IDEIGLENES PÉLDATÁR

vegyészhallgatók számára

A "Kémiai Matematika" c. tantárgyhoz

— kézirat gyanánt —

Összeállította:

Surján Péter
Szabados Ágnes
Lázár Armand

ELTE TTK Elméleti Kémia Tanszék
2002

ELŐSZÓ

Ez a példatár a II. éves vegyészhallgatók számára készül a "Kémiai Matematika" c. tantárgyhoz kapocsolódó számolási gyakorlatok segédanyagaként. Az "ideiglenes" jelző arra utal, hogy – bár folyamatosan javítjuk és fejlesztjük – még sok fontos példa hiányzik, a meglévő példák összeállítása, sorrendje több helyen esetleges, nehézségi fokuk nem kiegyensúlyozott. Az idén először közreadott megoldások hibát is tartalmazhatnak – ezek megkereséséhez és kijavításához kérjük a T. kollégák szemfüles segítségét. A jelen kiadás hiányos is, mert nem tartalmazza a kvantummechanikai példák egy részének megoldását. Mindezen negatívumok ellenére azt gondoltuk, hogy az ideiglenes példatár közreadása felbecsülhetetlen segítséget jelent az anyag elsajátításához.

A példák forrása részben az elmúlt években kialakult rend szerint a gyakorlatokon megoldásra kerülő feladatai, részben az elmúlt évek zárthelyi dolgozatainak példái. Kivételt képez a csoportelmélet és a kvantummechanika fejezet, amely jórészt az Elméleti Kémia Tanszék korábbi, még a "Kémiai Matematika" c. tantárgy bevezetése előtt összeállított és sokszorosítva rendszeresen közreadott feladatait tartalmazza.

A példákat három nehézségi fokú csoportba soroltuk. A jelöletlen feladatok – ezek vannak a legtöbben – a legkönnyebbek, ezeket mindenkinek meg kell tudni oldani. A (*)-gal jelölt feladatok középnehezek, ezek megoldását a jobb érdemjegyet igénylőktől követeljük csak meg. Végül (**) jelöli az érdekesebb feladatokat, amelyeket nem kérünk számon, csak szorgalmi jelleggel ajánljuk az anyagon túlmenő érdeklődésű kollegáknak.

A példák megoldásához sok sikert kívánunk.

Budapest, 2002 szeptemberében

Surján Péter

Tartalomjegyzék

I. PÉLDÁK

1. Bevezető számolási gyakorlatok

1.1.
Egyszerűsítsük a következő kifejezéseket:

1. $\frac{1}{\kappa}\sum_{k=1}^{n}\frac{\kappa+\lambda_k}{2}$
2. $a_1+\sum_{j=1}^{n-1}a_{j+1}$
3. $\sum_{k=1}^{n}(i_k-i_{k+1})$

1.2.
Legyen $A=\sum_i a_i$ és $B=\sum_i b_i$.
Igaz-e, hogy $AB=\sum_i a_i b_i$?

1.3.
Tekintsük az alábbi mennyiséget:
$C=\sum_{k=1}^{N}w_k\sum_{j=1}^{N}L_{kj}v_j-\sum_{i,l=1}^{N}L_{li}w_l v_i$

1. Lecserélhető-e a 'j' összegző index 'k'-ra?
2. Lecserélhető-e az 'i' összegző index 'l'-re?
3. Lecserélhető-e a 'k' összegző index 'j'-re, ha ugyanakkor a 'j'-t 'k'-ra változtatjuk?
4. Lecserélhető-e a 'k' összegző index 'i'-re vagy 'l'-re?
5. Lecserélhető-e a 'j' összegző index 'i'-re vagy 'l'-re?
6. Egyszerűsítsük a kifejezést!
7. Írjuk fel a kifejezést indexek nélkül (mátrixos, vektoros jelöléssel)!

1.4.
Mit adnak az alábbi összegzések:

1. $\sum_{k=1}^{3}\delta_{ik}\delta_{kj}$
2. $\sum_{k,i=1}^{3}\delta_{ik}\delta_{ki}$
3. $\sum_{i,j,k=1}^{3}\delta_{ij}\delta_{ij}$

(δ_{ik} a Kronecker-delta)

2. Határérték; a rend fogalma

2.1.
Számítsuk ki az alábbi $n\to\infty$ határértékeket:

1. $a_n=\frac{n+4}{n}$
2. $a_n=\frac{n}{2n^2-1}$
3. $a_n=\frac{n^2-1}{n^2+1}$
4. $a_n=\frac{\cos(n)}{n^2}$
5. $a_n=\frac{5n^2+2}{7n^2+900}\left(1+\frac{4}{n}+\frac{7n}{14n^2+3}\right)$
6. **(*)** $a_n=\frac{1}{n^k}\binom{n}{k}$

2.2.
Legyen $F(\varepsilon)=(a\varepsilon^2+b\varepsilon)^2(\varepsilon+1)$
Adjuk meg $\mathcal{O}(4)$-ig !

2.3.
Közelítsük $\mathcal{O}(3)$ -ig az alábbi kifejezést:

$$F=(1+\epsilon+\epsilon^2)^2$$

2.4.
Közelítsük kis x-re $\mathcal{O}(3)$-ig az $e^{\cos(x)}$ kifejezést!

2.5.
Számítsuk ki az alábbi határértékeket:

1. $\lim_{x\to1}\frac{x^5-1}{x^4-1}$
2. $\lim_{x\to\infty}\frac{x^2+8x-1}{x^3-1000x}$
3. $\lim_{x\to\infty}\sin(x)$

4. $\lim_{x\to 0} \dfrac{\sin(x)}{x}$

2.6.
Becsüljük meg a $\sqrt{1-\sin 10^o}$ kifejezés értékét!

2.7.
Közelítsük (számológép nélkül) az alábbi számot: $\exp\sqrt{1-\mathrm{arctg}(2\cdot 10^{-3})}$

3. Egyváltozós differenciálás és integrálás

3.1.
Igazoljuk a kis változások módszerével, hogy

$$\frac{d}{dx}x^3 = 3x^2$$

3.2.
Deriváljuk az alábbi függvényeket:

1. $f(x) = (2x+1)^3$
2. $f(x) = \dfrac{x^2+5x}{3x^2-3x}$
3. $f(x) = \sqrt{1+\sqrt{x}}$
4. $f(x) = 3e^{4x^2}\left[1+2x+6x^2\right]$
5. $f(x) = x^x$
6. $f(x) = \int_0^x g(y)\,\mathrm{d}y$
7. **(**)** $f(x) = \int_0^x g(x,y)\,\mathrm{d}y$

3.3.
Legyen $y = \sin(z)$ és $z = x^2+1$. Adjuk meg a $\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}x}$ deriváltat!

3.4.
Fejtsük Taylor-sorba az $f(x) = e^{\sin(x)}$ függvényt az origó körül!

3.5.
Fejtsük Taylor-sorba az $f(x,y) = e^{x+y}$ függvényt!

3.6.
Tekintsük azt az $f(x)$ függvényt, amelyik y=1-nél 45^o-os szögben metszi az y tengelyt, és amelyre igaz, hogy $f(x_1+x_2) = f(x_1).f(x_2)$. Számítsuk ki a $\mathrm{d}f/\,\mathrm{d}x$ deriváltat!

3.7.
Végezzük el az alábbi integrálásokat:

1. $\int \mathrm{d}x$
2. $\int x^4\,\mathrm{d}x$
3. $\displaystyle\int \frac{1}{x^2}\,\mathrm{d}x$
4. $\int (6x^4-3x^2+x+7)\,\mathrm{d}x$
5. $\int \mathrm{tg}(x)\,\mathrm{d}x$
6. $\displaystyle\int \frac{x}{1+x^2}\,\mathrm{d}x$
7. $\displaystyle\int \frac{e^x}{e^x+1}\,\mathrm{d}x$
8. $\int \ln(x)\,\mathrm{d}x$
9. $\int \cos^2(x)\,\mathrm{d}x$
10. $\int \sqrt[4]{1-4x}\,\mathrm{d}x$
11. $\int xe^x\,\mathrm{d}x$
12. $\int e^x\sin(e^x)\,\mathrm{d}x$
13. $\int x^2\cos(x)\,\mathrm{d}x$
14. $\int e^{2x}\sin(e^x)\,\mathrm{d}x$

3.8.
Számítsuk ki az alábbi integrálok értékét (szükség esetén használjunk integráltáblázatot):

1. $\int_0^{\pi/2} x\ \cos(x)\,\mathrm{d}x$
2. $\int_0^{\infty} x^5\ e^{-2x}\,\mathrm{d}x$
3. $\int_{-\infty}^{\infty} x^2\ e^{-2x^2}\,\mathrm{d}x$
4. $\int_0^{\infty} \sqrt{x}\ e^{-x}\,\mathrm{d}x$

5. $\int\limits_0^\infty \frac{x}{e^x - 1}\,\mathrm{d}x$

6. $\int\limits_0^\infty \frac{x}{e^{+1}}\,\mathrm{d}x$

4. Többváltozós differenciálás

4.1.
Adjuk meg az alábbi függvények parciális deriváltjait !

1. $f(x,y) = \dfrac{x}{x^2+y^2}$
2. $f(x,y) = \dfrac{1}{ln(x.y^2)}$
3. $f(x,y) = ln\sqrt{x^2+y^2}$
4. $\Psi(x,y,z) = e^{-\sqrt{x^2+y^2+z^2}}$

4.2.
Ellenőrizzük a Young tétel érvényességét az alábbi függvény példáján:

$$f(x,y) = (2x+y)^3$$

4.3.
Számítsuk ki az

$$f(x,y) = \frac{1}{\sqrt{(x-x_0)^2+(y-y_0)^2}}$$

függvény gradiensét a síkban !

4.4.
Legyen

$$\Phi(x,y,z) = \sin(x^2+y^2+z^2)^{\frac{1}{2}}$$

Számítsuk ki Φ gradiensét!

4.5.
Legyen $f(x,y,z) = (x^2+y^2+z^2)^n, n > 0$. Számítsuk ki $\triangle f$ -t a 3 dimenziós térben!

4.6.
Írjuk föl az $f(x,y) = 5x^2 - 3y^3 + x\,y^2$ függvény teljes deriváltját!

4.7.
Az ideális gáz állapotegyenlete $pV = nRT$, ahol R állandó. Tekintsük n-et is konstansnak. Hogyan változik a gáz hőmérséklete, ha nyomását kicsiny $\triangle p$-vel, térfogatát kicsiny $\triangle V$-vel megváltoztatjuk?

4.8.
Reális gáz nyomását kicsiny dp -vel, térfogatát dV -vel növeljük. Hogyan változik a hőmérséklete ?

(Állapotegyenlet:

$$(p + \frac{a}{V^2})(V - b) = RT$$

ahol a, b, és R: const.)

4.9.
Az atommag elektromos potenciálja $\Phi = -\dfrac{Z}{r}$. Számítsuk ki a térerősség vektorát! Mennyi ennek a vektornak az abszolút értéke a tér egyes pontjaiban?

4.10.
Igazoljuk az alábbi azonosságokat:

1. div rot $\mathbf{v} = 0$
2. rot grad $\Phi = 0$

4.11.
Legyen $\mathbf{v}(\mathbf{r}) = \mathbf{r}$. Számítsuk ki ennek a centrális térnek a divergenciáját!

4.12.
Számítsuk ki az

$$\mathbf{E} = \frac{\mathbf{r}}{r^3}$$

Coulomb–tér divergenciáját!

