Hibajegyzék és kiegészítés

a "Kémiai Matematika" c. tantárgyhoz készült

Ideiglenes Példatárhoz

1.1.3 7. oldal

$$\sum_{k=1}^{n}(i_k - i_{k+1})$$

3.8. 9. oldal

5. $\displaystyle\int_0^\infty \frac{x}{e^x - 1}\,\mathrm{d}x$

6. $\displaystyle\int_0^\infty \frac{x}{e^x + 1}\,\mathrm{d}x$

5.11. 10. oldal

A vektortér: $\mathbf{v}(\mathbf{r}) = (x^2, -y \cdot x)$

A vektortér az egyenes mentén tehát
$\mathbf{v}(\mathbf{r}) = (x^2, -(-2x+2)x) = (x^2, 2x^2 - 2x)$,

az egyenes egyenletének deriváltja
$\mathrm{d}y/\mathrm{d}x = -2$,

a keresett integrál pedig

$$\int_L (v_x\,\mathrm{d}x + v_y\,\mathrm{d}y) = \int_0^1 v_x\,\mathrm{d}x + \int_0^1 v_y \frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}x}\,\mathrm{d}x =$$

$$= \int_0^1 x^2\,\mathrm{d}x + \int_0^1 (2x^2 - 2x)(-2)\,\mathrm{d}x =$$

$$= \int_0^1 \left(-3x^2 + 4x\right)\,\mathrm{d}x =$$

$$= \left[-x^3 + 2x^2\right]_0^1 = 1$$

10.9. 17. oldal

$$f'(x)^2 - f(x) + 6 = 0$$

M 1.1.2 27. oldal

$$\sum_{k=0}^{n-1} a_k$$

M 2.1. 27. oldal

nincs határértéke

M 3.7.6 29. oldal

A végeredmény helyesen: ln ch arsh $(x) + C$

Egy egyszerűbb megoldás:

$$\frac{1}{2}\int \frac{2x}{1+x^2}\,\mathrm{d}x$$

alakra hozás után az integrandus f'/f alakú, tehát a megoldásfüggvény: $\frac{1}{2}\ln(1+x^2) + C$

M 3.8. 29. oldal

integráltáblázatból:

5. $\pi^2/6$
6. $\pi^2/12$

M 5.8. 32. oldal

Áttérünk gömbi koordinátarendszerre. Az $(x, y, z) \to (r, \theta, \phi)$ koordináta transzformáció Jacobi-determinánsának abszolút értéke: $|J| = r^2\sin(\theta)$. A térfogatelem gömbi koordinátarendszerben tehát:
$\mathrm{d}V = r^2\sin(\theta)\,\mathrm{d}\phi\,\mathrm{d}\theta\,\mathrm{d}r = \mathrm{d}\sigma\,\mathrm{d}r$,
ahol $\mathrm{d}\sigma$ az elemi gömbfelület. Az R sugarú gömb felszíne:

$$\begin{aligned} F &= \int_{\text{gömb}} \mathrm{d}\sigma = \int_0^{2\pi}\int_0^{\pi} R^2\sin(\theta)\,\mathrm{d}\theta\mathrm{d}\phi = \\ &= R^2\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\phi\int_0^{\pi}\sin(\theta)\,\mathrm{d}\theta = R^2[\phi]_0^{2\pi}[-cos(\theta)]_0^{\pi} = \\ &= R^2 2(2\pi) = 4R^2\pi \end{aligned}$$

Jó tudni: 4π az ún térszögintegrál, $\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi}\sin(\theta)\mathrm{d}\theta\mathrm{d}\phi$. Gömbszimmetrikus függvény integrálásakor megjelenik.

M 7.10. ill. **M 7.12.** 38. oldal

Az **M 7.10.**-zel jelölt megoldás a **7.12.**-es példa megoldása.

