Kvantummechanika 2. ZH megoldások **(2009/10 tavaszi félév)**

1. feladat Feladatunk meghatározni, hogy a hullámfüggvényben milyen gömbfüggvények fordulnak elő. Végezzük el a következő azonos átalakításokat:

$$\psi(r,\theta,\varphi) = R(r)\cdot\Big[\sin^2\theta\cdot\sin(2\varphi)+\sin(2\theta)e^{i\varphi}+\cos^2\theta\Big]$$

$$= R(r)\cdot\Big[\sin^2\theta\cdot\frac{e^{2i\varphi}}{2i}-\sin^2\theta\cdot\frac{e^{-2i\varphi}}{2i}+2\sin\theta\cos\theta e^{i\varphi}+\Big(\cos^2\theta-\frac{1}{3}\Big)+\frac{1}{3}\Big].$$

Észrevehető, hogy a zárójelben az összes tag valamelyik gömbfüggvénnyel arányos:

$$\psi(r,\theta,\varphi) = R(r)\cdot\Big[A\cdot Y_2^2+B\cdot Y_2^{-2}+C\cdot Y_2^1+D\cdot Y_2^0+E\cdot Y_0^0\Big].$$

Ez azt jelenti, hogy az l, m kvantumszámokra következő értékek jöhetnek szóba:

l	m
2	2
2	-2
2	1
2	0
0	0

L^2 -re $\hbar^2\cdot l(l+1)$, L_z -re $\hbar\cdot m$ mérhető.

2. feladat A hidrogénatom energia sajátfüggvényei:

$$\Psi_{nlm} = r^l u_{nl}(r)e^{-\frac{r}{na_0}}Y_l^m(\theta,\varphi).$$

Jelen esetben (használva u_{21} képletét):

$$\Psi_{21m} = \Big(\frac{1}{2a_0}\Big)^{3/2}\frac{r}{\sqrt{3}a_0}e^{-\frac{r}{2a_0}}Y_1^m(\theta,\varphi).$$

Az energia korrekciója első közelítésben:

$$\Delta E = \Big(\Psi_{21m},\frac{C}{r^3}\Psi_{21m}\Big) = \int dV\,\Psi^*_{21m}\frac{C}{r^3}\Psi_{21m}.$$

Behelyettesítjük a hullámfüggvényt, majd az integrált szétválasztjuk radiális változó és szögek szerint:

$$\Delta E = \Big(\frac{1}{2a_0}\Big)^3\frac{C}{3a_0^2}\int_0^\infty dr\,re^{-\frac{r}{a_0}}\int d\Omega(Y_1^m)^*Y_1^m.$$

A gömbfüggvényekre vett szögintegrál az ortonormáltság miatt éppen 1, a radiális integrál pedig az $\tilde{r} = r/a_0$ új változó bevezetésével végezhető el:

$$\Delta E = \frac{C}{24a_0^3}\int_0^\infty d\tilde{r}\tilde{r}e^{-\tilde{r}} = -\frac{C}{24a_0^3}\int_0^\infty d\tilde{r}\tilde{r}\frac{d}{d\tilde{r}}e^{-\tilde{r}} = \frac{C}{24a_0^3}\int_0^\infty d\tilde{r}e^{-\tilde{r}} = \frac{C}{24a_0^3}.$$

3. feladat A Hamilton operátor:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} - \gamma\delta(\hat{x}).$$

Az energia átlaga a $\Psi = e^{-ax^2}$ próbafüggvény állapotában:

$$< E >_\Psi = \frac{(\Psi, \hat{H}\Psi)}{(\Psi, \Psi)} = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2}\Big(- \frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} - \gamma\delta(x)\Big)e^{-ax^2}dx}{\int_{-\infty}^{\infty} e^{-2ax^2}dx}$$

A nevező (ld. gyakorlat) $\sqrt{\frac{\pi}{2a}}$, a számláló első tagja (ld. gyakorlat) $\sqrt{2a\pi}\frac{\hbar^2}{4m}$, a számláló második tagja pedig

$$-\gamma\int_{-\infty}^{\infty} e^{-2ax^2}\delta(x)dx = -\gamma.$$

Az energia átlaga ezzel:

$$< E >_\Psi = a\frac{\hbar^2}{2m} - \frac{\gamma}{\sqrt{\pi}}\sqrt{2a}.$$

A minimumhely ott van, ahol a derivált eltűnik:

$$\frac{\partial}{\partial a} < E >_\Psi = \frac{\hbar^2}{2m} - \frac{\gamma}{\sqrt{2\pi}}\frac{1}{\sqrt{a}} = 0 \qquad \rightarrow \qquad a = \frac{2\gamma^2}{\pi}\Big(\frac{m}{\hbar^2}\Big)^2.$$

A kapott értéket visszahelyettesítjük az energia átlagának kifejezésébe, összevonás után kapjuk a variációs közelítés eredményét:

$$E \approx -\frac{m\gamma^2}{\pi\hbar^2}.$$

Megjegyezzük, hogy az egzakt eredmény

$$E_{egzakt} = -\frac{m\gamma^2}{2\hbar^2},$$

ami természetesen kisebb, mint a közelítő megoldás.