

ATOM- ÉS MOLEKULAFIZIKA GYAKORLAT

1. Zárthelyi (2014. 10. 13.)

1. Mutassuk meg, hogy a $K_{1s,2s}$ kicserélődési integrál értéke $\frac{16}{729} \frac{e_0^2}{a_0} Z!$
2. Vegyük az $\hat{\mathbf{s}}^{(1)}$, $\hat{\mathbf{s}}^{(2)}$, $\hat{\mathbf{s}}^{(3)}$ egyrészecske spin-operátorokat! Ezek az $\alpha_i = |1/2, +1/2\rangle_{(i)}$ és $\beta_i = |1/2, -1/2\rangle_{(i)}$ sajátállapotaikon ($i \in \{1, 2, 3\}$) a megszokott módon hatnak.
Legyen $\hat{\mathbf{S}} = \hat{\mathbf{s}}^{(1)} + \hat{\mathbf{s}}^{(2)} + \hat{\mathbf{s}}^{(3)}$! Az $|1/2, m^{(1)}\rangle_{(1)} |1/2, m^{(2)}\rangle_{(2)} |1/2, m^{(3)}\rangle_{(3)}$ szorzatok lineárkombinációiból állítsuk elő az \hat{S}_z és $\hat{\mathbf{S}}^2$ összes szimultán sajátfüggvényét!
3. Vizsgáljuk a 3d pályára az alábbi módon elhelyezett 5 db elektron alkotta rendszert!
"Kémia órai" jelöléssel:

3d



- (a) Írjuk fel a hozzá tartozó Slater-determinánst!
 - (b) Mutassuk meg, hogy ez az állapot $\hat{\mathbf{L}}^2$, \hat{L}_z , $\hat{\mathbf{S}}^2$, \hat{S}_z , $\hat{\mathbf{J}}^2$, \hat{J}_z sajátállapot! Mik a sajátértékek? Írjuk fel az állapot jelét is!
 - (c) Hány különböző állapotot jelölhet az előbb megadott jel?
4. A Li atom alapállapotú konfigurációja: $(1s)^2(2s)^1$. Legyen a 2s pályán lévő elektron spinje α ! Ennek az állapotnak perturbációszámítással határozzuk meg az energiáját! Perturbációs tagnak az elektronok közötti taszítást tekintjük!
 - A perturbáció nullad rendjében mennyi az állapot energiája?
 - Mennyi az elsőrendű korrekció? Mennyi az állapot elsőrendű perturbációszámítással kapott energiája?

Használjuk a jegyzetben található Coulomb- és kicserélődési integrálok értékeit! Amennyiben további integrálok is szükségesek, akkor használjuk azok betűs-indexes jelölését!

Jó munkát kívánok!