M 10.12. 49. oldal

A megoldás második sorától:

$$u' = 2 - \frac{1}{u} = \frac{2u-1}{u}$$

$$\int \frac{u}{2u-1}\,\mathrm{d}u = \int \mathrm{d}x + C$$

$$\frac{1}{2}\int \frac{u}{u-1/2}\,\mathrm{d}u = x + C$$

A bal oldal:

$$\frac{1}{2}\int \frac{u-\frac{1}{2}+\frac{1}{2}}{u-1/2}\,\mathrm{d}u = \frac{1}{2}\int \mathrm{d}u +$$
$$+\frac{1}{4}\int \frac{1}{u-1/2}\,\mathrm{d}u = \frac{u}{2} + \frac{1}{4}\ln\left|u - \frac{1}{2}\right|$$

Behelyettesítve $u = 2x - y$ -t:

$$\frac{2x-y}{2} + \frac{1}{4}\ln|2x - y - 1/2| = x + C$$

$$-\frac{y}{2} + \frac{1}{4}\ln|2x - y - 1/2| = C$$

Az $x = 2$, $y = -1$ pontot behelyettesítve a konstansra kapjuk:

$$\frac{1}{2} + \frac{1}{4}\ln\frac{9}{2} = C$$

M 10.26. 52. oldal

A megoldás második sora:

$$i\hbar\frac{\partial\,[a(r)b(t)]}{\partial t} = \hat{H}(r)\,[a(r)b(t)]$$

M 12.6. 55. oldal

A csoport elemeinek karakterei:

	E	$C_2(z)$	$C_2(y)$	$C_2(x)$	i	$\sigma(xy)$	$\sigma(xz)$	$\sigma(yz)$
Γ	6	2	0	0	0	0	6	2

Az egyes i.r.-ek súlya:

$$n_{A_g} = \frac{1}{8}(6+2+6+2) = 2$$
$$n_{B_{1g}} = \frac{1}{8}(6+2-6-2) = 0$$
$$n_{B_{2g}} = \frac{1}{8}(6-2+6-2) = 1$$
$$n_{B_{3g}} = \frac{1}{8}(6-2-6+2) = 0$$
$$n_{A_u} = \frac{1}{8}(6+2-6-2) = 0$$
$$n_{B_{1u}} = \frac{1}{8}(6+2+6+2) = 2$$
$$n_{B_{2u}} = \frac{1}{8}(6-2-6+2) = 0$$
$$n_{B_{3u}} = \frac{1}{8}(6-2+6-2) = 1$$

A Γ felbontása i.r.-ekre:

$\Gamma = 2A_g \oplus B_{2g} \oplus 2B_{1u} \oplus B_{3u}$

A szimmetrizált bázisvektorok:

A_g szimmetriájúak:

$$\hat{P}_{A_g}v_1 = \frac{1}{8}\Big(E + C_2(z) + C_2(y) + C_2(x) +$$
$$+ i + \sigma(xy) + \sigma(xz) + \sigma(yz)\Big)v_1 =$$
$$= \frac{1}{8}(v_1 + v_4 + v_3 + v_2 + v_3 + v_2 + v_1 + v_4) =$$
$$= \frac{1}{4}(v_1 + v_2 + v_3 + v_4)$$

$$\hat{P}_{A_g}v_5 = \frac{1}{8}(v_5 + v_5 + v_6 + v_6 + v_6 + v_6 + v_5 + v_5) =$$
$$= \frac{1}{2}(v_5 + v_6)$$

B_{2g} szimmetriájú:

$$\hat{P}_{B_{2g}}v_1 = \frac{1}{8}\Big(E - C_2(z) + C_2(y) - C_2(x) +$$
$$+ i - \sigma(xy) + \sigma(xz) - \sigma(yz)\Big)v_1 =$$
$$= \frac{1}{8}(v_1 - v_4 + v_3 - v_2 + v_3 - v_2 + v_1 - v_4) =$$
$$= \frac{1}{4}(v_1 - v_2 + v_3 - v_4)$$

B_{1u} szimmetriájúak:

$$\hat{P}_{B_{1u}}v_5 = \frac{1}{8}\Big(E + C_2(z) - C_2(y) - C_2(x) +$$
$$- i - \sigma(xy) + \sigma(xz) + \sigma(yz)\Big)v_5 =$$
$$= \frac{1}{8}(v_5 + v_5 - v_6 - v_6 - v_6 - v_6 + v_5 + v_5) =$$
$$= \frac{1}{2}(v_5 - v_6)$$

$$\hat{P}_{B_{1u}}v_1 = \frac{1}{8}(v_1 + v_4 - v_3 - v_2 - v_3 - v_2 + v_1 + v_4)$$
$$= \frac{1}{4}(v_1 - v_2 - v_3 + v_4)$$

