

# ATOM- ÉS MOLEKULAFIZIKA GYAKORLAT

## 1. ZÁRTHELYI (2013. 10. 15.)

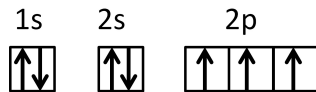
1. Mutassuk meg, hogy a  $C_{2s,2s}$  Coulomb-integrál értéke  $\frac{77}{512} \frac{e_0^2}{a_0} Z!$
2. Vegyük a  $\mathbf{j}^{(1)}$  és  $\mathbf{j}^{(2)}$  egyrészecske operátorokat, mely komponenseire teljesülnek a szokásos kommutációk:  $[j_k^{(a)}, j_l^{(b)}] = i\hbar \delta_{a,b} \epsilon_{klm} j_m^{(a)}$ . Ezek a vektoroperátorok az alábbi módon hatnak a  $|1, m^{(a)}\rangle_{(a)}$  alakban felírt egyrészecskés sajátállapotaikon:

$$\begin{aligned} \mathbf{j}^{(a)} \mathbf{j}^{(a)} |1, m^{(a)}\rangle_{(a)} &= 2\hbar^2 |1, m^{(a)}\rangle_{(a)} \\ j_z^{(a)} |1, m^{(a)}\rangle_{(a)} &= \hbar m^{(a)} |1, m^{(a)}\rangle_{(a)} \end{aligned}$$

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

Legyen  $\mathbf{J} = \mathbf{j}^{(1)} + \mathbf{j}^{(2)}$ ! (Azaz  $J_i = j_i^{(1)} + j_i^{(2)}$ .) Az  $|1, m^{(1)}\rangle_{(1)} |1, m^{(2)}\rangle_{(2)}$  szorzatokból állítsuk elő  $J_3$  és  $\mathbf{J}\mathbf{J}$  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  $\mathbf{L}^2$ ,  $L_z$ ,  $\mathbf{S}^2$ ,  $S_z$ ,  $\mathbf{J}^2$ ,  $J_z$  sajátállapot! Mik a sajátértékek? Írjuk fel az állapot jelét is!
  - (c) Hány különböző állapotot jelölhet az előbb megkapott jel?
4. A Be atom alapállapoti konfigurációja:  $(1s)^2(2s)^2$ . Ennek az állapotnak peturbáció számítással határozzuk meg az energiáját! Perturbációs tagnak tekintjük az elektron-elektron taszítást!
    - (a) A perturbáció nullad rendjében mennyi az állapot energiája?
    - (b) Mennyi az elsőrendű energiakorrekció? Mennyi az állapot elsőrendű perturbációs számítással kapott energiája?

Néhány Coulomb-, illetve 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!*