

3. gyakorlat (szept. 57.)

1. Diskutáljuk a He atom alsó gerjesztett állapotainak az energiáit!

A helium atom Hamilton operátora atomi egységekben:

$$H = \frac{p_1^2}{2m} + \frac{p_2^2}{2m} - \frac{2}{r_1} - \frac{2}{r_2} + \frac{1}{|r_1 - r_2|} = h(1) + h(2) + \frac{1}{|r_1 - r_2|} \quad (1)$$

Nulladik közelítésként keressük a Hamilton operátor getjesztett állapotát hidrogén szerű sajátállapotok szimmetrizált szorzataként. Tudjuk, hogy a teljes hullámfüggvénynek antiszimmetrikusnak kell lennie az elektronok felcserélésével szemben. A He atom állapotai vagy $S = 0$ spin szingulett, vagy $S = 1$ spin tripllett állapotok lehetnek. Tudjuk, hogy a szingulett állapot antiszimmetrikus,

$$|0, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\left| \frac{1}{2}, +\frac{1}{2} \right\rangle \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle - \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \left| \frac{1}{2}, +\frac{1}{2} \right\rangle \right)$$

míg a tripllett állapot szimmetrikus lesz:

$$|1, 1\rangle = \left| \frac{1}{2}, +\frac{1}{2} \right\rangle \left| \frac{1}{2}, +\frac{1}{2} \right\rangle, \quad |1, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\left| \frac{1}{2}, +\frac{1}{2} \right\rangle \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle + \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \left| \frac{1}{2}, +\frac{1}{2} \right\rangle \right), \quad |1, -1\rangle = \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle.$$

Az S^2 sajátállapotok térbeli része ennek megfelelően a szingulett esetben szimmetrikus, tripllett esetben pedig antiszimmetrikus kell, hogy legyen:

$$\begin{aligned} S &= 0, \quad |\Phi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|100\rangle|2lm\rangle + |2lm\rangle|100\rangle) \\ S &= 1, \quad |\Phi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|100\rangle|2lm\rangle - |2lm\rangle|100\rangle), \end{aligned}$$

ahol az első ket állapotnak mindeig $\mathbf{r}_1$, a második ket állapotnak pedig $\mathbf{r}_2$ a változója.

Határozzuk meg az energia várható értékét a $|\Phi_0\rangle$ és $|\Phi_1\rangle$ állapotokban. Nyilvánvalóan az $|nlm\rangle$ állapotok sajátállapotai az 1. számú egyenletben szereplő h operátornak E_n sajátértékkel. Ezt kihasználva:

$$\begin{aligned} \langle \Phi_0 | H | \Phi_0 \rangle &= E_1 + E_2 + \langle 100 | \langle 2lm | \frac{1}{|r_1 - r_2|} | 100 \rangle | 2lm \rangle + \langle 100 | \langle 2lm | \frac{1}{|r_1 - r_2|} | 2lm \rangle | 100 \rangle \\ \langle \Phi_1 | H | \Phi_1 \rangle &= E_1 + E_2 + \langle 100 | \langle 2lm | \frac{1}{|r_1 - r_2|} | 100 \rangle | 2lm \rangle - \langle 100 | \langle 2lm | \frac{1}{|r_1 - r_2|} | 2lm \rangle | 100 \rangle \end{aligned}$$

Vezessük be a következő jelöléseket:

$$\begin{aligned} J_{lm} &= \langle 100 | \langle 2lm | \frac{1}{|r_1 - r_2|} | 100 \rangle | 2lm \rangle \\ K_{lm} &= \langle 100 | \langle 2lm | \frac{1}{|r_1 - r_2|} | 2lm \rangle | 100 \rangle. \end{aligned}$$

Az energiákat a következőképpen írhatjuk fel az új jelölésekkel:

$$\begin{aligned} \langle \Phi_0 | H | \Phi_0 \rangle &= E_1 + E_2 + J_{lm} + K_{lm} \\ \langle \Phi_1 | H | \Phi_1 \rangle &= E_1 + E_2 + J_{lm} - K_{lm} \end{aligned}$$

Belátható, hogy a J_{lm} Coulomb és K_{lm} kicsérélődési integrálok függetlenek m -től. Leolvasható, hogy az $S = 1$ triplett gerjesztett állapot energiája a kicsérélődési tag miatt alacsonyabb, mint az $S = 0$ szingulett állapoté. Általában a magasabb össz spinű állapotok energiája alacsonyabb a kicsérélődési energia miatt. Ezt a szabályt hívjuk az első Hund szabálynak.

2. Első rendű Born közelítésben határozzuk meg

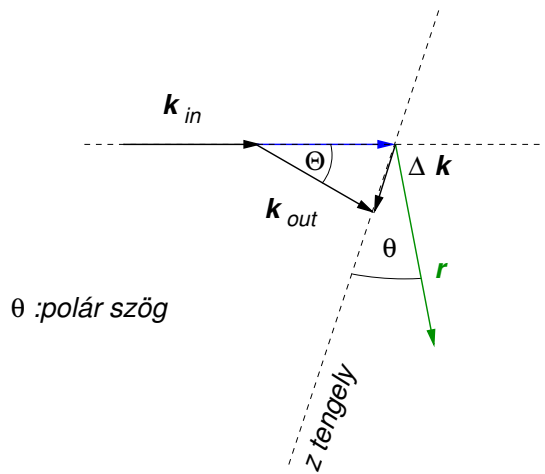
a.) a $V(r) = ke^2 \frac{e^{\alpha r}}{r}$ Yukawa potenciál,

b.) és a $V(r) = V_0 e^{-\frac{r^2}{2r_0^2}}$ Gauss potenciál szórási amplitúdóját!

A szórási amplitúdó első Born közelítésben:

$$f(\vartheta, \varphi) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int V(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} d^3r$$

Gömbszimmetrikus potenciál esetén:



$$q = \Delta k = 2k \sin\left(\frac{\theta}{2}\right)$$

$$\begin{aligned} \int V(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} d^3r &= \int V(r) e^{iqr \cos(\vartheta)} r^2 dr \sin(\vartheta) d\vartheta d\varphi \\ &= 2\pi \int V(r) e^{iqr \cos(\vartheta)} r^2 dr \sin(\vartheta) d\vartheta \\ &= 2\pi \int_0^\infty r^2 dr \int_{-1}^1 dz V(r) e^{iqrz} \\ &= \frac{4\pi}{q} \int_0^\infty V(r) \sin(qr) r dr \end{aligned}$$

a.) Alkalmazzuk a Yukawa potenciálra! Számítsu ki a teljes hatáskeresztmetszetet is! Mi történik ha $\alpha \rightarrow 0$?

b.) A Gauss potenciál esetében direct integráljunk háromszor!

$$\begin{aligned} \int V_0 e^{-\frac{r^2}{2r_0^2}} e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} d^3r &= V_0 \int_0^\infty e^{-\frac{x^2}{2r_0^2}} e^{iq_x x} dx \int_0^\infty e^{-\frac{y^2}{2r_0^2}} e^{iq_y y} dy \int_0^\infty e^{-\frac{z^2}{2r_0^2}} e^{iq_z z} dz \\ &= \int_0^\infty e^{-\alpha(x-ia)^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \end{aligned}$$

HF:

Határozzuk meg egy dimenzióban a szabad részecske Green függvényét!