B_{3u} szimmetriájú:

$$\hat{P}_{B_{3u}}v_1 = \frac{1}{4}(v_1 + v_2 - v_3 - v_4)$$

A kvantummechanikai példák hiányzó megoldásai

M 13.5.
$\hat{T} = \frac{\hat{p}^2}{2m}$

A kinetikus energia operátora egy önadjungált operátor, az impulzusoperátor négyzetével arányos. A feladat állítása minden önadjungált operátor négyzetére teljesül. Legyen $\hat{O}$ egy önadjungált operátor, valamint legyen Ψ egy normált sajátfüggvénye $\hat{O}^2$-nek, ekkor:

$$\hat{O}^2\Psi = k\Psi$$
$$k = \langle\Psi|\hat{O}^2\Psi\rangle = \langle\hat{O}^+\Psi|\hat{O}\Psi\rangle = \langle\hat{O}\Psi|\hat{O}\Psi\rangle \geq 0$$

A legutolsó egyenlőtlenség azért teljesül, mivel egy tetszőleges vektor önmagával vett skaláris szorzata biztosan nemnegatív valós szám.

M 13.8.
Az elektron Hamilton-függvénye atomi egységekben:

$$H(x,y,z) = \frac{1}{2}p^2 - \frac{1}{r} = = \frac{1}{2}(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) - \frac{1}{r}$$

A Heisenberg-féle bizonytalansági reláció, atomi egységekben: $\Delta p_x \cdot \Delta x \sim \frac{1}{2}$, hasonlóan az y és z komponensekre.

Klasszikus képben az elektron nyugalomban lehetne az atommag helyén, ekkor a koordináta- és az impulzus vektor is nullvektor volna. Ez ellentmondásban van a Heisenberg relációval. Tegyük fel ezért, hogy az elektron kicsiny Δx amplitúdóval és kicsiny Δp_x impulzussal mozog az origó körül úgy, hogy ezek szorzata kielégíti a Heisenberg-relációt. A Heisenberg-relációból kifejezve p_x, p_y, p_z-t és a Hamilton-függvénybe helyettesítve:

$$H(x,y,z) = \frac{1}{8}\Big(\frac{1}{x^2} + \frac{1}{y^2} + \frac{1}{z^2}\Big) - \frac{1}{r}$$

A probléma gömbszimmetriáját megtartandó, Descartes koordinátákról áttérünk gömbi koordinátákra, és x^2, y^2, z^2-et átlagoljuk a ϕ, θ térszögek szerint:

$$\overline{x^2} = \frac{r^2}{\pi(2\pi)}\int_0^{\pi}\sin^2\theta\,\mathrm{d}\theta\int_0^{2\pi}\cos^2\phi\,\mathrm{d}\phi = \frac{r^2}{2}\ ,$$

hasonlóan $\overline{y^2} = r^2/2$ és $\overline{z^2} = r^2/2$. A térszögek szerinti átlagolás után:

$$H(r) = \frac{3}{4r^2} - \frac{1}{r}$$

Minimalizáljuk H-t r szerint:

$$\frac{\partial H}{\partial r} = -\frac{3}{2r^3} + \frac{1}{r^2} = 0$$

$$r = \frac{3}{2}$$

Az elektron energiáját megadó Hamilton függvény a minimumban:

$$E = \frac{1}{3} - \frac{2}{3} = -\frac{1}{3}$$

Ez csak nagyságrendileg jó becslés, az egzakt érték -0.5.

M 13.12.

$$\langle f(x)|f(x)\rangle = \int_{-a}^{a}\cos^2\frac{\pi}{2a}x\mathrm{d}x = = \left[\frac{1}{2}x + \frac{2a}{4\pi}\sin\frac{\pi}{a}x\right]_{-a}^{a} = \frac{a}{2} - \Big(-\frac{a}{2}\Big) = a$$

$$f'(x) = \frac{1}{\sqrt{a}}\cos\frac{\pi}{2a}x$$

A variációs elv szerint:

$$E_0 \leq E(a) = \langle f'(x)|\hat{H}f'(x)\rangle = = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{a}\int_{-a}^{a}\cos\frac{\pi}{2a}x\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\Big(\cos\frac{\pi}{2a}x\Big)\,\mathrm{d}x + +\frac{k}{a}\int_{-a}^{a}x^2\cos^2\frac{\pi}{2a}x\,\mathrm{d}x =$$

