Hidrogénatom

Az elektron előfordulása a hely függvényében a $\psi_{100}(r, \vartheta, \varphi)$ függvény négyzetének kiszámításával kapható.

$$\left(\frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-r/a}\right)^2 = \frac{1}{\pi a^3} e^{-\frac{2r}{a}}$$

Annak a valószínűsége, hogy az elektron $r+dr$ között van a differenciált valószínűség a következő lesz;

$$dP(r) = |\psi_{100}(r)|^2 \, 4\pi r^2 \, dr$$

$$\int_0^{b} \frac{4\pi r^2}{a^3} e^{-\frac{2r}{a}} dr$$

Végezzük el az $u = \frac{-2r}{a}$ helyettesítést;

$$u = -\frac{2r}{a} \qquad du = -\frac{2}{a} \qquad dr = -\frac{a}{2} du$$

$$r = 0 \Rightarrow u = 0 \qquad r = b \Rightarrow u = -\frac{2b}{a}$$

A következő integrált kapjuk;

$$\int_0^{-\frac{2b}{a}} \frac{4a^2}{2} u^2 e^u \, du = \frac{4a^2}{2} \left[e^u (u^2 - 2u + 2)\right]_0^{-\frac{2b}{a}}$$

$$= \frac{4a^2}{2} \left(e^{-\frac{2}{b}} \left(\frac{4b^2}{a^2} + \frac{4b}{a} + 2\right) - 2\right)$$

Fejtsük e^u-ant hatványsorba;

$$e^u \approx 1 + u + \frac{u^2}{2} + \frac{u^3}{6}$$

Az integrál a következőképpen módosul; $u = -\frac{2r}{a}$

$$\int_0^b \frac{4a^2}{2} u^2 \left(1 + u + \frac{u^2}{2} + \frac{u^3}{6} \dots\right) du$$

$$\approx \int_0^b \frac{4a^2}{2} (u^2 + u^3)\, du = \frac{4a^2}{2}\left(\frac{u^3}{3} + \frac{u^4}{4}\right)_0^b$$

$$\approx \frac{4a^2}{2}\left(\frac{-8r^3}{3a^3}\right)_0^b = \frac{4a^2}{2} \cdot \left(\frac{-8b^3}{3a^3}\right) =$$

$$-3a^2 \frac{4}{3}\frac{b^3}{a^3} \approx \frac{4}{3}\frac{b^3}{a^3}$$ vagyis azt

kaptuk, hogy $P \approx \frac{4}{3}\frac{b^3}{a^3}$

Legyen $P \approx \left(\frac{4}{3}\right)\pi b^3 |\psi(0)|^2$

A hullámfüggvény értéke 0-ban;

$$\left(\frac{1}{\sqrt{\pi a^3}}\right)^2 = \frac{1}{\pi a^3} \qquad \frac{4}{3}\pi b^3 \frac{1}{\pi a^3} = \frac{4}{3}\frac{b^3}{a^3}$$

Vagyis az várt eredményt kapjuk vissza.

~~$\frac{4}{3} \cdot / 0,5 / 10^{-10} m$~~ $\frac{4}{3} \cdot \left(\frac{10^{-15} m}{0.5 \cdot 10^{-10} m}\right)^3 = 2,666 \cdot 10^{-5}$ „időt tölt" az elektron az atommagban.

~~Fejtörők~~ Az impulzusmomentum-operátor a következőképp van definiálva;

$$L = r \times p$$

Az $[r \cdot p, L]$ három komponense kontható;

$$[x_k p_k, L_i]\psi = x_k p_k \varepsilon_{inm} x_n p_m \psi$$

$$- \varepsilon_{inm} x_n p_m x_k p_k \psi$$

$$= \cancel{-\hbar^2 \varepsilon_{inm} (x_n p_m}$$

$$-\hbar^2 \hat{x}_k \partial_k \varepsilon_{inm} x_n \partial_m \psi + \psi \hbar^2 \hat{x}_k \partial_k x_n \varepsilon_{inm} \partial_n$$

$$= -\hbar^2 \varepsilon_{inm} (\hat{x}_k \delta_{nk} \partial_m \psi + x_n \partial_k \partial_n \psi)$$

$$+\hbar^2 \varepsilon_{inm} (\hat{x}_n \delta_{mk} \partial_k \psi + \hat{x}_n x_k \partial_m \partial_k \psi)$$

$$[\hat{x}\hat{p}, L_i]\psi = \hbar^2 \varepsilon_{inm} (x_n \delta_{mk} \partial_k \psi - x_k \delta_{nk} \partial_m \psi)$$

$$= \hbar^2 \varepsilon_{inm} x_n \partial_m \psi - \hbar^2 \psi \varepsilon_{inm} x_n \partial_m =$$

$$0$$

Így $[r p, L] = 0$

6. Házi feladat

1.