4.13. (**)
Igazoljuk, hogy div $\mathbf{v}$ értéke invariáns a koordináta rendszer elforgatására!

4.14. (**)
Igazoljuk, hogy Δ operátor Descartes-alakja invariáns a koordináta rendszer elforgatására!

4.15.
Legyen $\Phi = x^2.y.z^3$ és $\mathbf{a} = xz\mathbf{i} - y^2\mathbf{j} + 2x^2y\mathbf{k}$, ahol $\mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{k}$ az x, y, z irányú egységvektorokat jelöli. Adjuk meg div $\mathbf{a}$-t és rot $(\Phi\mathbf{a})$-t!

5. Többváltozós integrálás

5.1.
Végezzük el az

$$\int\int x^2(x+y)\,\mathrm{d}x\,\mathrm{d}y$$

integrálást!

5.2.
Számítsuk ki az f(x)=x^2 parabola ívének hosszúságát az (1,1) és a (2,4) pontok között!

5.3.
Milyen hosszú a lánc az y=0 tengely x=-1 és x=+1 pontjai között kifeszítve ? (A 'láncgörbe': $y = y_0 + ch(x)$, ahol y_0 konstans.)

5.4.
Számítsuk ki a kör kerületét ívhosszintegrállal!

5.5.
Határozzuk meg az $y = x^2$ parabola és az $y = x + 2$ egyenes által közrezárt tartomány területét kettős integrállal !

5.6.
Vázoljuk fel az $y = x^2$, $x = 2$, és $y = 1$ függvények által határolt $\mathcal{R}$ területet. Számítsuk ki a

$$\int\int_{\mathcal{R}}(x^2+y^2)\,\mathrm{d}x\,\mathrm{d}y$$

integrált!

5.7.
Számítsuk ki a kör területét kettős integrállal!

5.8.
Számítsuk ki a gömb felszínét!

5.9.
Számítsuk ki a gömb térfogatát!

5.10. (*)
Számítsuk ki az ellipszis területét kettős integrállal!

5.11.
Adjuk meg a $\mathbf{v}(\mathbf{r}) = (v_x, v_y) = (x^2, -yx)$ vektortér $\displaystyle\int_L (v_x\,\mathrm{d}x + v_y\,\mathrm{d}y)$vonalintegrálját az $y = -2x + 2$ egyenes mentén $x = 0$-tól $x = 1$-ig integrálva!

5.12. (*)
Határozzuk meg az $\mathbf{F}(\mathbf{r}) = \dfrac{x}{x^2+y^2}\mathbf{i} + \dfrac{y}{x^2+y^2}\mathbf{j}$ vektortér integrálját az $L = \{\ \mathbf{r}(\varphi) = \mathbf{i}\cos(\varphi) + \mathbf{j}\sin(\varphi) + \mathbf{k}\varphi | \varphi \in [0, 2\pi]\ \}$ görbe mentén! ($\mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{k}$ a Descartes bázisvektorok, x, y, z a helyvektor komponensei; az L görbe az egységsugarú henger palástján emelkedő spirált ír le, a görbe paramétere a henger koord. rendszer φ szöge)

5.13.
Mit ad az $\mathbf{u}(\mathbf{r}) = \mathrm{grad}\Phi(\mathbf{r})$ vektormező integrálja az $A(1,1,1)$ és a $B(2,3,5)$ pontokat összekötő tetszőleges görbére, ha $\Phi(\mathbf{r}) = x^3yz^2$?

6. Szélsőértékszámítás, variációszámítás

6.1.
Hol lehet szélsőértéke az $f(x) = x^2e^{-x}$ függvénynek?

6.2.
Hol lehet szélsőértéke az $f(x, y) = x^2y^2$ függvénynek

az $x + y = 1$ mellékfeltétellel?

6.3.
Állapítsuk meg a Hess mátrix segítségével, hogy van-e szélsőértéke az alábbi kétváltozós függvénynek:

$$f(x,y) = xy + x^2 + y^2$$

6.4.
Hol veszi föl az $f(x,y) = xy + x^2 + 2y^2$ függvény legnagyobb ill. legkisebb értékét az 1 sugarú kör mentén?

6.5.
Hol veszi föl az $f(x,y,z) = 2xy + 2yz$ függvény legnagyobb ill. legkisebb értékét az 1 sugarú gömb felületén?

6.6.
Hol lehet szélsőértéke az $f(x,y,z) = \frac{1}{x} + \frac{4}{y} + \frac{9}{z}$függvénynek az $x + y + z = 12$ mellékfeltétel figyelembevételével?

6.7.
Vizsgáljuk az $f(x,y) = (e^x - 1).y$ függvényt!

(a) Mely x, y pontban stacionárius?

(b) Határozzuk meg ebben a pontban a normálkoordinátákat, mint a Hess mátrix sajátvektorait!

(c) Döntsük el a sajátértékek alapján, hogy van-e szélsőértéke a függvénynek!

6.8.
Hol lehet szélsőértéke az alábbi funkcionálnak?
$J(f) = \int\limits_a^b \left(f^3(x)x^2 - f^2(x)x^3\right)\,\mathrm{d}x$

6.9.
Hol lehet szélsőértéke az alábbi funkcionálnak ?

$$J(f) = \int_a^b [f(x)\; ln\; f(x)\; - 2\; f(x)]\;\mathrm{d}x$$

6.10.
Hol lehet szélsőértéke a

$$J(f) = \int\limits_0^{\pi/2} \cos(x) f(x)\,\mathrm{d}x$$

funkcionálnak a

$$\int_0^{\pi/2} f^2(x)\,\mathrm{d}x = 1$$

mellékfeltétellel?

6.11.
Melyik $f(x)$ függvény teszi stacionáriussá a

$$J(f) = \int_0^1 x^2\; f(x)\,\mathrm{d}x$$

funkcionált azzal a mellékfeltétellel, hogy $f(x)$ normált az L_2[0,1] téren?

6.12. (*)
Tekintsük az alábbi funkcionált:

$$J(f) = \int\limits_0^1 \left(f^2(x) - f'^2(x)\right)\,\mathrm{d}x$$

Ennek keressük a szélsőértékét az $f(0) = 0$ és $f(1) = 1$ határfeltételek mellett. Mutassuk meg, hogy a

$$\phi(x) = x + cx(1-x)$$

próbafüggvény minden c-re kielégíti a határfeltételeket! Mennyi a c paraméter optimális értéke? (*Ritz-módszer*)
Oldjuk meg egzaktul is a problémát!

6.13.
Legyen $\mathbf{v}$ = (x,y) 2-dimenziós normált vektor. Minimalizáljuk az

$$E = \langle \mathbf{v} | \mathbf{H} \mathbf{v} \rangle$$

skalárszorzatot az $x^2 + y^2 = 1$ mellékfeltétellel, ha

$$\mathbf{H} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

6.14.
Egy menekülőnek az **A** pontból a **B** pontba kell

futnia. Az út először rögös terepen vezet; itt $\mathbf{v}_1$ sebességgel tud futni. Egy határvonal után szabadabb terepen $\mathbf{v}_2$ sebességgel futhat. Milyen szög alatt fusson, hogy legrövidebb idő alatt érjen oda?

7. Koordinátarendszerek

7.1.
Adjuk meg az $(x,y) = (-3, 2.5)$ pontot síkbeli polárkoordinátákban!

7.2.
Adjuk meg az $(x,y,z) = (1,-2,-1)$ pontot térbeli polárkoordinátákban!

7.3.
Mik a Descartes-koordinátái az $(r,\phi) = (1,\pi/2)$ pontnak?

7.4.
Mik a Descartes-koordinátái az $(r,\theta,\phi) = (2,\pi/4,\pi)$ pontnak?

7.5.
Számítsuk ki a síkbeli polárkoordiáta-rendszer Jacobi determinánsát!

7.6.
Számítsuk ki a térbeli polárkoordiáta-rendszer Jacobi determinánsát!

7.7.
Írjuk fel a síkbeli polárkoordiáta-rendszer metrikus mátrixát!

7.8.
Írjuk fel a térbeli polárkoordiáta-rendszer metrikus mátrixát!

7.9. (**)
Tudjuk, hogy az

$$x = \frac{R}{2}\sqrt{(\mu^2-1)(1-\nu^2)}\cos(\phi)$$

$$y = \frac{R}{2}\sqrt{(\mu^2-1)(1-\nu^2)}\sin(\phi)$$

$$z = \frac{R}{2}\mu\nu$$

transzformációt végrehajtva egyenleteinket a μ, ν, és ϕ ortogonális koordinátarendszerben írhatjuk fel (elliptikus koordináták). Hogy fest a metrikus mátrix az elliptikus koordinátarendszerben?

7.10.
Szemléltessük rajzban azt a tényt, hogy a síkbeli polárkoordináta-rendszer "térfogateleme" $d\tau = r\ dr\ d\phi$!

7.11. (*)
Mi a szemléletes magyarázata a térbeli polárkoordináta-rendszer térfogatelemét megadó $dV = r^2 dr \sin\theta\ d\theta\ d\phi$ képletnek?

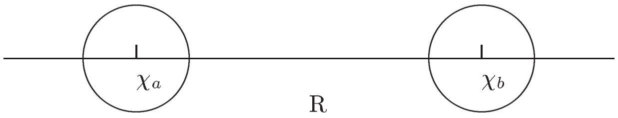
7.12. (*)
Legyen $f(x,y,z) = f(r)$ gömbszimmetrikus függvény. Számítsuk ki $\triangle f$-et! (Útm.: tekintsük $f(r)$ hatványsorát, beleértve a negatív kitevőjű tagokat is.) Mit lehet mondani az $f(r) = 1/r$ esetről?

7.13.
Végezzük el az alábbi integrálást:
$$\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\sqrt{x^2+y^2}}\,\mathrm{d}x\,\mathrm{d}y$$

7.14.
Számítsuk ki az alábbi térfogati integrált:

$$\int\int_{-\infty}^{\infty}\int \frac{\left[e^{-\sqrt{x^2+y^2+z^2}}\right]^{\frac{7}{3}}}{x^2+y^2+z^2}\,\mathrm{d}x\,\mathrm{d}y\,\mathrm{d}z$$

7.15. (*)
Az **a** és a **b** pontba az ábra szerint elhelyezzük a $\chi_a = e^{-r_a}$ ill $\chi_b = e^{-r_b}$ függvényeket, ahol r_a és r_b az **a** és a **b** pontoktól mért távolságot jelenti. Számítsuk ki a $\langle\chi_a|\chi_b\rangle$ skalárszorzatot! (Átfedési integrál)



8. Komplex függvények

8.1.
Adjuk meg a $z^4 + 1 = 0$ egyenlet gyökeinek valós részét! Rajzoljuk föl a gyököket a komplex számsíkon!

8.2.
Melyik az a j szám, amelyre $j^2 = -i$?

8.3.
Bizonyítsuk be, hogy

$$i^i = e^{-\pi/2}$$

Mi az érdekessége ennek a képletnek?

8.4.
Válasszuk szét az $f(z) = z^2$ függvény valós és képzetes részét!

8.5.
Válasszuk szét az $f(z) = \sin(z)$ függvény valós és képzetes részét!

8.6.
Írjuk fel az $f(z) = \sin(z)$ függvényt exponenciális alakban !

