Kvantummechanika gyakorlat
(2009/10 tavaszi félév)

10. óra

1. feladat: Becsüljük meg a harmonikus oszcillátor alapállapoti energiáját és hullámfüggvényét variációs módszerrel! A próbafüggvény legyen $\Psi(x) = e^{-ax^2}$.

Megoldás: Ki kell számítani ψ állapotban az energia várhatóértékét, majd megkeresni azt az a értéket, melyre ez minimális. Az átlag kiszámításának módja:

$$< E >_\Psi = \frac{(\Psi, \hat{H}\Psi)}{(\Psi, \Psi)},$$

ahol $\hat{H}$ a harmonikus oszcillátor Hamilton operátora:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2,$$

a nevezőben szereplő skalárszorzatra pedig azért van szükség, mert a próbafüggvényünk nem 1-re normált.

A számláló a következőképpen számítható:

$$(\Psi, \hat{H}\Psi) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2}\Big(\frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2\Big)e^{-ax^2}dx = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2}\Big(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2\Big)e^{-ax^2}dx$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-2ax^2}\Big(4a^2x^2 - 2a\Big)dx + \frac{1}{2}m\omega^2\int_{-\infty}^{\infty} e^{-2ax^2}x^2dx.$$

Érdemes áttérni az $\tilde{x} := \sqrt{2a}x$ új változóra, mellyel:

$$(\Psi, \hat{H}\Psi) = \frac{\hbar^2}{2m}\sqrt{2a}\Big(\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\tilde{x}^2}d\tilde{x} - \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\tilde{x}^2}\tilde{x}^2d\tilde{x}\Big) + \frac{1}{2}m\omega^2(2a)^{-3/2}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\tilde{x}^2}\tilde{x}^2d\tilde{x}.$$

A nevezetes

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\tilde{x}^2}d\tilde{x} = \sqrt{\pi}, \qquad \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\tilde{x}^2}\tilde{x}^2d\tilde{x} = \sqrt{\pi}/2$$

integrálok behelyettesítése után kapjuk:

$$(\Psi, \hat{H}\Psi) = \frac{\hbar^2}{4m}\sqrt{2a}\sqrt{\pi} + \frac{1}{4}m\omega^2(2a)^{-3/2}\sqrt{\pi}.$$

Az energiaátlagban szereplő nevező értéke:

$$(\Psi, \Psi) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-2ax^2}dx = \frac{1}{\sqrt{2a}}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\tilde{x}^2}d\tilde{x} = \frac{1}{\sqrt{2a}}\sqrt{\pi}.$$

Vagyis az energia átlagos értéke, mint az a paraméter függvénye:

$$< E >_\Psi = \frac{\hbar^2}{2m}a + \frac{m\omega^2}{8a}.$$

A függvények ott lehet minimuma, ahol a derivált zérus:

$$\frac{\partial}{\partial a} < E >_\Psi = \frac{\hbar^2}{2m} - \frac{m\omega^2}{8a^2} = 0 \qquad \Rightarrow \qquad a = \frac{m\omega}{2\hbar}.$$

Behelyettesítve a kapott a értéket az átlagos energia kifejezésébe, a variációs közelítés elmélete szerint közelítő megoldást kapunk az E_0 alapállapoti energiára:

$$E_0 \approx < E >_\Psi = \frac{\hbar\omega}{4} + \frac{\hbar\omega}{4} = \frac{\hbar\omega}{2},$$

és az alapállapoti hullámfüggvényre (normálási faktort is figyelembe véve!):

$$\Psi_0 \approx \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}.$$

Azt vehetjük észre, hogy visszakaptuk a már ismert egzakt eredményt, mind az energiára és a hullámfüggvényre is. Ennek oka az, hogy annyira jó próbafüggvényt választottunk, hogy abból a lehető legjobb közelítő, azaz az egzakt eredmény volt származtatható.

<u>2. feladat</u>: Becsüljük meg a hidrogénatom alapállapoti energiáját és hullámfüggvényét variációs módszerrel! A próbafüggvény legyen $\Psi(r, \theta, \phi) = e^{-\frac{r}{a}}$.