$$\psi(x,t) = N \exp\left(-\frac{x^2}{4a^2} + ik_0 x\right)$$

$P(x) = |\psi(x)|^2$ Az $|\psi(x)|^2$ kiszámításához a komplex konjugálttal kell szorozni.

$$\left(-\frac{x^2}{4a^2} + ik_0 x\right) + \left(-\frac{x^2}{4a^2} - ik_0 x\right) = \cancel{\frac{x^4}{16a^4}} \cancel{+ k_0^2 x^2}$$

$$\cancel{P(x) = N^2 \cdot \exp\left(\frac{x^4}{16a^4} + k_0^2 x^2\right)}$$

$$\cancel{\int_{-\infty}^{\infty} N^2 \exp\left(\frac{x^4}{16a^4} + k_0^2 x^2\right) = 1}$$ ~~kell, hogy teljesüljön.~~

$$= \frac{-x^2}{2a^2}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} N^2 e^{-\frac{x^2}{2a^2}} = 1 \qquad \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{x^2}{2a^2}} = \sqrt{2\pi}\, a$$

$$N^2 \sqrt{2\pi}\, a = 1 \qquad N^2 = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\, a}$$

$$N = \pm\sqrt{\frac{1}{\sqrt{2\pi}\, a}}$$ lesz a normálási konstans értéke.

3.) σ_x meghatározása:

(2.)

$$\sigma_x = \langle x^2\rangle - \langle x\rangle^2$$

$$\langle x^2\rangle = \int x^2 \, |\psi(x,t=0)|^2 \, dx$$

$$= N^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx \, x^2 e^{-\frac{x^2}{2a^2}} = \frac{\sqrt{2\pi}}{\left(\frac{1}{a^2}\right)^{3/2}} \cdot N^2 \text{ ha } Re(a^2) < 0$$

$$= \sqrt{2\pi} \cdot |a|^3 \cdot N^2$$

mivel $N^2 = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\, a}$ így $a^2 = \langle x^2\rangle$

Az x várható értéke pedig:

$$\langle x\rangle = N^2 \int_{-\infty}^{\infty} x e^{-\frac{x^2}{2a^2}} x = N^2 \left[-a^2 e^{-\frac{x^2}{2a^2}}\right]_{-\infty}^{\infty} = 0$$

$$\sigma_x = \sqrt{\langle \hat{x}^2\rangle - \langle x\rangle^2} = \sqrt{a^2} = a$$

$$\varphi(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} dx \; e^{\frac{i}{\hbar} px} \; \psi(x) =$$

$$\frac{N}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} dx \; e^{-\frac{x^2}{4a^2} + i\left(k_0 + \frac{p}{\hbar}\right)x}$$

$$= \frac{N}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} dx \; e^{-\left(\frac{x}{2a} - i\left(k_0 + \frac{p}{\hbar}\right)a\right)^2} \; e^{-a^2\left(k_0 + \frac{p}{\hbar}\right)^2}$$

Végezzük el egy helyettesítéses integrálást;

$$\frac{x}{2a} - i\left(k_0 + \frac{p}{\hbar}\right)a = y$$

$$dy = \frac{1}{2a} dx \qquad dy\, 2a = dx$$

$$\varphi(p) = \frac{2aN}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} dy \; e^{-y^2} \; e^{-a^2\left(k_0 + \frac{p}{\hbar}\right)^2}$$

$$\Psi(p) = \frac{2aN}{\sqrt{2\hbar}} e^{-a^2\left(\frac{p}{\hbar} + k_0\right)}$$

$$\langle \hat{p} \rangle = \frac{4a^2N^2}{2\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dp \, e^{-2a^2\left(\frac{p}{\hbar} + k_0\right)^2} p$$