8.7.
Hogy fest az $f(z) = \sin(z)$ függvény domborzata?

8.8.
Vizsgáljuk meg, hogy analitikusak-e az alábbi függvények az egész komplex számsíkon:

a.) $\cos(z)$

b.) $\sin(z)$

c.) e^z

d.) $\dfrac{\cos(z)}{z}$

e.) $\dfrac{\sin(z)}{z}$

f.) $\dfrac{e^z}{z}$

8.9.
Hol analitikusak az alábbi függvények?

a.) $f(z) = f(x+iy) = x^2 - y^2 + i(2xy)$

b.) $f(z) = f(x+iy) = 2x + y + i(x+2y)$

8.10.
Deriváljuk le a $z^n e^z$ komplex függvényt!

8.11.
Adjuk meg az $\dfrac{e^z}{z^4}$ függvény Laurent-sorát!
Hol analitikus ez a függvény?

8.12.
Vizsgáljuk az $f(z) = \dfrac{1}{z}$ komplex függvényt!

a.) Válasszuk szét a valós és képzetes részeket!

b.) Állapítsuk meg, hogy hol analitikus $f(z)$?

8.13.
Határozzuk meg a ze^z komplex függvény primitív függvényét!

8.14. (**)
Milyen feltételnek kell eleget tegyen egy komplex függvény, hogy egy végtelen sugarú origó

középpontú félkör mentén vett integrálja eltűnjön?

8.15.
Számítsuk ki az alábbi valós integrált a komplex sík alkalmasan választott kontúrján integrálva!

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{d}x}{4+x^2}$$

8.16.
Számítsuk ki az

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\cos(x)}{1+x^2}\,\mathrm{d}x$$

integrált!

9. Lineáris terek és operátorok, mátrixszámítás

9.1.
Normáljuk az alábbi vektort :

$$\mathbf{a} = (-2, 0, 4, \sqrt{5})$$

9.2.
Számítsuk ki az $\langle \mathbf{a}|\mathbf{b}\rangle$ skalárszorzatot, ha $|\mathbf{a}\rangle = |1, 2i, 3\rangle$ és $|\mathbf{b}\rangle = |2, 1, -i\rangle$!

9.3.
Egyszerűsítsük az alábbi kifejezéseket:

a.) $\langle e^{i\alpha}\mathbf{x}|e^{i\alpha}\mathbf{x}\rangle$

b.) $\langle (a+ib)\mathbf{x}|\mathbf{y}\rangle.\langle \mathbf{x}|(a+ib)\mathbf{y}\rangle$

9.4.
Legyen $|a\rangle$ és $|b\rangle$ két ortonormált vektor a Hilbert térben. Bizonyítsuk be, hogy a

$$|c'\rangle = |c\rangle - \Big(|a\rangle\langle a| + |b\rangle\langle b|\Big)|c\rangle$$

vektor ortogonális $|a\rangle$-ra és $|b\rangle$-re!

9.5.
Adott a síkon két vektor,
$\mathbf{e}_1 = (1, \sqrt{3})$ és $\mathbf{e}_2 = (-\sqrt{3}, 1)$.

a) Ortogonális-e a két vektor? Normáljuk $\mathbf{e}_1$-t és $\mathbf{e}_2$-t!

b) Fejtsük ki a $\mathbf{v} = (0, 1)$ vektort a normált $\mathbf{e}_1$ és $\mathbf{e}_2$ alkotta bázison!

9.6.
Határozzuk meg az alábbi mátrix inverzét:

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ x & 2 \end{pmatrix}$$

Mikor létezik az inverz ?

9.7.
Határozzuk meg az alábbi mátrixok determinánsát, sajátértékeit és normált sajátvektorait!

a.) $\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 10 & 5 & 0 \\ 5 & 10 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}$ b.) **(*)** $\mathbf{B} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & i \\ 0 & 3 & 0 \\ -1 & 0 & 1 \end{pmatrix}$

9.8.
Számítsuk ki az alábbi két mátrix kommutátorát:

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 3 & 4 \\ 2 & 3 \end{pmatrix} \qquad \mathbf{B} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 2 & 5 \end{pmatrix}$$

9.9.
Felcserélhető-e

1. két diagonális mátrix szorzása;
2. egy általános és egy diagonális mátrix szorzása?

9.10.
Kommutál-e az alábbi két mátrix?

$$\mathbf{A}=\begin{pmatrix} \cos\alpha & -\sin\alpha & 0 \\ \sin\alpha & \cos\alpha & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \mathbf{B}=\begin{pmatrix} \cos\beta & -\sin\beta & 0 \\ \sin\beta & \cos\beta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

9.11.
Igazoljuk, hogy az alábbi mátrix unitér, és írjuk fel az inverzét!

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} -\frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{1}{\sqrt{3}} \\ \frac{2}{\sqrt{6}} & \frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{1}{\sqrt{6}} \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}$$

9.12.
Adott a sík $\mathbf{v} = (\ 1,\ \sqrt{3}\ )$ vektora. Forgassuk el 30^o-kal pozitív irányba! Mik az új komponensek?

9.13. (*)
Számítsuk ki az

$$\mathbf{A} = \frac{\pi}{4}\begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 1 \end{pmatrix}$$

mátrix cosinusát!

9.14.
Mivel egyenlő $(\hat{A} + \hat{B})^2$, ha $\hat{A}$ és $\hat{B}$ nem kommutáló operátorok?

9.15.
Igazoljuk az alábbi azonosságot:

$$\left[\hat{A}, \left[\hat{B}, \hat{C}\right]\right] + \left[\hat{B}, \left[\hat{C}, \hat{A}\right]\right] + \left[\hat{C}, \left[\hat{A}, \hat{B}\right]\right] = 0$$

9.16.
Igazoljuk, hogy $(\hat{A}\hat{B})^{-1} = \hat{B}^{-1}\hat{A}^{-1}$!

9.17.
Igazoljuk, hogy $(\hat{A}\hat{B})^{\dagger} = \hat{B}^{\dagger}\hat{A}^{\dagger}$!

9.18.
Legyen $\hat{A}$ lineáris operátor. Lineáris-e az $\hat{A}^2$ operátor?

9.19.
Megvizsgálandó, hogy két hermitikus operátor

a) összege

b) lineáris kombinációja

c) szorzata

hermitikus-e.

9.20.
Adott az $y = 3x$ egyenes a síkban. Írjuk fel azt a projekciós operátort, amelyik erre az egyenesre vetít! Keressük meg a $\mathbf{v} = (1{,}1)$ vektornak az egyenesre eső vetületét!

9.21.
Igazoljuk, hogy ha $\hat{P}$ tetszőleges projektor, akkor az $(1+\hat{P})$ operátor invertálható, és az inverz $1-\frac{1}{2}\hat{P}$.

9.22.
Adott egy n dimenziós tér ortonormált bázisa, $|1\rangle, |2\rangle, \ldots, |n\rangle$. A $\hat{P} = |k\rangle\langle k|$ operátor a k-adik bázisvektorra vetítő projektor.

a) Mik lehetnek a $\hat{T} = \hat{I} - 2\hat{P}$ tükröző operátor sajátértékei? ($\hat{I}$ az egységoperátor)

b) Mivel egyenlő a $(\hat{T})^2$ operátor?

9.23.
Mutassuk meg, hogy ha $(\hat{T})^2 = \hat{I}$ ($\hat{T}$ tükröző operátor), akkor $\hat{P} = \frac{1}{2}(\hat{I} + \hat{T})$ projektor. Hogyan fest a $\hat{P}$-re ortogonális $\hat{Q} = \hat{I} - \hat{P}$ projektor? ($\hat{I}$ az egységoperátor)

9.24. (*)
Mutassuk meg, hogy ha $\hat{P}$ projektor, akkor
$\exp \hat{P} = \hat{I} + (e-1)\hat{P}$!

9.25.
Egy kétdimenziós tér két ortonormált bázisvektora $|u\rangle$ és $|v\rangle$. Adjuk meg a $\hat{Q} = |u\rangle\langle v|$ operátor spúrját!

9.26. (**)
Legyen $|\alpha\rangle$ és $|\beta\rangle$ két normált, egymásra merőleges vektor. Tekintsük az

$$\hat{s}_x = \frac{1}{2}\left(\,|\alpha\rangle\langle\beta| + |\beta\rangle\langle\alpha|\,\right)$$

$$\hat{s}_y = \frac{i}{2}\left(\,-|\alpha\rangle\langle\beta| + |\beta\rangle\langle\alpha|\,\right)$$

$$\hat{s}_z = \frac{1}{2}\left(\,|\alpha\rangle\langle\alpha| - |\beta\rangle\langle\beta|\,\right)$$

operátorokat.

a) Építsük fel az $\hat{s}_x$, $\hat{s}_y$, $\hat{s}_z$ operátorok mátrixát az $|\alpha\rangle$, $|\beta\rangle$ bázisán!
(Ezek a Pauli-mátrixok, feles spinű részecskék spin-impulzusmomentumának x, y, z koordinátájához rendelhetők.)

b) Mutassuk meg, hogy $[\hat{s}_x, \hat{s}_y] = i\hat{s}_z$, $[\hat{s}_y, \hat{s}_z] = i\hat{s}_x$ és $[\hat{s}_z, \hat{s}_x] = i\hat{s}_y$!

c) Ellenőrizzük, hogy az operátorok mátrixai is kielégítik az előző pontban szereplő kommutációs szabályokat!

d) Szerkesszük meg az ún. léptető operátorokat (vagy azok mátrix reprezentációját), amelyek az alábbiak szerint hatnak:

$$\hat{s}_+|\beta\rangle = |\alpha\rangle \quad \text{és} \quad \hat{s}_+|\alpha\rangle = 0$$

$$\hat{s}_-|\alpha\rangle = |\beta\rangle \quad \text{és} \quad \hat{s}_-|\beta\rangle = 0$$

Hogyan lehet $\hat{s}_x$, $\hat{s}_y$-nal $\hat{s}_+$-t, $\hat{s}_-$-t kifejezni?

9.27.
Mely számok lehetnek a projekciós operátor sajátértékei?

9.28.
Lássuk be, hogy unitér operátor sajátértékei 1 abszolút értékű számok!

9.29. (*)
Lássuk be, hogy ha $\hat{G}$ hermitikus operátor (azaz $\hat{G}^\dagger = \hat{G}$), akkor az

$$\hat{U} = \exp(i\hat{G})$$

operátor unitér!

9.30.
Az alábbiak közül melyik függvény eleme az $L_2[-\infty, \infty]$ térnek?

$$f_1(x) = x^2 - \frac{1}{3}$$

$$f_2(x) = e^{-x}$$

$$f_3(x) = e^{-x^2/2}$$

$$f_4(x) = e^{x^2/2}$$

9.31.
Normáljuk le az $y = \sqrt{\cos(x)}$ függvényt a $[-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}]$ intervallumon!

9.32.
Az $L_2[0,1]$ térben adott $f(x) = 2x + 3x^4$ és $g(x) = x^3 - 5x^2$. Számítsuk ki a skalárszorzatukat!

9.33.
Milyen messze van egymástól a **9.32.** példában szereplő két függvény?

9.34.
Adott a következő függvényrendszer az $L_2[0, +\infty]$ térben:

$$f_1 = e^{-x^2} \qquad f_2 = xe^{-x^2} \qquad f_3 = x^2 e^{-x^2}$$

a.) normáljuk és ortogonalizáljuk őket;

b.) az a.) pontban nyert ortogonális bázisban fejtsük sorba az $f(x) = e^{-x}$ függvényt!