$$= \frac{\pi^2}{4a^2} \cdot - \frac{\hbar^2}{2ma} \int_{-a}^{a} - \cos^2 \frac{\pi}{2a} x \, \mathrm{d}x +$$

$$+ \frac{k}{a} \int_{-a}^{a} x^2 \cos^2 \frac{\pi}{2a} x \, \mathrm{d}x =$$

$$= \frac{h^2}{32ma^3} a + \frac{k}{a} \left[\frac{2 \cdot 4a^2 x}{\pi^2} \cos \frac{\pi}{2a} x + \right.$$

$$\left. + \left(\frac{2ax^2}{\pi} - \frac{2 \cdot 8a^3}{\pi^3} \right) \sin \frac{\pi}{2a} x \right]_{-a}^{a} =$$

$$\boxed{= \frac{h^2}{32ma^2} + \frac{4ka^2}{\pi}}$$

A fenti energia ott lehet minimális, ahol az a szerinti deriváltja eltűnik:

$$\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}a} = - \frac{h^2}{16ma^3} + \frac{8ka}{\pi} = 0$$

$$\frac{8k}{\pi} = \frac{h^2}{16ma^4}$$

$$a^4 = \frac{h^2 \pi}{128m}$$

$$\boxed{a = \frac{1}{2} \sqrt[4]{\frac{h^2 \pi}{8m}}}$$

A próbafüggvény a $2a$ „szélességű” végtelen mély derékszögű potenciálvölgyben az alapállapot hullámfüggvénye.

M 13.14.

$$\langle \Psi(x) | \Psi(x) \rangle = N^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\gamma x^2} \, \mathrm{d}x = N^2 \sqrt{\frac{\pi}{\gamma}} = 1$$

$$N = \left(\frac{\gamma}{\pi} \right)^{\frac{1}{4}}$$

$$\langle x \rangle = \langle \Psi(x) | \Psi(x) \rangle = \sqrt{\frac{\gamma}{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} x e^{-\gamma x^2} \, \mathrm{d}x = 0$$

M 13.15.

$$\hat{p} = \frac{\hbar}{i} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}$$

$$\hat{p} \varphi_1(x) = N_1 \frac{\hbar}{i} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} \left(e^{-\frac{1}{2} \gamma x^2} \right) = N_1 \frac{\hbar}{i} e^{-\frac{1}{2} \gamma x^2} (-\gamma x) =$$

$$= -\gamma \frac{\hbar}{i} \frac{N_1}{N_2} N_2 x e^{-\frac{1}{2} \gamma x^2} == -\gamma \frac{\hbar}{i} \frac{N_1}{N_2} \varphi_2(x)$$

$$p_{1,1} = \langle \varphi_1(x) | \hat{p} \varphi_1(x) \rangle = \langle \varphi_1(x) | - \gamma \frac{\hbar}{i} \frac{N_1}{N_2} \varphi_2(x) \rangle = 0$$

$$p_{2,1} = \langle \varphi_2(x) | \hat{p} \varphi_1(x) \rangle = \langle \varphi_2(x) | - \gamma \frac{\hbar}{i} \frac{N_1}{N_2} \varphi_2(x) \rangle =$$

$$= -\gamma \frac{\hbar}{i} \frac{N_1}{N_2}$$

M 13.17.

Normáljuk a próbafüggvényt:

$$\langle \varphi(x) | \varphi(x) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-2\alpha x^2} \, \mathrm{d}x = \sqrt{\frac{\pi}{2\alpha}}$$

$$\varphi'(x) = \sqrt{\frac{2\alpha}{\pi}} e^{-\alpha x^2}$$

A variációs elv szerint:

$$E_0 \leq E(\alpha) = \langle \varphi'(x) | \hat{H} \varphi'(x) \rangle =$$

$$= - \frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{2\alpha}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha x^2} \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} \left(e^{-\alpha x^2} \right) \mathrm{d}x +$$

$$+ \frac{2\alpha}{\pi} \cdot \frac{1}{2} F \int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-2\alpha x^2} \, \mathrm{d}x =$$

$$= - \frac{h^2 \alpha}{4m\pi^3} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-2\alpha x^2} \left(4\alpha^2 x^2 - 2\alpha \right) \mathrm{d}x +$$

$$+ \frac{\alpha F}{\pi} \cdot \frac{\sqrt{\pi}}{2 \cdot (2\alpha)^{\frac{3}{2}}} =$$