legyen most $b = \sqrt{2a^2\left(\frac{p}{\hbar} - k_0\right)^2}$

$$db = \sqrt{2}\, a \frac{1}{\hbar} dp$$

$$p = \left(\frac{b}{2a} - k_0\right)\hbar$$

$$\langle \hat{p} \rangle = \frac{4a^2N^2}{2\hbar} \frac{\hbar^2}{\sqrt{2}a} \int_{-\infty}^{\infty} db \, e^{-b^2} \left(\frac{b}{2a} + k_0\right)\hbar$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} db \, e^{-b^2} \frac{b}{2a} = 0$$ így az integrálból a következő lesz;

$$\frac{4a^2N^2}{2\hbar} \frac{\hbar^2}{\sqrt{2}a} \cdot \sqrt{\pi}\, k_0 \hbar = -\sqrt{2\pi}\, a N^2 \hbar k_0 = -\hbar k_0$$

$$\langle \hat{p}^2 \rangle = \frac{4a^2N^2}{\sqrt{2\hbar}^2} \int_{-\infty}^{\infty} dp \, e^{-2a^2\left(\frac{p}{\hbar}+q_0\right)^2} p^2$$ (5.)

Az ~~A~~ helyettesítést most is ugyan azokat az átírásokat amit $\langle \hat{p} \rangle$ kiszámításánál;

$$\sqrt{2}a\left(\frac{p}{\hbar}+q_0\right)=y$$

$$dy=\left(\frac{y}{\sqrt{2}a}-q_0\right)\hbar$$

$$p=\left(\frac{y}{\sqrt{2}a}-q_0\right)\hbar$$

Ezekkel a jelölésekkel az integrál;

$$\langle p^2 \rangle = \frac{4a^2N^2}{\sqrt{2\hbar}^2} \int_{-\infty}^{\infty} dy \frac{\hbar}{\sqrt{2}a} e^{-y^2} \left(\frac{y}{\sqrt{2}a}-q_0\right)^2 \hbar^2$$

$$\frac{2aN^2\hbar^2}{\sqrt{2}} \int_{-\infty}^{\infty} dy \, e^{-y^2} \frac{y^2}{(\sqrt{2}a)^2} - \cancel{\frac{4a^2N^2}{2\hbar} \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-y^2} q_0^2\hbar^2 \frac{\hbar}{\sqrt{2}a}}$$

$$+\frac{2aN^2\hbar^2}{\sqrt{2}} \int_{-\infty}^{\infty} dy \, e^{-y^2} q_0^2 - \frac{4a^2N^2}{2\hbar} \frac{\hbar}{\sqrt{2}a} \int_{-\infty}^{\infty} dy \, e^{-y^2} y \frac{q_0}{\sqrt{2}a} \cdot 2$$

$$= \frac{2aN^2\hbar^2}{\sqrt{2}}\left(\frac{1}{2a^2}\frac{\sqrt{\pi}}{2} + k_0^2\sqrt{\pi}\right) = \sqrt{2\pi}\,a N^2\hbar^2\left(\frac{1}{4a^2} + k_0^2\right) =$$

6.

$$\hbar^2\left(k_0 + \frac{1}{4a^2}\right)$$

$$\sigma_p = \sqrt{\langle p^2\rangle - \langle p\rangle^2}$$

$$\sigma_p = \sqrt{\hbar^2\left(\frac{1}{4a^2} + k_0^2\right) - \hbar^2 k_0^2} = \frac{\hbar}{2a}$$

A Heisenberg-féle határozatlansági reláció a következőképpen,

$\frac{\hbar}{2a}\cdot a = \frac{\hbar}{2} = \frac{\hbar}{2}$ így a relációt valóban

minimalizálja a kifejezés.