9.35.
Az alábbi operátorok közül melyik önadjungált?

$$\hat{D}_1 = \frac{d}{dx}; \qquad \hat{D}_2 = \frac{d^2}{dx^2}$$

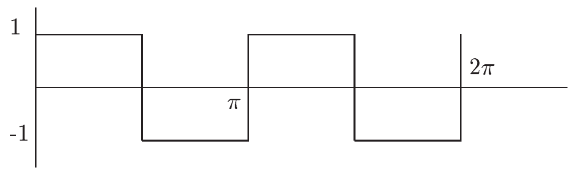
$$\hat{D}_3 = i\frac{d}{dx}; \qquad \hat{D}_4 = i\frac{d^2}{dx^2}$$

9.36.
Határozzuk meg az ábrázolt függvény Fourier-sorfejtésének együtthatóit az $L_2(0, 2\pi)$ tér következő ortonormált bázisán:

$$\phi_1(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}; \qquad \phi_2(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}}\cos x;$$

$$\phi_3(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}}\sin x; \qquad \phi_4(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}}\cos 2x;$$

$$\phi_5(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}}\sin 2x$$



9.37.
Legyen $\Psi(r)$ normált, négyzetesen integrálható

valós függvény, amely r-en kívül még egy R paraméternek is függvénye. Igazoljuk, hogy $\Psi(r)$ ortogonális $\frac{\partial\Psi(r)}{\partial R}$-re!

9.38.
Milyen feltételekkel ortogonális egy négyzetesen integrálható függvény a saját deriváltjára?

10. Differenciálegyenletek

10.1.
Hányadrendű az alábbi differenciálegyenlet?

$$\left[x + \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\right]^2 f(x) = 0$$

Írjuk fel a szokásos alakban!

10.2.
Oldjuk meg az alábbi egyszerű differenciálegyenleteket:

1. $\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x} = c \quad \text{(c=const)}$
2. $\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x} = \cos x$
3. $\frac{\mathrm{d}^2 f}{\mathrm{d}x^2} = c \quad \text{(c=const)}$
4. $\frac{\mathrm{d}^2 f}{\mathrm{d}x^2} = \cos x$

10.3.
Keressük meg az $f'(x) = \frac{1}{x+1}$ differenciálegyenlet azon megoldását, melyre $f(0) = 1$!

10.4.
Oldjuk meg a következő differenciálegyenletet a változók szétválasztásának módszerével:

$$f'(x) + x^2 f(x) + \lambda f(x) = 0$$

10.5.
Megoldandó az $y'y^2 = 1$ differenciálegyenlet.

10.6.
Oldjuk meg az $f'(x) + 2xf(x) = 0$ differenciálegyenletet!

10.7.
Oldjuk meg az alábbi differenciálegyenletet:

$$\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x} - f^2(x) = 0$$

10.8.
Oldjuk meg a

$$\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x} + f^3(x) = 0$$

differenciálegyenletet!

10.9.
Oldjuk meg a következő differenciálegyenletet:

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

10.10.
Oldjuk meg az alábbi differenciálegyenletet:

$$e^{-x} f(x) f'(x) = x$$

10.11.
Oldjuk meg az alábbi $y(x)$ függvényre vonatkozó differenciálegyenletet:

$$y' = x + y$$

Útmutatás: vezessünk be új változót!

10.12.
Keressük meg az

$$y' = \frac{1}{2x - y}$$

differenciálegyenlet azon megoldását, amely áthalad az $x = 2, y = -1$ ponton! Útmutatás: vezessünk be új változót!

10.13. (*)
Oldjuk meg a következő függvényegyütthatós differenciálegyenletet:

$$f'(x) + \frac{1}{x} f(x) = \sin x$$

10.14.
Mutassuk meg, hogy az $y = 2x + Ce^x$ az

$$y' - y = 2(1 - x)$$

differenciálegyenlet általános megoldása, és keressük meg azt a partikuláris megoldást, amely kielégíti az $x = 0, y = 3$ feltételeket!

10.15.
Oldjuk meg a következő differenciálegyenletet:

$$y' - xy = x^3 e^{x^2/2}$$

10.16.
Oldjuk meg az alábbi differenciálegyeneletet!

$$my" = -ky$$

10.17.
100 gramm cukrot vízbe szórunk. Ha az oldódott cukor mennyiségét q-val jelöljük, akkor az oldódás sebessége megadható a következő egyenlettel:

$$\frac{\mathrm{d}q}{\mathrm{d}t} = k(100 - q)$$

Adjuk meg a feloldódott cukor mennyiségének időfüggését!

10.18.
Az etil-acetát elszappanosítási reakciója a következő:
$CH_3COO - C_2H_5 \quad + \quad NaOH \rightarrow$

$CH_3COONa \quad + \quad C_2H_5OH$

Ha az etil-acetát kezdeti koncentrációja a=0.02 súlyszázalék, a nátrium-hidroxid kezdeti koncentrációja b=0.04 súlyszázalék és azt tapasztaljuk, hogy az etil-acetát koncentrációja 25 perc alatt 10% -kal csökken, akkor mennyi idő alatt csökken a koncentráció 15 % -kal?

10.19. (*)
Oldjuk meg a következő differenciálegyenletet a Sommerfeld-féle polinom módszerrel, a következő peremfeltételekkel:

$$f"(x) + Ef(x) - x^2 f(x) = 0$$

$$\lim_{x \to \pm\infty} f(x) = 0$$

10.20. (*)
Oldjuk meg a következő differenciálegyenletet a Sommerfeld-féle polinom módszerrel, az alábbi peremfeltételek mellett:

$$f"(x) + \frac{2}{x} f'(x) + \left(-\frac{1}{4} + \frac{b}{x} - \frac{c}{x^2} \right) f(x) = 0$$

$$f(0) = \lim_{x \to \infty} f(x) = 0$$

10.21.
Legyen

$$2f''(x) - 3f'(x) + 4f(x) = e^{-x}.$$

Milyen egyenletnek tesz eleget $f(x)$ Laplace-transzformáltja, az alábbi kezdeti feltételek mellett:

$$f(0) = 1 \qquad f'(0) = 0$$

10.22. (*)
Megoldandó az alábbi differenciálegyenlet Laplace transzformáció segítségével, az alábbi kezdeti feltételek mellett:

$$\frac{\mathrm{d}^2 f}{\mathrm{d}x^2} + 2a \, \frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x} + b \; f(x) = \delta(x - x_0).$$

$$f(0) = 0 \qquad f'(0) = 0$$

10.23.
Alakítsuk elsőrendű differenciál-egyenletrendszerré az alábbi harmadrendű egyenletet:

$$\frac{\mathrm{d}^3 f}{\mathrm{d}x^3} + 5 \frac{\mathrm{d}^2 f}{\mathrm{d}x^2} - 4f(x) = 0$$

10.24.
Oldjuk meg az

$$\frac{\partial^2 f(x,y)}{\partial x \partial y} = 1$$

parciális differenciálegyenletet az $f(0,y) = 1$ és $f(x,0) = x^2 + 1$ kezdeti feltételekkel!

10.25.
Szeparáljuk az alábbi parciális differenciálegyenletet:

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + x^2 \frac{\partial f}{\partial x} + \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} = 0$$

10.26.
A változók szeparálásával adjuk meg az időfüggő Schrödinger egyenlet

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(r,t)}{\partial t} = \hat{H}(r)\Psi(r,t)$$

egy partikuláris megoldását. Az egyenletben $\hbar$ konstans, r a térbeli, t pedig az időbeli koordinátát jelöli. A térfüggő egyenletet természetesen nem kell megoldani!

10.27.
A hidrogénatom elektronjának hullámfüggvényét az alábbi Schrödinger egyenletet határozzuk meg:

$$\left[-\frac{1}{2}\Delta + \frac{1}{r}\right]\Psi(r,\theta,\phi) = E\Psi(r,\theta,\phi)$$

A Δ operátor polárkoordinátás alakját felhasználva szeparáljuk ezt a differenciálegyenletet az r, θ, ϕ koordinátákban! Hogyan lehet az r-re vonatkozó egyenletet megoldani?

11. Ortogonális polinomok, speciális függvények

11.1.
Igazoljuk, hogy a $P_2 = x^2 - \frac{1}{3}$ polinom kielégíti az

$$(1-x^2){P_n}'' - 2x{P_n}' + n(n+1)P_n$$

Legendre-egyenletet!

11.2.
Tekintsük a [0,∞] intervallumon értelmezett függvények terét az

$$< f_a | f_b >= \int_0^\infty e^{-x} f_a(x) f_b(x)\, \mathrm{d}x$$

skalárszorzattal. Ortogonalizáljuk a következő normált függvényeket a Schmidt-féle eljárással!

$$f_1 = 1 \qquad f_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}x$$

11.3.
Legyen a skalárszorzat
$\langle f|g\rangle = \int\limits_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} f^*(x) g(x)\, \mathrm{d}x.$
Ortogonalizáljuk az $f_1 = 1$, $f_2 = x$, $f_3 = x^2$ függvényeket!

11.4.

a.) Mutassuk meg, hogy az előző feladatban kapott ortogonális polinomok kielégítik a

$$H''_j(x) - 2xH'_j(x) + cH_j(x) = 0$$

Hermite egyenletet.

b.) **(**)** Oldjuk meg ezt az egyenletet a polinom-módszerrel, és mutassuk meg, hogy a polinom akkor véges, ha c=2n (páros szám)!

11.5. (**)
Vizsgáljuk meg az

$$Y_{lm}(\theta,\varphi) = \mathcal{N}_{lm} P_{l|m|}(\cos\theta) e^{im\varphi}$$

gömbfüggvények

$$\langle Y_{lm} | Y_{l'm'} \rangle \sim \delta_{ll'}\delta_{mm'}$$

ortogonalitási relációinak teljesülését! Itt P_{lm} az asszociált Legendre polinom:

$$P_{lm}(\cos\theta) = (1-\cos^2\theta)^{\frac{m}{2}} \frac{d^m P_l(\cos\theta)}{d\cos\theta^m}$$

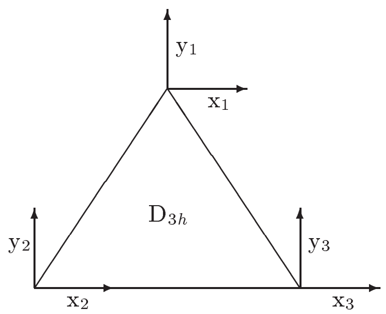
12. Csoportelmélet

12.1.
Csoportot alkot–e az 1 és a -1 szám, ha a csoport szorzás művelete a közönséges szorzásként definiált?

12.2.
Igazoljuk, hogy az $\hat{E}$ és a $\hat{\sigma_h}$ szimmetria operátorok csoportot alkotnak!

12.3.
A szimmetriájuk szerint melyik pontcsoportba tartoznak a következő molekulák:
a) piridin; b) PCl_3; c) 1,1-difluoretilén; d) sósav; e) ciklobutadién I (feltételezett négyzetes gyűrű); f) ciklobutadién II (ma általánosan elfogadott, téglalap alakú gyűrű); g) nyitott etán h) fedő etán; i) benzol; j) naftalin; k) sík etilén; l) 90^o csavart etilén; m) buckminsterfullerén, C_{60}; n) monoklór–metán; o) diklór–metán; p) 1,2,4,5-tetrafluor-benzol; q) ciklobután; r) diborán; s)$B(OH)_3$

12.4.
Tekintsünk egy szabályos háromszöget alkotó hipotetikus A_3 molekulát, s ennek atomjain vegyünk fel x,y,z irányú elmozdulás-egységvektorokat az ábra szerint (a z vektorok a síkra merőlegesek):



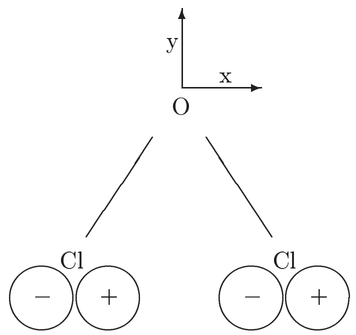
a.) Adjuk meg a molekula-pontcsoport ezen 9 vektor által generált reprezentációjának felbontását irreducibilis reprezentációkra!

b.) Mely irreducibilis reprezentációkhoz sorolhatók ezen A_3 molekula rezgései (precízebben normálrezgései)?