$$= - \frac{h^2 \alpha^2}{2m\pi^3} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-2\alpha x^2} \left(2\alpha x^2 - 1 \right) \mathrm{d}x + \frac{F}{2^{\frac{5}{2}} \sqrt{\pi\alpha}} =$$

$$= - \frac{h^2 \alpha^2}{2m\pi^3} \left(2\alpha \frac{\sqrt{\pi}}{2 \cdot (2\alpha)^{\frac{3}{2}}} - \sqrt{\frac{\pi}{2\alpha}} \right) + \frac{F}{2^{\frac{5}{2}} \sqrt{\pi\alpha}} =$$

$$\boxed{= \frac{h^2\alpha^{\frac{3}{2}}}{2^{\frac{5}{2}}\pi^{\frac{5}{2}}m} + \frac{F}{2^{\frac{5}{2}}\sqrt{\pi\alpha}}}$$

Az energia ott lehet minimális, ahol az α szerinti deriváltja 0:

$$\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}\alpha} = \frac{1}{2^{\frac{5}{2}}\pi^{\frac{1}{2}}}\left(\frac{3h^2}{2\pi^2 m}\cdot\alpha^{\frac{1}{2}} - \frac{F}{2\alpha^{\frac{3}{2}}}\right) = 0$$

$$\alpha^2 = \frac{\pi^2 Fm}{3h^2}$$

$$\boxed{\alpha = \frac{\pi}{h}\sqrt{\frac{Fm}{3}}}$$

M 13.18.

A normált próbafüggvény a következő:

$$\Psi(x) = \frac{1}{\sqrt{a}}\cos\frac{\pi}{2a}x$$

A variációs elv szerint:

$$E_0 \le E(a) = \langle\Psi(x)|\hat{H}\Psi(x)\rangle = \langle\Psi(x)|\hat{T}\Psi(x)\rangle + $$
$$+\langle\Psi(x)|\hat{V}\Psi(x)\rangle$$

Mivel $\Psi(x)$ páros, $V(x)$ pedig páratlan függvény, ezért a második tag zérus.

$$\langle\Psi(x)|\hat{T}\Psi(x)\rangle =$$
$$= -\frac{\hbar^2}{2m}\int\limits_{-a}^{a}\frac{1}{\sqrt{a}}\cos\frac{\pi}{2a}x\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\left(\frac{1}{\sqrt{a}}\cos\frac{\pi}{2a}\right)\mathrm{d}x =$$

$$= \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\pi^2}{4a^3}\int\limits_{-a}^{a}\cos^2\frac{\pi}{2a}x\,\mathrm{d}x =$$

$$= \frac{h^2}{32ma^3}\left[\frac{x}{2} + \frac{2a}{4\pi}\sin\frac{\pi}{a}x\right]_{-a}^{a} =$$

$$= \frac{h^2}{32ma^3}a = \frac{h^2}{32ma^2}$$

M 13.24.

$$\Psi_{2p_0} = \Psi_{210} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}}re^{-\frac{r}{2}}\cos\vartheta$$

$$\hat{V} = -\frac{1}{r}$$

$$\langle V\rangle = \langle\Psi_{2p_0}|\hat{V}\Psi_{2p_0}\rangle =$$
$$= -\frac{1}{32\pi}\int\limits_0^\infty\int\limits_0^\pi\int\limits_0^{2\pi} re^{-\frac{r}{2}}\cos\vartheta\frac{1}{r}re^{-\frac{r}{2}}\cos\vartheta\cdot$$
$$\cdot r^2\sin\vartheta\,\mathrm{d}r\,\mathrm{d}\vartheta\,\mathrm{d}\varphi =$$
$$= -\frac{1}{32\pi}\cdot 2\pi\int\limits_0^\infty r^3e^{-r}\,\mathrm{d}r\int\limits_0^\pi\cos^2\vartheta\sin\vartheta\,\mathrm{d}\vartheta =$$
$$= -\frac{1}{16}\cdot\frac{3!}{1^4}\cdot\left(-\frac{1}{3}\left[\cos^3\vartheta\right]_0^\pi\right) = -\frac{1}{4}$$

