Kvantummechanika 1 gyakorlat

**10. gyakorlat** 2023. május 9.

**1. a)** Bizonyítsuk be a felcserélési relációk segítségével az általánosított viriál tételt:

$$2\langle n|T|n\rangle = \left\langle n|\vec{r}\cdot\vec{\nabla}V|n\right\rangle$$

ahol $|n\rangle$ a Hamilton operátor egy sajátállapota.
**b)** Mutassuk meg, hogy hidrogén atom esetén:

$$\langle n\ell m|V|n\ell m\rangle = 2E_n \quad \text{és} \quad \langle n\ell m|T|n\ell m\rangle = -E_n \quad ,$$

**2.** Mutassuk meg, hogy

$$\langle n\ell m|r|n\ell m\rangle = \frac{a_0}{2}\left[3n^2 - \ell(\ell+1)\right] \quad ,$$

ahol $a_0 = \frac{\hbar^2}{m\alpha}$ a Bohr-sugár, $E_n = -\frac{\alpha^2}{2\hbar^2 n^2} = -\frac{\alpha}{2a_0 n^2} = -\frac{\hbar^2}{2ma_0^2 n^2}$ és a potenciált $V(r) = -\frac{\alpha}{r}$ alakban írtuk ($\alpha = ke^2$)!

**3)** A $\varphi(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}e^{-\lambda r}$ próbafüggvény alkalmazásával, a variációs elv segítségével határozzuk meg a hidrogén atom alapállapoti hullámfüggvényét és energiáját!

---

**Házi feladatok**

- Hogyan módosul a hidrogén atom kötött állapotainak az energiája, ha a Coulomb potenciált Yukawa-potenciálra cseréljük:

$$V(r) = -ke^2\frac{e^{-\lambda r}}{r} \; .$$

  Számoljunk $\lambda$-ban másodrendig, azaz fejtsük sorba a Yukawa-potenciált és a sorfejtés tagjait hasonlítsuk össze a hidrogén atom potenciáljával. Használjuk az elsőrendű nemdegenerált perturbációszámítást!

- A H-atom alapállapoti sajátfüggvénye,

$$\psi_{100}(\vec{r}) = \frac{2e^{-r/a_0}}{a_0^{3/2}}Y_0^0(\theta,\phi) \; ,$$

  ismeretében közvetlenül lássa be, hogy

$$\langle 100|V|100\rangle = 2E_1$$

  és

$$\langle 100|T|100\rangle = -E_1 \; .$$

- Adja meg a $Z$ töltésű atommag Coulomb-terében, $V(r) = -\frac{Zke^2}{r}$, mozgó elektron kötött állapotainak energiáit! $Z+1$ töltésű atommag esetén tekintsük perturbálatlan potenciálnak a $Z$ töltésű atommag potenciálját és a perturbációszámítás első rendjében számítsa ki az energiakorrekciókat. Hasonlítsa össze a kapott eredményt az egzakt sajátenergiákkal!

- Definiáljuk a térbeli tükrözés (paritás) operátorát,

$$P\psi(\vec{r}) = \psi(-\vec{r}) \ .$$

Mutassa meg, hogy a perdület operátorok kommutálnak a paritás operátorral:

$$[L_i, P] = 0 \, .$$

Gömbi koordinátákban a paritás a

$$(\vartheta', \varphi') = (\pi - \vartheta, \varphi + \pi)$$

transzformációt jelenti. Mivel a $P_\ell^0(x)$ Legendre-függvényekre fennáll, hogy $P_\ell^0(-x) = (-1)^\ell P_\ell^0(x)$, az $Y_\ell^0(\vartheta, \varphi) = \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}} P_\ell(\cos\vartheta)$ gömbharmonikusok a paritás operátor sajátfüggvényei,

$$Y_\ell^0(\vartheta', \varphi') = (-1)^\ell \, Y_\ell^0(\vartheta, \varphi) \ .$$

A léptetőoperátorok segítségével mutassa meg, hogy a fenti állítás kiterjeszthető tetszőleges $m$-re ($-\ell \leq m \leq \ell$):

$$Y_\ell^m(\vartheta', \varphi') = (-1)^\ell \, Y_\ell^m(\vartheta, \varphi) \ .$$

- A véges kiterjedésű atommag egy lehetséges modellje az $R \ll a_0$ sugarú egyenletesen töltött gömb, ahol a töltéssűrűség $\varrho = \frac{3e}{4\pi R^3}$. Számítsa ki az elektrosztatikus potenciált! A pontszerű atommag terében mozgó elektront perturbálatlan rendszernek tekintve, számítsa ki az alapállapot energiakorrekcióját a perturációszámítás első rendjében!

*Segítség:* $\psi_{100}(\vec{r}) = \frac{2e^{-r/a_0}}{a_0^{3/2}} Y_0^0(\theta, \phi)$, az előforduló integrálokban az exponenciális kifejezés 1-gyel közelíthető.