12.5.
A klórmonoxid molekula klóratomjain helyezzünk el egy-egy ekvivalens p_x függvényt az ábra szerint.

a.) Határozzuk meg ezen két függvény által generált reprezentáció felbontását irreducibilis reprezentációkra!

b.) Projekciós operátort segítségével, képezzük a két függvény azon lineárkombinációit, melyek az a.) pontban kapott irreducibilis reprezentációknak képezik bázisát!



12.6.
Végezzük el a sík etilén molekula rezgési analízisét abban a bázisban, amelynek vektorai a szénatomokból indulnak a szomszédos atomok felé! Hogy festenek a szimmetrizált bázisvektorok?

12.7. (*)
A transz-difluor-diazin molekula atomjain helyezzünk el a molekula síkjára merőlegesen egy–egy p függvényt, legyenek ezek $p_N, p_{N'}, p_F, p_{F'}$!

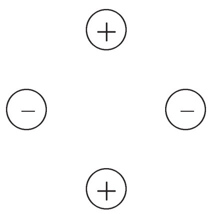
a.) Határozzuk meg a fenti négy függvény által definiált reprezentáció felbontását irreducibilis reprezentációkra!

b.) Határozzuk meg az irreducibilis reprezentációk számára bázist képező szimmetriapályákat!

12.8.
Határozzuk meg, hogy a PCl_3 molekula (C_{3v} pontcsoport) egyes rezgési módusai mely irreducibilis reprezentációknak felelnek meg!

12.9.
Helyezzünk el a PCl_3 molekula klór atomjain egy-egy alkalmasan megválasztott p–függvényt (a szokásos p_x, p_y, p_z függvények megfelelő lineárkombinálásával), és képezzünk belőlük egy A_2 szimmetriájú kombinációt!

12.10.
Tekintsük a ciklobután molekulának csak a szénvázát, ami sematikusan a következő:



a) Ez az egyszerűsített molekula a D_{2d} pontcsoportba tartozik. Rajzon, vagy írásban mutassuk be, hogy a D_{2d} csoport szimmetriaelemei (valamennyi típus, lásd karaktertábla) valóban megvannak!

b) Helyezzünk el az atomokon egy-egy s függvényt! Redukáljuk az ezek által képezett reprezentációt irreducibilis reprezentációkra!

c) Határozzuk meg, hogyan oszlanak el a négy atom belső (rezgési) szabadsági fokai az irreducibilis reprezentációk között!

12.11. (*)
Igazoljuk, hogy egy véges csoport tetszőleges A elemének A^n hatványai maguk is egy csoportot (részcsoport) alkotnak!

12.12.
Legyen a z-irány a trigonális planáris BF_3 molekula síkjára merőleges!

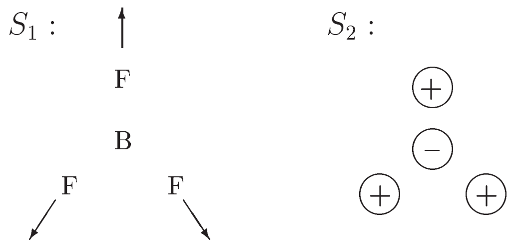
a) Melyik pontcsoportba tartozik ez a molekula?

b) Állapítsuk meg (egyszerűen kiolvasva a karaktertáblából), hogy a B atomon elhelyezett p_x, p_y, p_z függvények képezte 3 dimenziós reprezentáció milyen irreducibilis reprezentációkra bontható!

c) A F atomokon egy-egy s függvényt elhelyezve hogyan redukálódik ez a 3 dimenziós tér?

d) Helyezzünk el a F atomokon egy-egy p_z függvényt, jelöljük ezeket p_1, p_2, p_3-mal, és képezzük a $q = \frac{1}{\sqrt{3}}(p_1 + p_2 + p_3)$ kombinációt! Irreducibilis reprezentáció bázisfüggvénye-e q, és ha igen, melyiké?

e) Tekintsük az atomok következő két elmozdulását!



Melyik irreducibilis reprezentációhoz tartozik S_1 és S_2?

f) Milyen irreducibilis reprezentációkra bonthatók a molekula rezgései? (Helyezzünk el x_i, y_i, z_i elmozdulás-koordinátákat az atomokon, határozzuk meg a 12 dimenziós reprezentáció felbontását, majd vonjuk le a molekula egészének transzlációját és rotációját!)

12.13.
Az etilén molekula szimmetriája D_{2h}. (A z tengelyt vegyük a síkra merőlegesnek!)

a) Végezzük el azon 4 elmozdulás-koordináta által definiált reprezentáció felbontását, amelyek a C—H kötésirányokba mutatnak! (r_1, r_2, r_3, r_4)

b) Határozzuk meg r_1, r_2, r_3, r_4-ből a szimmetrizált koordinátákat!

c) Helyezzünk el a H atomokon egy-egy s függvényt, s_1, s_2, s_3, s_4-et! Mi lesz az ezek által definiált reprezentáció felbontása? Melyek lesznek a belőlük képezhető szimmetriafüggvények?

d) Egy-egy p_z függvényt elhelyezve a H atomokon, állapítsuk meg az $\frac{1}{2}(p_1 + p_2 + p_3 + p_4)$ függvény szimmetriáját!

12.14. (*)
Legyenek egy csoportreprezentáció karakterei valós számok! Bizonyítsuk be, hogy a reprezentáció önmagával képzett direkt szorzata tartalmazza a teljesen szimmetrikus reprezentációt!

Útmutatás: Írjuk fel a képletet arra vonatkozóan, hogy hányszor van meg a direkt-szorzat reprezentációban a teljesen szimmetrikus reprezentáció, majd bizonyítsuk be, hogy az nem lehet zérus!

12.15.
Tekintsük a C_{4v} pontcsoport esetén azt a Γ_v három dimenziós reprezentációt, amelynek a valós $\mathbf{R}^3$ térbeli $\underline{e}_1, \underline{e}_2, \underline{e}_3$ ortonormált elemek képezik bázisát! („vektor-reprezentáció")!

a) Bontsuk fel Γ_v-t irreducibilis összetevőire!

b) Határozzuk meg a $\Gamma_v \bigotimes E$ direkt szorzat reprezentáció karaktereit és felbontását irreducibilis reprezentációkra!

12.16.
A $TeCl_5^-$ ion szimmetriája C_{4v}. A molekula atomjainak az egyensúlytól való elmozdításai a C_{4v} csoport egy 18 dimenziós reprezentációját adják. Állapítsuk meg ennek karaktereit és bontsuk fel a reprezentációt irreducibilis összetevőkre! Hány paraméter kell a molekula egyensúlyi geometriájának meghatározására (adott szimmetria esetén)?

12.17.
Tekintsük a **12.7.** feladatban szereplő transz-difluor-diazin molekulát (C_{2h} szimmetria)!

a.) Állapítsuk meg, hogy a molekulának az egyensúlyi helyzethez képest vett elmozdulásai, amelyek egy 12 dimenziós vektorba foglalhatók, milyen irreducibilis reprezentációkra bonthatók! Állapítsuk meg, hogy melyik reprezentációhoz hány szabadsági fok (rezgés) tartozik! Hány paraméter szükséges az egyensúlyi geometria jellemzéséhez?
b.) Van-e a molekulának állandó dipólusnyomatéka, és ha igen, milyen irányú?

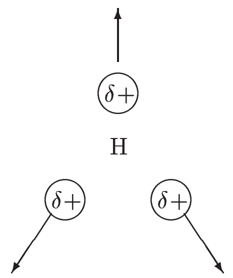
12.18.
Egy A_6 összetételű molekulát az $\hat{\imath}$ és a $\hat{C}_3$ operátorok önmagára képeznek le. Milyen ennek a molekulának a szerkezete? (Rajz és leírás.)

12.19. (*)
Mi az $\hat{S}_4$ z-tengely körüli 90^o-os forgatás-tükrözés operátor hatása az $\dfrac{yz}{x}$ függvényre?

12.20.
Bizonyítsuk be, hogy egy Abel-csoport bármelyik irreducibilis reprezentációjának bármely operátorra vonatkoztatott karaktere csakis olyan komplex szám lehet, amelynek abszolút értéke 1!

12.21. (*)
Tekintsük a $\varphi_1 = x^2 - y^2$ és $\varphi_2 = 2xy$ függvényeket! Állapítsuk meg, hogy ezek bázisát képezik-e a z-tengely körüli tetszésszerinti szögű forgatások csoportjának! Határozzuk meg az α szögű forgatáshoz tartozó mátrixot ezen a bázison!

12.22. (**)
Ismeretes, hogy egy magárahagyott H atom $n = 2$ főkvantumszámhoz tartozó állapotai degeneráltak. Egyedül a szimmetriára vonatkozó megfontolások segítségével állapítsuk meg, hogy hány különböző energiaszint alakul ki, ha ezt a gerjesztett H–atomot az ábra szerinti elektromos tér (pl. ligandumok tere) veszi körül:



12.23.
A BF_3 molekula B atomján helyezzük el a $(2p_x, 2p_y)$ és a $(3p_x, 3p_y)$ függvény párt! Állapítsuk meg, hogy milyen reprezentációt generál a következő négy függvény tere!

$$\begin{aligned} f_1 &= 2p_x 3p_x \\ f_2 &= 2p_x 3p_y \\ f_3 &= 2p_y 3p_x \\ f_4 &= 2p_y 3p_y \end{aligned}$$

13. Kvantummechanikai alkalmazások

13.1.
Határozzuk meg a ϕ polárkoordinátához (mint helykoordinátához) tartozó operátor és az impulzusmomentum (térbeli polárkoordinátákban kifejezett) z komponenséhez tartozó operátor kommutátorát!

13.2.
Definiáljuk $l_\alpha = (cos\alpha)l_z + (sin\alpha)l_x$ alakban az impulzusmomentumnak a z tengellyel az xz síkban α szöget bezáró irányra való vetületét. Határozzuk meg az $[\hat{l}_z\ ,\ \hat{l}_\alpha]$ kommutátort! Milyen α értékeknél lesz a kommutátor zérus?

13.3.
Határozzuk meg a $\hat{p}_x$ (x-irányú impulzus) és az $\hat{x}^2$ operátorok kommutátorát, azaz a $\hat{p}_x\hat{x}^2 - \hat{x}^2\hat{p}_x$ operátort! Önadjungált−e ez az operátor?

13.4.
Határozzuk meg az $[\hat{l}_z\ ,\ \hat{x}]$ kommutátort! Lehet-e egyszerre „élesen" meghatározott értéke l_z impulzusmomentum-komponensnek és $x-$nek?

13.5.
Igazoljuk, hogy a $\hat{T}$ kinetikus energia−operátor pozitív szemidefinit! (Az egyszerűség kedvéért $L_2[a,b]$ térben dolgozzunk!)

13.6.
Kommutál−e a kinetikus és a potenciális energia operátora ?

13.7.
Számítsuk ki az impulzusmomentum operátor x és z komponensének kommutátorát!

13.8. (**)
A Heisenberg-féle határozatlansági relációk segítségével számítsuk ki hozzávetőlegesen a hidrogénatom alapállapotának energiáját!

