű nitrogénatom legalacsonyabb energiájú állapotát!

2. Adjuk meg a $\hat{V} = A\underline{\hat{L}}\cdot\underline{\hat{S}}+\frac{\mu_B B}{\hbar}\left(\hat{L}_z + 2\hat{S}_z\right)$ operátor mátrixelemeit egy ^{2}D állapotú atomra az $|M_L, M_S\rangle$ bázisokat használva! (Szükség esetén használjuk az $\alpha = A\hbar^2$ és $\beta = B\mu_B$ konstansokat!)

3. Az oxigén molekula (O_2) egy gerjesztett állapota a $^1\Delta_g^+$. Milyen kvantumszámokat tudunk kiolvasni az állapotból?

4. Adjuk meg az alábbi mátrixelemeket!

   (a) $\left\langle L, M_L \middle| \hat{L}_x \middle| L, M_L \right\rangle$

   (b) $\left\langle L, M_L \middle| \hat{L}^+ \middle| L, M_L' \right\rangle$

   (c) $\left\langle L, M_L \middle| \hat{L}^- \middle| L, M_L' \right\rangle$

5. Legyen

$$\phi = \frac{1}{\sqrt{2(1+S^2)}}\left(u\left(\alpha|\underline{r}_1\right)u\left(\beta|\underline{r}_2\right) + u\left(\beta|\underline{r}_1\right)u\left(\alpha|\underline{r}_2\right)\right)^1\chi(s_1, s_2)$$

   a hélium atom egy variációs hullámfüggvénye! ($u\left(\alpha|\underline{r}\right) = \left(\frac{\alpha^3}{\pi}\right)^{1/2}e^{-\alpha r}$, ahol α variációs paraméter.)

   Lássuk be, hogy a $\left\langle\phi\middle| -Z\left(\frac{1}{r_1}+\frac{1}{r_2}\right)\middle|\phi\right\rangle$ magpotenciálból származó energiatag értéke $-Z(\alpha+\beta)$!

6. Vizsgáljuk a H_2^+-t a $\psi = \eta\exp(-a\xi)\cdot{}^2\chi(s)$ hullámfüggvény ansatzcal (η és ξ a szokásos elliptikus koordináták), ami egy gerjesztett állapotot ír le!

   (a) Számoljuk ki az energia-funkcionál értékét!

   (b) Adjuk meg az ansatzot jellemző kvantumszámokat!

7. Írjuk fel a Hartree-Fock egyenleteket a hélium $(1s)^2$ alapállapotára!

Jó munkát kívánok!