Použitie variačného princípu. Vypracovať do 11.4.2000, otázky: bokes@elf.stuba.sk

Časť 1. Na základe analýzy radiálnej rovnice pre elektrón v atóme vodíka

$$-\frac{1}{2}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r}u(r)-\frac{1}{\rho}+\frac{l(l+1)}{2r^2}u(r)=\epsilon u(r) \tag{1}$$

v dvoch limitných prípadoch $r\to 0$ a $r\to\infty$, kde $r\to\frac{\hbar^2}{me^2}r$ a $E=\frac{me^4}{\hbar^2}\epsilon$, sa dá ukázať, že:

$$u_l(r)\sim r^l(a_0+a_1r+a_2r^2+....)\mathrm{e}^{-\sqrt{|\epsilon|}r}. \tag{2}$$

Použitím variačného princípu spočítajte presnú energiu stavu n=1,l=0 (n=1 zodpovedá najjednoduchšiemu polynómu, t.j. $a_0=const$, $a_i=0$ pre i=1,2,3,...), pričom $\sqrt{|\epsilon|}$ vo (2) považujte za variačný parameter α.
Pomôcky:

- pre l=0,n=1 je $u(r)\sim a_0\mathrm{e}^{-\alpha r}$, normovaním tejto funkcii určte a_0.
- spočítajte $\langle\alpha|H|\alpha\rangle$ pre lubovolnéα ($|\alpha\rangle$ je u(r); správny výsledok je $\langle\alpha|H|\alpha\rangle=\alpha(\frac{\alpha}{2}-1)$). Nájdite minimum posledného výrazu. Hamiltonián je daný ľavou stranou (1). Pozor, $\langle\alpha|H|\alpha\rangle=\int_0^\infty drr^2u(r)Hu(r)$, kde r^2 pochádza z Jakobiánu pri prechode $(x,y,z)\to(r,\phi,\theta)$ pod integrálom. Uhlové premenné sú vyintegrované, a to tak, že po nich nič nezostalo.
- Dokážte si dopredu, že
$$\int_0^\infty r^n\mathrm{e}^{-ar}dr=\frac{n!}{a^{n+1}}. \tag{3}$$
Využijete to veľa krát.

Na premyslenie a ďalší rozvoj ducha:

- Overte si, že rovnica (1) súhlasí zo Schrödingerovou rovnicou pre jeden elektrón v súradniciach (r,ϕ,θ) s potenciálom $V(r)=\frac{-e^2}{r}$. Použitá zámena jednotiek energii a vzdialenosti renderuje úlohu do jej prirodzených rozmerov; E $\sim$ eV, r $\sim$ 0.1 nm.
- Ako by ste ukázali, že nájdený stav $u_{\alpha_{min}}(r)$ je presným vlastným stavom, nie len optimalizovaným pomocou variačného princípu?

Časť 2. Spravte to isté, ale s funkciou $|\alpha\rangle=A\mathrm{e}^{-\alpha r^2}$. Takýto (Gaussián) tvar sa veľmi často používa v numerických výpočtoch na molekulách. Určte chybu energii oproti presnému riešeniu. [Výsledok je $\langle\alpha|H|\alpha\rangle=\frac{3}{2}\alpha-2\sqrt{\frac{2\alpha}{\pi}};\alpha_{min}\approx 0.283;E_{alpha_{min}}\approx -0.424$]
Pomôcky:

- $\int_0^\infty\mathrm{e}^{-ar^2}dr=\sqrt{\frac{\pi}{4a}}$ Dokazuje sa to pomocou
$$\left(\int_{-\infty}^{\infty}dr\mathrm{e}^{-r^2}\right)^2=\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}dxdy\mathrm{e}^{-x^2-y^2}=\int_0^\infty dr\int_0^{2\pi}d\phi\mathrm{e}^{-r^2}r=... \tag{4}$$
- Dokážte si: ($n!!=n(n-2)(n-4)...$)
$$\int_0^\infty drr^n\mathrm{e}^{-ar^2}=\begin{cases}(n-1)!!\frac{\sqrt{\pi/2}}{(2a)^{(n+1)/2}} & n \text{ párne}\\ (n-1)!!\frac{1}{(2a)^{(n+1)/2}} & n \text{ nepárne}\end{cases} \tag{5}$$
- ostatné je analogické predchádzajúcemu príkladu.

Časť 3.
Na základe všeobecného tvaru maticových elementov pre operátory momentu hybnosti $\langle\mathrm{jm}|\mathrm{L_z}|\mathrm{j'm'}\rangle$, $\langle\mathrm{jm}|\mathrm{L^\pm}|\mathrm{j'm'}\rangle$, $\mathrm{L_x}=\frac{1}{2}(\mathrm{L^+}+\mathrm{L^-}),\mathrm{L_y}$ podobne, určte tvar operátora (2x2 matica) spinu jedného elektrónu $s^\alpha,\alpha=x,y,z$. Ak je eletrón vo vlastnom stave s^z s vlastnou hodnotou $\frac{1}{2}$, aká je pravdepodobnosť, že priemet jeho spinu na os y je tiež $\frac{1}{2}$?

Pomôcka: Spinové operátory s^α sú 2x2 matice, a ich vlastné stavy sú 2-dimenzionálne vektory (obyčajné vlastné vektory z algebry).