13.9. (*)
A Franck–Hertz kísérletben a hidrogénatomokat elektronnyaláb segítségével juttatjuk első gerjesztett állapotba. A gerjesztő elektronok energiáiban fellépő fluktuáció $E \approx 10^{-6}$ eV (azaz $E \approx 1.602 * 10^{-25}$ J) nagyságrendű. Számítsuk ki a gerjesztett állapot átlagos élettartamát!

13.10.
Mozogjon egy m tömegű részecske az x-tengely mentén $V(x) = \frac{1}{2}kx^2$ potenciáltérben! (Harmonikus lineáris oszcillátor modell.) Igazoljuk, hogy a rendszer $\hat{H}$ Hamilton- operátorának a $\Psi_0(x) = e^{-\frac{1}{2}\gamma x^2}$ függvény (nem normált) sajátfüggvénye, ha $\gamma = \frac{\sqrt{km}}{\hbar}$, és az energia−sajátérték $E_0 = \frac{1}{2}h\nu$ ahol $\nu = \frac{1}{2\pi}\sqrt{\frac{k}{m}}$!

13.11.
Ismert az x-tengely mentén $[-\infty\ ,\ \infty]$ intervallumban $V(x) = \frac{1}{2}kx^2$ potenciál hatásának alávetve mozgó m tömegű részecske (harmonikus lineáris oszcillátor) alapállapotú normált hullámfüggvénye és energiája:

$$\Psi_0(x) = (\frac{\gamma}{\pi})^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{1}{2}\gamma x^2} \qquad E_0 = \frac{1}{2}h\nu\ ,$$

ahol

$$\gamma = \frac{\sqrt{km}}{\hbar} \qquad \nu = \frac{1}{2\pi}\sqrt{\frac{k}{m}}\ .$$

a). Határozzuk meg a kinetikus energia várható értékét, és mutassuk meg, hogy ez E_0 fele!

b). **(*)** Számítsuk ki az alapállapot energiájának közelítő értékét a perturbációszámítás első rendjében arra az esetre, ha a potenciál $V(x) = \frac{1}{2}kx^2 + bx^6$! (A megoldást elegendő $b-$vel és $\gamma-$val kifejezni!)

13.12.
Adjon a variációs elv alapján felső korlátot a $V(x) = kx^2$ potenciál hatása alatt mozgó m tömeg részecske alapállapotú energiájára, a következő útmutatás segítségével:

a). Induljunk ki a következő függvényből:

$$f(x) = \begin{cases} \cos\frac{\pi}{2a}x\ , & \text{ha } |x| < a \\ 0\ , & \text{ha } |x| \geq a \end{cases}$$

Normáljuk e függvényt, majd használjuk próbafüggvényként a kérdezett szélsőérték számításnál! Az a itt egyelőre konstans paraméter.

b). Keressük meg a azon értékét, amellyel a felső korlát a lehető legszigorúbb (legmélyebb)!

c). **(*)** Milyen meggondolásból választottuk éppen a fenti próbafüggvényt (vagyis mi a felhasznált fizikai modell) ?

13.13.
Mozogjon egy m tömegű részecske az x-tengely mentén, és legyen a rá ható erő $F = -ax + bx^2$! Irjuk fel e mozgás Hamilton operátorának sajátértékegyenletét !

13.14.
Legyen egy egydimenziós mozgást végző részecske hullámfüggvénye :

$$\Psi(x) = Ne^{-\frac{1}{2}\gamma x^2}$$

(γ pozitív állandó) .

a). Határozzuk meg az N normálási tényező értékét!

b). Határozzuk meg x várható értékét!

13.15.
Tekintsünk egy egydimenziós mozgást az x tengely mentén! Határozzuk meg az impulzusoperátor $p_{1,1}$ és $p_{2,1}$ mátrixelemét a következő két bázisfüggvényre:

$$\phi_1(x) = N_1 e^{-\frac{1}{2}\gamma x^2} \qquad \phi_2(x) = N_2 x e^{-\frac{1}{2}\gamma x^2}$$

ahol N_1 és N_2 normálási tényezők, γ pedig konstans paraméter. A legegyszerűbb megoldáshoz használjuk ki azt a tényt, hogy a fenti függvények az $L_2[\infty, -\infty]$ tér egy ortonormált bázisának elemei közül valók!

13.16.
Mozogjon egy m tömegű részecske a q koordináta mentén, és legyen a potenciál [1] :

$$V(q) = D(1 - e^{-\beta q})^2 \ .$$

[1] Kétatomos molekulák rezgései tárgyalhatók a fenti potenciállal; ez jobb közelítés, mint a parabolikus potenciál.

a.) Írjuk fel a részecskére ható erőt!

b.) Mi a D és a β paraméterek szemléletes jelentése?

c.) Írjuk fel a mozgás Schrödinger−egyenletét!

13.17.
Egy m tömegű részecske mozogjon egy dimenzióban, a $V(x) = \frac{1}{2}Fx^2$ harmonikus potenciál hatása alatt! Keressük az alapállapot hulámfüggvényét $\phi(x) = e^{-\alpha x^2}$ alakban! Optimáljuk α-t a variációs elv segítségével! (Figyelem : a próbafüggvény nem normált!)

13.18.
Adjunk felső korlátot a $V(x)$ potenciáltérben mozgó m tömegű részecske alapállapotú energiájára!

$$V(x) = \begin{cases} cx \ , & \text{ha } |x| \le a \\ \infty \ , & \text{ha } |x| > a \end{cases}$$

(c konstans) Útmutatás: használjuk a variációs tételt és a potenciálgödör hullámfüggvényét!

13.19.
Hasonlítsuk össze a két normált hullámfüggvényt, amelyek egydimenziós mozgáshoz tartoznak :

$$\Psi_1(x) = \begin{cases} \cos\frac{\pi x}{2} \ , & \text{ha } |x| \le 1 \\ 0 \ , & \text{ha } |x| > 1 \end{cases}$$

$$\Psi_2(x) = \begin{cases} 2\cos(2\pi x) \ , & \text{ha } |x| \le \frac{1}{4} \\ 0 \ , & \text{ha } |x| > \frac{1}{4} \end{cases}$$

Melyikhez tartozik a nagyobb kinetikus energia?

13.20.
Egy pontszerű, m tömegű test mozog a $V(x) = e^{-x^2}$ potenciálban. Írjuk fel a rendszer Hamilton operátorát és a Schrödinger egyenletet!

13.21.
Legyen egy rendszer hullámfüggvényének a ϕ polárkoordinátától függő része $\Psi(\phi) = \frac{1}{\sqrt{6\pi}}(2 \ \ cos(2\phi) + 1)$. Mi lesz az impulzusmomentum z komponensének várható értéke ebben

az állapotban? Mi annak a valószínűsége, hogy l_z mérésekor rendre $-2\hbar$, $-\hbar$, 0, $\hbar$, $2\hbar$ lesz az eredmény?

13.22.
Ellenőrizzük integrálással, hogy a H-atom $1s$ függvénye normált!

13.23.
Ellenőrizzük integrálással, hogy a H-atom $1s$ és $2s$ függvényei egymásra ortogonálisak!

13.24.
Határozzuk meg a potenciális energia várható értékét a H$-$atom $2p_0$ állapotában! Hasonlítsuk össze a nyert erdményt a teljes energia ugyanezen állapotra vonatkoztatott értékével, illetve a kinetikus energia megfelelő értékével! $(E = < T > + < V >)$ [2].

13.25.
Számítsuk ki az elektron átlagos távolságát a magtól a H-atom $2p_0$ állapotában!

13.26.
A H-atom egy tetszőleges Ψ_{nlm} állapotában a magtól való távolság várható értéke

$$< r > = \frac{a_0}{2}[3n^2 - l(l+1)] \, ,$$

ahol a_0 a Bohr$-$rádiusz. Számítsuk ki az $< r >$ várható értéket a hidrogénatom $100s$ állapotában! (Megjegyzés: egy baktérium átlagos mérete $0.001 - 0.010$ mm.)

13.27. (*)
Mekkora az energia, az impulzusmomentum és a mágneses momentum abszolut értéke, valamint az utóbbi két mennyiség z-komponenseinek értéke a H-atom $3p_{+1}$ állapotában? (Az atomi egységeket is adjuk meg!)

13.28.
Analizáljuk a H-atom $2s$ pályáját!

a). Határozzuk meg a csomógömb sugarát!

b). Mi a jelentése a $|\Psi|^2 4\pi r^2$ függvénynek, és hol van ennek a szélsőértéke? (Elegendő az egyenletet felírni, megoldani nem kell!)

13.29. (*)
Tekintsünk egy hidrogénatomot a

$$\Psi(r, \theta, \phi) = \frac{\sqrt{2}}{81\sqrt{\pi}} r^2 e^{-\frac{r}{3}} \sin\theta \cos\theta \cos\phi$$

állapotfüggvénnyel leírt állapotban!

a). Melyik két $d-$függvénynek, milyen lineáris kombinációja ez?

b). Az impulzusmomentum *egyik* komponensének mérése milyen lehetséges értékeket, milyen valószínűséggel eredményez?

13.30.
Ortogonális-e egymásra a H-atom $2p_x$ és $2p_y$ pályája? (A bizonyítás során ne végezzünk integrálást explicite!)

13.31. (*)
Keressük a hidrogénatom alapállapotú hullámfüggvényét $e^{-\alpha r}$ alakban! Optimáljuk α paraméter értékét a variációs elvnek megfelelően!

13.32.
Mi annak a valószínűsége, hogy a $H-$atom $1s$ állapotában az elektront $1a_0$ sugarú gömbön belül találjuk?

13.33.
A hidrogénatom 2s állapotának (normálatlan) hullámfüggvénye:

$$\Psi_{2s} = (2 - r)e^{-r/2}$$

Számítsuk ki a gradiensét !

13.34.
Normáljuk le az előző példában szereplő

---

[2] A nyert eredmények az ún. viriál$-$tétel megfogalmazásai a $V(r) = konst. * r^{-1}$ alakú potenciálfüggvénnyel rendelkező rendszerek esetére.

hullámfüggvényt az $L_2[-\infty, +\infty]$ (3 dimenziós) téren ! Mennyi a valószínűsége annak, hogy az elektron a mag köré vont r=1.0 sugarú gömbön belül tartózkodik?

13.35. (*)

Határozzuk meg egy hipotetikus $V(r) = -\frac{1}{r} + a\frac{1}{r^2}$ potenciáltérben mozgó elektron alapállapotú energiáját a perturbációszámítás első rendjében! (Próbáljuk megítélni az eredmény megbízhatóságát $a = 0,001$ és $a = 1$ esetén!)

II. MEGOLDÁSOK

1. Bevezető számolási gyakorlatok

M 1.1.

1. $\frac{1}{2\kappa}\left(\kappa\sum\limits_{k=1}^{n}1+\sum\limits_{k=1}^{n}\lambda_k\right)=$
$=\frac{1}{2\kappa}\left(\kappa n+\sum\limits_{k=1}^{n}\lambda_k\right)=\frac{n}{2}+\frac{1}{2\kappa}\sum\limits_{k=1}^{n}\lambda_k$
2. $\sum\limits_{k=0}^{n-1}a_k$
3. i_1-i_{n+1}

M 1.2.
Nem. $AB=\left(\sum_i a_i\right)\left(\sum_j b_j\right)=\sum_{i,j}a_ib_j$
Egyszerű dolog, mégis gyakori hiba.

M 1.3.