4.) $\Psi(x,t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\,\Psi(x,t=0)$

$$\Psi(x,t=0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}\hat{\Psi}\,e^{-ikx}\,dk$$

Az időfejlődésben be kell szoroznunk az időfejlesztő operátorral.

$$\Psi(x,t) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{i}{\hbar}E_k t} \, \tilde{\varphi}(k) \, e^{ikx} \, dk$$

$$\tilde{\varphi}(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(x, t=0) \, e^{ikx} \, dx$$

$$\tilde{\varphi}(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} N \int_{-\infty}^{\infty} dx \; e^{-\frac{x^2}{4a} + i(k_0+k)x} =$$

Négyzetes kiegészítésként felírva a kitevőt;

$$\frac{N}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx \; e^{-\left(\frac{x}{2a} - i\frac{(k_0+k_0)\cancel{2}a}{\cancel{2}}\right)} \; e^{-a^2(k_0+k)^2}$$

Az eddigiekben hasonlóan most is helyettesítéses integrálást fogunk alkalmazni.

$$\frac{x}{2a} - ia(k_0+k) = y \qquad dy = \frac{dx}{2a}$$

8.

$$\frac{2aN}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dy \, e^{-y^2} e^{-a^2(k_0+k)^2} = \sqrt{2}\, a N e^{-a^2(k_0+k)^2}$$

$$\psi(x,t) = \frac{\sqrt{2}\, a N}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{i\hbar k^2}{2m} t} e^{-a^2(k_0+k)^2} e^{ikx} \, dk$$

$$= \frac{\sqrt{2}\, a N}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\left(a^2 + \frac{i\hbar}{2m} t\right) k^2} e^{(-2a^2 k_0 + ix)k - a^2 k_0^2} \, dk$$

$$\frac{\sqrt{2}\, a N}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dk \, e^{-\left(a^2 + \frac{i\hbar}{2m} t\right) k^2} e^{(-2a^2 k_0 + ix)k - a^2 k_0^2}$$

$$\frac{\sqrt{2}\, a N}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dk \, e^{-\left(\sqrt{\frac{a^2 2m + i\hbar t}{2m}}\, k + \frac{ix - 2a^2 k_0}{2} \frac{\sqrt{2m}}{\sqrt{2ma^2 + i\hbar t}}\right)^2} \cdot e^{\frac{2m(ix - 2a^2 k_0)^2}{4(2ma^2 + i\hbar t)} - a^2 k_0^2}$$

$$\psi(x,t) = \frac{aN}{\sqrt{\pi}}\, e^{\frac{m(ix-2a^2k_0)^2}{2(2ma^2+i\hbar t)}} \cdot \sqrt{\frac{2m}{2ma^2+i\hbar t}}\,\sqrt{\pi} \quad (9)$$

$$= \frac{aN\sqrt{2m}}{\sqrt{2ma^2+i\hbar t}}\, e^{\frac{m(ix-2a^2k_0)^2}{2(2ma^2+i\hbar x)}} = \psi(x,t)$$

$$\rho(x,0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} N^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx\, e^{-\frac{x^2}{2a^2}+ikx}$$

Ugyan úgy négyzetté kell alakítani;

$$N^2 \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx\, e^{-\left(\frac{x}{\sqrt{2}a} - \frac{ik}{2}\sqrt{2}a\right)^2} e^{-\frac{k^2a^2}{2}} =$$

$$\frac{N^2}{\sqrt{2\pi}}\sqrt{2}a\sqrt{\pi}\, e^{-\frac{k^2a^2}{2}} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\, e^{-\frac{a^2k^2}{2}}$$

$$\rho(x,t) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{i\hbar k^2}{2m}t}\, e^{ikx}\, e^{-\frac{a^2k^2}{2}}\, dk$$

10.

$$\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} d k \; e^{-\left(\frac{i\hbar t}{2m}-\frac{a^2}{2}\right)k^2+ikx}$$

$$=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} d k \; e^{-\left(\sqrt{\frac{ma^2+i\hbar t}{2m}}\,k+\frac{ix\sqrt{2m}}{2\sqrt{ma^2+i\hbar t}}\right)^2}\cdot e^{-\frac{x^2\,2m}{4(ma^2+i\hbar t)}}$$

$$=\frac{1}{2\pi}\, e^{-\frac{2m x^2}{4(ma^2+i\hbar t)}}\;\frac{\sqrt{2m}}{\sqrt{ma^2+i\hbar t}}\cdot\sqrt{\pi}$$

$\varrho(x,t)$ időfejlődése;

$$\varrho(x,t)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\;\frac{\sqrt{m}}{\sqrt{ma^2+i\hbar t}}\; e^{-\frac{m x^2}{2(ma^2+i\hbar t)}}$$