Megoldás: Az energia átlaga Ψ állapotban:

$$< E >_\Psi = \frac{(\Psi, \hat{H}\Psi)}{(\Psi, \Psi)},$$

ahol $\hat{H}$ a hidrogénatom Hamilton operátora (e az elemi töltés):

$$\hat{H} = \frac{\hat{\underline{p}}^2}{2m} - \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{e^2}{r}.$$

3 dimenzióban $\hat{\underline{p}}^2$ a Laplace operátorral arányos. Bevezetve az $\tilde{e}^2 \equiv \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}$ jelölést:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta - \frac{\tilde{e}^2}{r}.$$

Az energiaátlagban szereplő számláló:

$$(\Psi, \hat{H}\Psi) = \int dV e^{-\frac{r}{a}}\Big(- \frac{\hbar^2}{2m}\Delta - \frac{\tilde{e}^2}{r}\Big)e^{-\frac{r}{a}}.$$

Használjuk ki, hogy a Laplace operátor gömbi polárkoordinátákban a következő alakú:

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2}\Delta_\Omega,$$

ahol Δ_Ω a "szögfüggő rész", ez csak a polárszögek szerinti deriválásokat tartalmaz, ezért a Ψ próbafüggvényre hatva nullát ad. Ennek megfelelően kapjuk, hogy:

$$(\Psi, \hat{H}\Psi) = -\int dV e^{-\frac{r}{a}} \frac{\hbar^2}{2m}\Big(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\Big)e^{-\frac{r}{a}} - \tilde{e}^2 \int dV \frac{e^{-\frac{2r}{a}}}{r}.$$

Az integrandus nem függ a θ, ϕ térszögektől, ezért a rájuk vonatkozó integrál azonnal elvégezhető (a teljes térszög 4π), melynek következtében kapjuk:

$$(\Psi, \hat{H}\Psi) = -\frac{2\pi\hbar^2}{m}\int_0^\infty drr^2 e^{-\frac{2r}{a}}\Big(\frac{1}{a^2} - \frac{2}{ra}\Big) - 4\pi\tilde{e}^2 \int_0^\infty drr^2 \frac{e^{-\frac{2r}{a}}}{r}.$$

Áttérve az $\tilde{r} := r/a$ integrálási változóra:

$$(\Psi, \hat{H}\Psi) = -\frac{2\pi\hbar^2}{m}\int_0^\infty d\tilde{r} e^{-2\tilde{r}}\Big(\tilde{r}^2 - 2\tilde{r}\Big) - 4\pi a^2\tilde{e}^2 \int_0^\infty d\tilde{r}\tilde{r} e^{-2\tilde{r}}.$$

Az integrálok elvégzése parciális integrálásokkal történik, melynek következtében $< E >_\Psi$ számlálója az alábbiak szerint alakul:

$$(\Psi, \hat{H}\Psi) = -\frac{\pi\hbar^2}{2m}a - \pi\tilde{e}^2 a^2.$$

Szükség van $< E >_\Psi$ nevezőjére is:

$$(\Psi, \Psi) = \int dV e^{-\frac{2r}{a}} = 4\pi \int_0^\infty drr^2 e^{-\frac{2r}{a}} = \pi a^3.$$

Így a keresett várhatóérték:

$$< E >_\Psi = \frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{a^2} - \frac{\tilde{e}^2}{a}.$$

A minimumhely szükséges feltétele az első derivált eltűnése:

$$\frac{\partial}{\partial a} < E >_\Psi = -\frac{\hbar^2}{m}\frac{1}{a^3} + \frac{\tilde{e}^2}{a^2} = 0 \qquad \Rightarrow \qquad a = \frac{\hbar^2}{m\tilde{e}^2}.$$

A minimumhelyen az energia átlaga az alapállapoti energia közelítő értékét adja:

$$E_0 \approx < E >_\Psi = -\frac{m\tilde{e}^4}{2\hbar^2},$$

illetve ugyanebben az a pontban véve a próbafüggvényt (normálással együtt!), az alapállapoti hullámfüggvény közelítését kapjuk:

$$\Psi_0 = \frac{1}{\sqrt{\pi}}\Big(\frac{m\tilde{e}^2}{\hbar^2}\Big)^{3/2} e^{-\frac{m\tilde{e}^2}{\hbar^2}r}.$$

Ismerve egzaktul a hidrogénatom alapállapoti energiáját és hullámfüggvényét azt látjuk, hogy a variációs közelítés éppen ezeket adta vissza. Az előző feladathoz hasonlóan ennek oka az, hogy a lehető legjobb próbafüggvényt választottuk.