1. Nem.
2. Nem.
3. Igen.
4. Igen.
5. Igen.
6. Cseréljük az 'i' indexet 'j'-re, az 'l'-et 'k'-ra.
$\sum\limits_{k,j=1}^{N}w_kL_{kj}v_j-\sum\limits_{k,j=1}^{N}L_{kj}w_kv_j=$
$=\sum\limits_{k,j=1}^{N}w_kL_{kj}\left(v_j-v_j\right)=0$
7. $C=\mathbf{wLv}-\mathbf{wLv}$

M 1.4.

1. δ_{ij}
2. $\sum\limits_{k=1}^{3}\delta_{kk}=3$
3. $\sum\limits_{k=1}^{3}3=9$

2. Határérték; a rend fogalma

M 2.1.

1. 1
2. 0
3. 1
4. nincs határértéke
5. $\frac{5}{7}$
6. $\frac{1}{n^k}\,\frac{n!}{k!\,(n-k)!}=$
$=\frac{1}{n^k}\,\frac{n(n-1)\dots(n-k+1)(n-k)!}{(n-k)!\,k!}=$
$=\frac{n(n-1)\dots(n-k+1)}{n^k}\,\frac{1}{k!}\stackrel{n\to\infty}{\longrightarrow}\frac{1}{k!}$

M 2.2.
$b^2\,\varepsilon^2+(2ab+b^2)\,\varepsilon^3+\mathcal{O}(4)$

M 2.3.
$1+2\,\epsilon+3\,\epsilon^2+\mathcal{O}(3)$

M 2.4.
$\cos(x)=1-x^2/2+\mathcal{O}(4)$;
$e^{1-\varepsilon}=ee^{-\varepsilon}=e-e\,\varepsilon+\mathcal{O}(\varepsilon^2)$;
$e^{\cos(x)}=e-e\,x^2/2+\mathcal{O}(4)$

M 2.5.

1. $\frac{(1+\epsilon)^5-1}{(1+\epsilon)^4-1}=\frac{\cancel{1}+5\epsilon+\mathcal{O}(\epsilon^2)-\cancel{1}}{\cancel{1}+4\epsilon+\mathcal{O}(\epsilon^2)-\cancel{1}}\stackrel{\epsilon\to 0}{\longrightarrow}\frac{5}{4}$
2. 0 (a nevező gyorsabban divergál, mint a számláló)
3. nincs határértéke
4. $\frac{\sin(x)}{x}=\frac{x-\mathcal{O}(x^3)}{x}=1-\mathcal{O}(x^2)\stackrel{x\to 0}{\longrightarrow}1$

M 2.6.
$\sin(x)=x-\mathcal{O}(3)$;
$\sqrt{1-\varepsilon}=1-x/2-\mathcal{O}(\varepsilon^2)$;
$\sqrt{1-\sin(\pi/18)}=1-\pi/36+\mathcal{O}(2)$;

ordo 5-ig:

$$\sqrt{1-\sin(x)} = 1 - x/2 - x^2/8 + x^3(1/12 - 1/16) + \\ + x^4(1/24 - 5/128) + \mathcal{O}(5)$$

M 2.7.

$\mathrm{arctg}(2 \cdot 10^{-3}) \simeq 2 \cdot 10^{-3}$;

$\sqrt{1 - 2 \cdot 10^{-3}} \simeq 1 - 2 \cdot 10^{-3}/2$;

$\exp(1 - 10^{-3}) \simeq e - e\,10^{-3}$

3. Egyváltozós differenciálás és integrálás

M 3.1.

$$\frac{d}{\mathrm{d}x}x^3 = \lim_{\Delta x \to 0} \frac{(x+\Delta x)^3 - x^3}{\Delta x}$$

$$\frac{(x+\Delta x)^3 - x^3}{\Delta x} = \frac{\cancel{x}^3 + 3x^2\Delta x + \mathcal{O}((\Delta x)^2) - \cancel{x}^3}{\Delta x} \stackrel{\Delta x \to 0}{\longrightarrow} 3x^2$$

M 3.2.

1. $6(2x+1)^2$

2. $\dfrac{(2x+5)(3x^2-3x) - (6x-3)(x^2+5x)}{(3x^2-3x)^2}$

3. $\dfrac{1}{2}(1+x^{1/2})^{-1/2}\,\dfrac{1}{2}\,x^{-1/2} = \dfrac{1}{4}\dfrac{1}{\sqrt{x(1+\sqrt{x})}}$

4. $24\,x\,e^{4x^2}\left[1 + 2x + 6x^2\right] + 3\,e^{4x^2}\left[12x + 2\right]$

5. $x^x = e^{x\ln(x)}$; $\frac{d(e^{x\ln(x)})}{\mathrm{d}x} = x^x(1 + \ln x)$;
vagy lehet logaritmikus differenciálás segítségével, $f' = f\,(\ln f)'$ alapján

6. $$\frac{df}{\mathrm{d}x} = \lim_{\Delta x \to 0} \frac{f(x+\Delta x) - f(x)}{\Delta x} = \\ = \lim_{\Delta x \to 0} \frac{1}{\Delta x}\left(\int_0^{x+\Delta x} g(y)\,\mathrm{d}y - \int_0^x g(y)\,\mathrm{d}y\right) = \\ = \lim_{\Delta x \to 0} \frac{1}{\Delta x}\int_x^{\Delta x} g(y)\,\mathrm{d}y = \\ = \lim_{\Delta x \to 0} \frac{1}{\Delta x}\left[g(x)\,\Delta x + \mathcal{O}((\Delta x)^2)\right] = g(x)$$

7. $$\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x} = \lim_{\mathrm{d}x \to 0} \frac{1}{\mathrm{d}x}\left[\int_0^{x+\mathrm{d}x} g(x+\mathrm{d}x, y)\,\mathrm{d}y - \\ - \int_0^x g(x,y)\,\mathrm{d}y\right] = \\ = \lim_{\mathrm{d}x \to 0} \frac{1}{\mathrm{d}x}\left[\int_0^x g(x+\mathrm{d}x,y)\,\mathrm{d}y + \\ + \int_x^{x+\mathrm{d}x} g(x+\mathrm{d}x,y)\,\mathrm{d}y - \int_0^x g(x,y)\,\mathrm{d}y\right]$$

Az első két tagban $g(x+\mathrm{d}x, y)$-t Taylor sorba fejtjük x szerint, $\mathcal{O}(2)$:

$$\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x} = \lim_{\mathrm{d}x \to 0} \frac{1}{\mathrm{d}x}\left[\int_0^x g(x,y)\,\mathrm{d}y + \int_0^x \frac{\partial g}{\partial x}\,\mathrm{d}x\,\mathrm{d}y + \\ + \int_x^{x+\mathrm{d}x} g(x,y)\,\mathrm{d}y + \\ + \int_x^{x+\mathrm{d}x} \frac{\partial g}{\partial x}\,\mathrm{d}x\,\mathrm{d}y - \int_0^x g(x,y)\,\mathrm{d}y\right]$$

A jobb oldalon a zárójelben az első tag kiesik az utolsóval. A harmadik és a negyedik tagban az integrál kicsi $\mathrm{d}x$-re írható, mint:

$$\int_x^{x+\mathrm{d}x} g(x,y)\,\mathrm{d}y = g(x, y=x)\,\mathrm{d}x$$

$$\int_x^{x+\mathrm{d}x} \frac{\partial g}{\partial x}\,\mathrm{d}x\,\mathrm{d}y = \frac{\partial g(x,y=x)}{\partial x}\,\mathrm{d}x\,\mathrm{d}x$$

Ezek segítségével kapjuk:

$$\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x} = \lim_{\mathrm{d}x \to 0} \frac{1}{\mathrm{d}x}\left[\mathrm{d}x\int_0^x \frac{\partial g}{\partial x}\,\mathrm{d}y \\ + g(x,y=x)\,\mathrm{d}x + \frac{\partial g(x,y=x)}{\partial x}\,\mathrm{d}x\,\mathrm{d}x\right] = \\ = \lim_{\mathrm{d}x \to 0}\left[g(x,y=x) + \int_0^x \frac{\partial g}{\partial x}\,\mathrm{d}y + \\ + \frac{\partial g(x,y=x)}{\partial x}\,\mathrm{d}x\right] = \\ = g(x,y=x) + \int_0^x \frac{\partial g}{\partial x}\,\mathrm{d}y$$

M 3.3.
$\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}x} = \frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}z}\frac{\mathrm{d}z}{\mathrm{d}x} = 2x\cos(z)$

M 3.4.
$(e^{\sin(x)})'\big|_0 = 1;$
$(e^{\sin(x)})''\big|_0 = 1;$
$(e^{\sin(x)})'''\big|_0 = 0;$
$(e^{\sin(x)})''''\big|_0 = -3;$
$(e^{\sin(x)})'''''\big|_0 = -8$
a Taylor sor ordo 6-ig:
$f(0+\delta) = 1 + \delta + \frac{1}{2}\delta^2 + \frac{(-3)}{4!}\delta^4 + \frac{(-8)}{5!}\delta^5 + \mathcal{O}(6)$

M 3.5.
jelölés: $f_0 = f(x_0, y_0)$;
A példában szereplőfüggvényre igaz, hogy
$\frac{\partial^{n+m} f}{\partial x^n \partial y^m} = f$ bármely n, m term. szám esetén;
$f(x_0+\Delta x, y_0+\Delta y) = f_0 + f_0\Delta x + f_0\Delta y + \frac{1}{2}f_0(\Delta x)^2 + \frac{1}{2}f_0(\Delta y)^2 + f_0\Delta x\Delta y + \dots = \sum_{k,j=0}^{\infty}\frac{1}{k!j!}f_0(\Delta x)^k(\Delta y)^j$

M 3.6.
$f(\delta) = f(0) + f'(0)\delta + \mathcal{O}(\delta^2) = 1 + \delta + \mathcal{O}(\delta^2)$
$\frac{df}{\mathrm{d}x} = \lim_{\delta\to 0}\frac{f(x+\delta)-f(x)}{\delta} = \lim_{\delta\to 0}\frac{f(x)f(\delta)-f(x)}{\delta}$
$\frac{f(x)f(\delta)-f(x)}{\delta} = \frac{f(x)(1+\delta+\mathcal{O}(\delta^2))-f(x)}{\delta} =$
$\frac{f(x)-f(x)\delta+f(x)\mathcal{O}(\delta^2)-f(x)}{\delta} \overset{\delta\to 0}{\longrightarrow} f$

M 3.7.