$$\hat{T} = -\frac{1}{2}\Delta =$$
$$-\frac{1}{2}\left[\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \right.$$
$$\left. + \frac{1}{r^2}\left(\frac{1}{\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\vartheta}\left(\sin\vartheta\frac{\partial}{\partial\vartheta}\right) + \frac{1}{\sin^2\vartheta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right)\right]$$

$$\hat{T}\Psi_{2p_0} =$$
$$-\frac{1}{2}\cdot\frac{1}{4\sqrt{2\pi}}\left[\left(\frac{r}{4}-1\right)e^{-\frac{r}{2}}\cos\vartheta + \left(\frac{2}{r}-1\right)e^{-\frac{r}{2}}\cos\vartheta - \right.$$
$$\left. -\frac{2}{r}e^{-\frac{r}{2}}\cos\vartheta\right] = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}}\left(1-\frac{r}{8}\right)e^{-\frac{r}{2}}\cos\vartheta$$

$$\langle T\rangle = \langle\Psi_{2p_0}|\hat{V}\Psi_{2p_0}\rangle =$$
$$= \frac{1}{32\pi}\int\limits_0^\infty\int\limits_0^\pi\int\limits_0^{2\pi} re^{-\frac{r}{2}}\cos\vartheta\left(1-\frac{r}{8}\right)e^{-\frac{r}{2}}\cos\vartheta\cdot$$
$$\cdot r^2\sin\vartheta\,\mathrm{d}r\,\mathrm{d}\vartheta\,\mathrm{d}\varphi =$$
$$= \frac{1}{32\pi}\cdot 2\pi\int\limits_0^\infty\left(r^3 - \frac{r^4}{8}\right)e^{-r}\,\mathrm{d}r\int\limits_0^\pi\cos^2\vartheta\sin\vartheta\,\mathrm{d}\vartheta =$$
$$= \frac{1}{16}\cdot\left(\frac{3!}{1^4} - \frac{4!}{8\cdot 1^5}\right)\cdot\left(-\frac{1}{3}\left[\cos^3\vartheta\right]_0^\pi\right) = \frac{1}{8}$$

$2\langle T\rangle = -\langle V\rangle$ (teljesül a viriáltétel)

$$\langle E\rangle = -\frac{1}{8} = -\langle T\rangle$$

M 13.27.

$$\Psi_{3p_{+1}} = \Psi_{31+1} = \frac{1}{81\sqrt{\pi}}r\,(6-r)\,e^{-\frac{r}{3}}\sin\vartheta e^{i\varphi}$$

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V} = -\frac{1}{2}\Delta - \frac{1}{r}$$

$$\langle E\rangle = \langle\Psi_{3p_{+1}}|\hat{H}\Psi_{3p_{+1}}\rangle = \langle T\rangle + \langle V\rangle = -\langle V\rangle$$

A legutolsó egyenlőség a viriáltételből adódik.

$$\langle V\rangle = \langle \Psi_{3p_{+1}}|\hat{V}\Psi_{3p_{+1}}\rangle =$$

$$= -\frac{1}{81^2\pi}\int_0^\infty\int_0^\pi\int_0^{2\pi}\left(6r-r^2\right)^2 e^{-\frac{2r}{3}}\frac{1}{r}\sin^2\vartheta\, e^{-i\varphi}e^{i\varphi}\cdot$$

$$\cdot r^2\sin\vartheta\,\mathrm{d}r\,\mathrm{d}\vartheta\,\mathrm{d}\varphi =$$

$$= -\frac{1}{6561\pi}\cdot 2\pi\int_0^\infty r\left(6r-r^2\right)^2 e^{-\frac{2r}{3}}\,\mathrm{d}r\int_0^\pi \sin^3\vartheta\,\mathrm{d}\vartheta =$$

$$= -\frac{2}{6561}\int_0^\infty\left(36r^3-12r^4+r^5\right)e^{-\frac{2r}{3}}\,\mathrm{d}r\cdot$$

$$\cdot\left[-\cos\vartheta+\frac{1}{3}\cos^3\vartheta\right]_0^\pi =$$

$$-\frac{2}{3^8}\cdot\frac{4}{3}\cdot\left(36\frac{3!3^4}{2^4}-12\frac{4!3^5}{2^5}+\frac{5!3^6}{2^6}\right) = -\frac{1}{9}$$

