

Teszt kérdések. Töltéscsere proton és hidrogénatom ütközése során.

1. Számoljuk ki, hogy egy 50 keV (mozgási) energiájú elektron sebessége a fénysebesség ($c \approx 3 \times 10^8$ m/s) hány százaléka! ($m_e = 9.1 \times 10^{-31}$ kg)
2. Ha ismerjük, hogy a proton tömege körülbelül 1836-szor nagyobb az elektron tömegénél, hány eV-os mozgási energiával kell rendelkeznie annak a protonnak, amelyet a fénysebesség 90%-ra szeretnénk felgyorsítani (nem relativisztikus tárgyalás)?
3. Ha tudjuk, hogy 1 torr nyomásnak megfelel 1 higanymilliméter, és 1 fizikai atmoszféra kb. 760 torr, az atmoszféra hány százalékát jelenti az 1 mmHg, valamint a 10^{-2} mmHg?
4. Vázold röviden, a laborleírásban tárgyalt kísérlet menetét, a kísérleti berendezések megemlítésével együtt!
5. A H^+ és H ütközésének kvantummechanikai tárgyalása (+ rajzzal)!
6. Mi a különbség a molekuláris kötő- és lazító pályák között? (+ rajz)!
7. Mikor mondjuk azt egy molekula pályájára, hogy *gerade* és *ungerade* (rajz)? Például egy kétatomos molekula esetében melyik szimmetriaművelettel határozható meg?
8. Mit értünk két hidrogénatom (a,b) alapállapotainak ($\phi_{1s}(a|\vec{r})$; $\phi_{1s}(b|\vec{r})$) átfedési integrálján (S), és hogyan számoljuk ezt? (magyarázat szerepelhet rajz is)
9. Mit értünk LCAO módszeren?
10. A H_2^+ hamiltonoperátora atomi egységekben ($m_e = 1$; $e = 1$; $\hbar = 1$; $1/4\pi\epsilon_0 = 1\dots$):

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

Nevezd meg az összefüggésben szereplő mennyiségeket, és írd fel általános formában, atomi egységek használata nélkül egy Z_1 és Z_2 rendszámú két atom által alkotott molekula Hamiltonoperátorát! Vigyázat! Nem csak egy elektron van, mint a H_2^+ esetében!

11. A H_2^+ alapállapot (Ψ) energiája (E) a következő képpen számolható az LCAO módszert alkalmazva:

$$E = E[\Psi] = \int \Psi^* \hat{H} \Psi d\vec{r} = \frac{H_{aa} + H_{bb} + H_{ab} + H_{ba}}{2(1+S)} = \frac{H_{aa} + H_{ba}}{1+S}, \text{ ahol } \Psi(1s\sigma_g) = \frac{1}{\sqrt{2(1+S)}} (\phi_{1s}(a|\vec{r}) + \phi_{1s}(b|\vec{r}))$$

Milyen integrálokat jelölnek a fenti összefüggésben szereplő H_{ij} mennyiségek?

12. Felhasználva a 10, 11-es feladatok összefüggéseit, és tudva, hogy

$$\left(-\frac{1}{2}\Delta - \frac{1}{r_a}\right) \phi_{1s}(a|\vec{r}) = -\frac{1}{2}\phi_{1s}(a|\vec{r}); \quad \text{valamint } \hat{H} = \left(-\frac{1}{2}\Delta - \frac{1}{r_a}\right) - \frac{1}{r_b} + \frac{1}{R} \quad (0.1)$$

a következő összefüggésekhez jutunk:

$$H_{aa} = -\frac{1}{2} + \frac{1}{R} - J; \quad \text{valamint } H_{ba} = -\frac{1}{2}S + \frac{S}{R} - K. \quad (0.2)$$

Melyik jelöli fentebb a Kicszerélődési és a Coulomb tagot, mit értünk ezek alatt, és hogyan nézne ki integrál formában az alakjuk?