

1. gyakorlat (szept. 13.)

1. A variációs elv segítségével határozzuk meg a hidrogén atom alapállapot energiáját. Próbaként használjuk a $\varphi(r) = e^{-\alpha r}$ függvényt és az α függvényében minimalizáljuk az energiát:

$$E = \frac{\langle \varphi | H | \varphi \rangle}{\langle \varphi | \varphi \rangle}.$$

2. Az előző feladathoz hasonlóan határozzuk meg a He-atom spin szingulett alapállapot energiáját!
3. Mutassuk meg, hogy a He-atomra teljesül $[L_z, 1/|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|] = 0$, ahol $\mathbf{r}_{1,2}$ az elektronok helyvektora, $L_z = L_{z,1} + L_{z,2}$ a pályamomentumok összegének z komponense.

HF:

Tekintsük a u.n. Moshinsky atom Hamilton operátorát, amely két feles spinű részecskét ír le:

$$H = \frac{p_1^2}{2m} + \frac{p_2^2}{2m} + \frac{1}{2}m\Omega^2(x_1^2 + x_2^2) + \frac{1}{2}m\omega^2(x_1 - x_2)^2.$$

- Az $X = x_1 + x_2$ és $x = x_1 - x_2$ változók bevezetésével oldjuk meg az időfüggetlen Schrödinger egyenletet. Mi lesz az $S =$ szingulett és $S = 1$ triplet megoldások térbeli részének a szimmetriája?
- A variációs elv segítségével vezessünk le egyenletet az $S = 0$ alapállapot hullámfüggvényére és oldjuk meg! (Hartree-Fock egyenlet. Variáljuk a $\langle \varphi(x_1)\varphi(x_2) | H | \varphi(x_1)\varphi(x_2) \rangle$ energiát φ^* szerint a $\langle \varphi | \varphi \rangle = 1$ mellékfeltétellel!)