

# 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  $\hat{V} = A\hat{L}\cdot\hat{S} + \frac{\mu_B B}{\hbar} (\hat{L}_z + 2\hat{S}_z)$  operátor mátrixelemeit egy  ${}^2D$  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)  $\langle L, M_L | \hat{L}_x | L, M_L \rangle$

(b)  $\langle L, M_L | \hat{L}^+ | L, M'_L \rangle$

(c)  $\langle L, M_L | \hat{L}^- | L, M'_L \rangle$

5. Legyen

$$\phi = \frac{1}{\sqrt{2(1+S^2)}} (u(\alpha|r_1)u(\beta|r_2) + u(\beta|r_1)u(\alpha|r_2)) \chi(s_1, s_2)$$

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

Lássuk be, hogy a  $\langle \phi | -Z \left( \frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2} \right) | \phi \rangle$  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 ( $\eta$  és  $\xi$  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!*