$$\langle E\rangle = -\langle V\rangle = \frac{1}{9}$$

$$\langle L^2\rangle = \langle\Psi_{3p_{+1}}|\hat{L}^2\Psi_{3p_{+1}}\rangle = \langle\Psi_{3p_{+1}}| - \Delta_{\vartheta,\varphi}\Psi_{3p_{+1}}\rangle$$

$$\Delta_{\vartheta,\varphi} = \frac{1}{\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\vartheta}\left(\sin\vartheta\frac{\partial}{\partial\vartheta}\right)+\frac{1}{\sin^2\vartheta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}$$

$$-\Delta_{\vartheta,\varphi}\Psi = \left(12-2r^2\right)e^{-\frac{r}{3}}\sin\vartheta\, e^{i\varphi} = 2\Psi$$

$$\langle L^2\rangle = \langle\Psi|2\Psi\rangle = 2\langle\Psi|\Psi\rangle = 2$$

$\langle L\rangle = \sqrt{2}\hbar$ (kiírva az atomi mértékegységet)

$$\langle L_z\rangle = \langle\Psi_{3p_{+1}}|\hat{L}_z\Psi_{3p_{+1}}\rangle = \langle\Psi_{3p_{+1}}| - i\frac{\partial}{\partial\varphi}\Psi_{3p_{+1}}\rangle$$

$$-i\frac{\partial}{\partial\varphi}\Psi = \left(6-r^2\right)e^{-\frac{r}{3}}\sin\vartheta\, e^{i\varphi} = \Psi$$

$$\langle L_z\rangle = \langle\Psi|\Psi\rangle = 1$$

$\langle L_z\rangle = \hbar$ (kiírva az atomi mértékegységet)

$\langle m\rangle = -\frac{\beta_B}{\hbar}\langle L\rangle = -\sqrt{2}\beta_B$ (β_B a Bohr-magneton)

$$\langle m_z\rangle = -\frac{\beta_B}{\hbar}\langle L_z\rangle = -\beta_B$$

M 13.31.

$$\hat{H} = -\frac{1}{2}\Delta - \frac{1}{r}$$

$$E = \frac{\langle\Phi|\hat{H}\Phi\rangle}{\langle\Phi|\Phi\rangle}$$

$$\langle\Phi|\Phi\rangle = \int_0^\infty\int_0^\pi\int_0^{2\pi} e^{-2\alpha r}r^2\sin\vartheta\,\mathrm{d}r\,\mathrm{d}\vartheta\,\mathrm{d}\varphi = 4\pi\frac{2!}{(2\alpha)^3}$$

$$\langle\Psi(x)|\hat{H}\Psi(x)\rangle =$$

$$= -\frac{1}{2}\int_0^\infty\int_0^\pi\int_0^{2\pi} e^{-\alpha r}\Delta\left(e^{-\alpha r}\right)r^2\sin\vartheta\,\mathrm{d}r\,\mathrm{d}\vartheta\,\mathrm{d}\varphi +$$

$$+\int_0^\infty\int_0^\pi\int_0^{2\pi} e^{-\alpha r}\frac{1}{r}e^{-\alpha r}r^2\sin\vartheta\,\mathrm{d}r\,\mathrm{d}\vartheta\,\mathrm{d}\varphi =$$

$$= -\frac{1}{2}\int_0^\infty\int_0^\pi\int_0^{2\pi}\left(\alpha^2-\frac{2}{r}\alpha\right)r^2e^{-2\alpha r}\sin\vartheta\,\mathrm{d}r\,\mathrm{d}\vartheta\,\mathrm{d}\varphi +$$

$$+\int_0^\infty\int_0^\pi\int_0^{2\pi} re^{-2\alpha r}\sin\vartheta\,\mathrm{d}r\,\mathrm{d}\vartheta\,\mathrm{d}\varphi =$$

$$= -2\pi\alpha^2\frac{2!}{(2\alpha)^3}+4\pi\alpha\frac{1!}{(2\alpha)^2}-4\pi\frac{1!}{(2\alpha)^2}$$

$$E(\alpha) = \frac{2\pi\alpha^2\frac{2!}{(2\alpha)^3}-4\pi\frac{1!}{(2\alpha)^2}}{4\pi\frac{2!}{(2\alpha)^3}} = \frac{1}{2}\alpha^2-\alpha$$

Az energia ott lehet minimális, ahol az α szerinti deriváltja 0:

$$\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}\alpha} = \alpha - 1 = 0$$

$$\alpha = 1$$