1. $x + C$
2. $\frac{x^5}{5} + C$
3. $-\frac{1}{x} + C$
4. $6\frac{x^5}{5} - 3\frac{x^3}{3} + \frac{x^2}{2} + 7x + C$
5. az integrandus f'/f alakú, ekkor
   $\int \frac{f'}{f} = ln|f| + C;$
   $\int \mathrm{tg}(x)\,\mathrm{d}x = \int \frac{\sin x}{\cos x}\,\mathrm{d}x = -\int \frac{\cos' x}{\cos x} =$
   $= -\ln|\cos(x)| + C$
6. $\frac{1}{2}\int \frac{2x}{1+x^2}\,\mathrm{d}x$ alakra hozás után az integrandus f'/f alakú,
   tehát a megoldásfüggvény: $\frac{1}{2}\ln(1+x^2) + C$

   Egy másik lehetőség: $x = \mathrm{sh}\, t$ helyettesítéssel.
7. az integrandus f'/f alakú; $\ln(e^x+1) + C$
8. parciális integrálás: $\int u'v + \int uv' = uv$;
   $\int \ln(x)\,\mathrm{d}x = x\ln(x) - \int x\frac{1}{x}\,\mathrm{d}x = x\ln(x) - x + C$
9. $\cos^2(x) = \frac{\cos(2x)+1}{2}$; $t = 2x$ helyettesítéssel;
   $\frac{x}{2} + \frac{1}{4}\sin(2x) + C$
10. $t = 1 - 4x$ helyettesítéssel:
    $\int t^{1/4}\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t}\,\mathrm{d}t = -\frac{1}{4}\int t^{1/4}\,\mathrm{d}t = -\frac{1}{4}\frac{5t^{5/4}}{4} +$
    $+C = -\frac{1}{5}\sqrt[4]{t^5} + C = -\frac{1}{5}\sqrt[4]{(1-4x)^5} + C$
11. parciális integrálás; $xe^x - e^x + C$
12. $t = e^x$ helyettesítéssel; $-\cos(e^x) + C$
13. parciális integrálás kétszer;
    $x^2\sin(x) + 2x\cos(x) - 2\sin(x) + C$
14. $t = e^x$ helyettesítés után parciális integrálás; $-e^x\cos(e^x) + \sin(e^x) + C$

M 3.8.

1. parciális integrálás; $\frac{\pi}{2} - 1$
2. parciális integrálás ötször, vagy tábázatból; $\frac{15}{8}$
3. $2\frac{\Gamma(\frac{2+1}{2})}{4^{3/2}} = \frac{\sqrt{\pi}}{8}$
4. $t = \sqrt{x}$ helyettesítéssel; $\frac{\sqrt{\pi}}{2}$
5. integráltáblázatból: $\pi^2/6$
6. integráltáblázatból: $\pi^2/12$

4. Többváltozós differenciálás

jelölés: $\mathbf{r} = (x, y)$ ill. (x, y, z) értelem szerint, a két ill. három változós esetben
$r = |\mathbf{r}| = \sqrt{x^2 + y^2}$ ill. $\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$ a két ill. három változós esetben
jó tudni: $\partial r / \partial x = x/r$

M 4.1.

1. $\dfrac{\partial f}{\partial x} = \dfrac{r^2 - 2x^2}{r^4}; \qquad \dfrac{\partial f}{\partial y} = -\dfrac{2xy}{r^4}$

2. $\dfrac{\partial f}{\partial x} = -\dfrac{1}{\ln^2(xy^2)} \dfrac{1}{x}; \qquad \dfrac{\partial f}{\partial y} = -\dfrac{1}{\ln^2(xy^2)} \dfrac{2}{y}$

3. $\dfrac{\partial f}{\partial x} = \dfrac{x}{r^2}; \qquad \dfrac{\partial f}{\partial y} = \dfrac{y}{r^2}$

4. $\dfrac{\partial \Psi}{\partial x} = -\dfrac{x}{r} e^{-r}; \quad \dfrac{\partial \Psi}{\partial y} = -\dfrac{y}{r} e^{-r}; \quad \dfrac{\partial \Psi}{\partial z} = -\dfrac{z}{r} e^{-r}$

A 3. és 4. példában szereplő függvény x, y-ban ill. x, y, z-ben szimmetrikus, ezért a különböző változók szerinti deriváltak $x \to y$ stb. helyettesítéssel megkaphatók.

M 4.2.

$$\frac{\partial}{\partial y}\frac{\partial}{\partial x} f = \frac{\partial}{\partial y} 6(2x + y)^2 = 12(2x + y)$$
$$\frac{\partial}{\partial x}\frac{\partial}{\partial y} f = \frac{\partial}{\partial x} 3(2x + y)^2 = 12(2x + y)$$

M 4.3.

jelölés: $\mathbf{r}_0 = (x_0, y_0)$

$$\frac{\partial f}{\partial x} = -\frac{x - x_0}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|^3}$$

$$\mathrm{grad} f = \left(\frac{\partial f}{\partial x}, \frac{\partial f}{\partial y}, \frac{\partial f}{\partial z}\right) =$$
$$= -\frac{(x - x_0, y - y_0, z - z_0)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|^3} = -\frac{\mathbf{r} - \mathbf{r}_0}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|^3}$$

M 4.4.

$$\frac{\partial \Phi}{\partial x} = \cos(r)\frac{x}{r}\ ; \qquad \nabla \Phi = \frac{\cos(r)}{r}\mathbf{r}$$

részletesebben: lásd előző példa

M 4.5.

$\frac{\partial f}{\partial x} = 2xn(r^2)^{n-1}$

$\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} = 4x^2 n(n-1)(r^2)^{n-2} + 2n(r^2)^{n-1}$

$$\begin{aligned} \triangle f &= 4n(n-1)(r^2)^{n-2}(x^2 + y^2 + z^2) \\ &+ 6n(r^2)^{n-1} = (r^2)^{n-1}(4n(n-1) + 6n) \end{aligned}$$

M 4.6.

$$\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}t} = \frac{\partial f}{\partial x}\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t} + \frac{\partial f}{\partial y}\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}t} =$$
$$= (10x + y^2)\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t} + (2xy - 9y^2)\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}t}$$

M 4.7.

$$T = \frac{pV}{Rn}$$
$$\mathrm{dT} = \frac{\partial T}{\partial p}\mathrm{dp} + \frac{\partial T}{\partial V}\mathrm{dV} = \frac{V}{Rn}\Delta\mathrm{p} + \frac{p}{Rn}\Delta\mathrm{V}$$

M 4.8.

$$T = \frac{(p + a/V^2)(V - b)}{R};$$
$$\frac{\partial T}{\partial V} = \frac{1}{R}(p + \frac{a}{V^2} - 2a(V - b)); \qquad \frac{\partial T}{\partial p} = \frac{V - b}{R};$$
$$\mathrm{dT} = \frac{1}{R}(p + \frac{a}{V^2} - 2a(V - b))\mathrm{dV} + \frac{V - b}{R}\mathrm{dp}$$

M 4.9.

$$\mathbf{E} = -\mathrm{grad}\Phi; \qquad \frac{\partial \Phi}{\partial x} = \frac{Zx}{r^3};$$
$$\mathbf{E} = -\frac{Z}{r^3}(x, y, z) = -Z\frac{\mathbf{r}}{r^3};$$
$$|\mathbf{E}| = Z\frac{|\mathbf{r}|}{r^3} = \frac{Z}{r^2}$$

M 4.10.

1. formálisan:
   a $\nabla \times \mathbf{v}$ vektor ,,merőleges" ∇-ra, ezért $\nabla \times \mathbf{v}$ skaláris szorzata ∇-val 0

   precízebben:

jelölés: $\nabla \times \mathbf{v} = w$
$\nabla(\nabla \times \mathbf{v}) = (\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z})(w_x, w_y, w_z) = \frac{\partial w_x}{\partial x} + \frac{\partial w_y}{\partial y} + \frac{\partial w_z}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x}(\frac{\partial v_z}{\partial y} - \frac{\partial v_y}{\partial z}) + \frac{\partial}{\partial y}(\frac{\partial v_x}{\partial z} - \frac{\partial v_z}{\partial x}) + \frac{\partial}{\partial z}(\frac{\partial v_y}{\partial x} - \frac{\partial v_x}{\partial y}) = 0$ (u.i.: Young-tétel)

2. formálisan:
a $\nabla\Phi$ vektor ∇-val „párhuzamos", ezért $\times$ szorzata ∇-val 0

precízebben:
$$[\nabla \times (\nabla\Phi)]_x = \frac{\partial}{\partial x}(\nabla\Phi)_y - \frac{\partial}{\partial y}(\nabla\Phi)_x = = \frac{\partial}{\partial x}\frac{\partial \Phi}{\partial y} - \frac{\partial}{\partial y}\frac{\partial \Phi}{\partial x} = 0$$
Újból a Young-tétel miatt. Teljesen hasonlóan látható, hogy a másik két komponens is 0.

M 4.11.
$\operatorname{div}\mathbf{v} = (\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z})(x,y,z) = \frac{\partial x}{\partial x} + \frac{\partial y}{\partial y} + \frac{\partial z}{\partial z} = 3$

M 4.12.
$$\begin{aligned}\operatorname{div}\mathbf{E} &= (\tfrac{\partial}{\partial x}, \tfrac{\partial}{\partial y}, \tfrac{\partial}{\partial z})(\tfrac{x}{r^3}, \tfrac{y}{r^3}, \tfrac{z}{r^3}) = \\ &= \tfrac{\partial}{\partial x}(x/r^3) + \tfrac{\partial}{\partial y}(y/r^3) + \tfrac{\partial}{\partial z}(z/r^3) = \\ &= \tfrac{r^3-3rx^2}{r^6} + \tfrac{r^3-3ry^2}{r^6} + \tfrac{r^3-3rz^2}{r^6} = \\ &= \left(3r^3 - 3r^3\right)/r^6 = 0\end{aligned}$$
(kivéve $r = 0$)

M 4.13.
jelölések:
$\mathbf{e}_1^x, \mathbf{e}_2^x, \mathbf{e}_3^x$: az eredeti Descartes bázisvektorok
$\mathbf{e}_1^y, \mathbf{e}_2^y, \mathbf{e}_3^y$: az elforgatott bázisvektorok

kapcsolat $\mathbf{e}^x$-ek és $\mathbf{e}^y$-ok között:
$\mathbf{e}_i^y = \sum_j U_{ij}\mathbf{e}_j^x$
$\mathbf{e}_i^x = \sum_j \left(U^{-1}\right)_{ij}\mathbf{e}_j^y = \sum_j \left(U^\dagger\right)_{ij}\mathbf{e}_j^y = \sum_j U_{ji}\mathbf{e}_j^y$
(mivel $\mathbf{U}$ unitér, valós mátrix)

a helyvektor komponensei:
$\mathbf{r} = \sum_j y_j\mathbf{e}_j^y = \sum_i x_i\mathbf{e}_i^x = \sum_{i,j} x_i U_{ji}\mathbf{e}_j^y$
tehát: $y_j = \sum_i U_{ji}x_i$

$\mathbf{v}$ komponensei:
$\mathbf{v} = \sum_i v_i^x\mathbf{e}_i^x = \sum_k v_k^y\mathbf{e}_k^y = \sum_{ik} v_k^y U_{ki}\mathbf{e}_i^x$
tehát: $v_i^x = \sum_k U_{ki}v_k^y$

a divergencia, a két koord. rendszerben számítva:
$(\operatorname{div}\mathbf{v})^x = \sum_i \frac{\partial}{\partial x_i}v_i^x$: az eredetiben
$(\operatorname{div}\mathbf{v})^y = \sum_i \frac{\partial}{\partial y_i}v_i^y$: az elforgatottban

a láncszabály segítségével:
$$(\operatorname{div}\mathbf{v})^x = \sum_i \frac{\partial}{\partial x_i}v_i^x = \sum_{i,j} \frac{\partial}{\partial y_j}\frac{\partial y_j}{\partial x_i}v_i^x$$
kihasználva, hogy $\partial y_j/\partial x_i = U_{ji}$:
$$(\operatorname{div}\mathbf{v})^x = \sum_{i,j} \frac{\partial}{\partial y_j}U_{ji}v_i^x = \sum_{i,j,k} \frac{\partial}{\partial y_j}U_{ji}U_{ki}v_k^y$$
mivel $\sum_i U_{ji}U_{ki} = \delta_{jk}$ (u.i. $\mathbf{U}$ unitér):
$$(\operatorname{div}\mathbf{v})^x = \sum_{j,k} \delta_{jk}\frac{\partial}{\partial y_j}v_k^y = \sum_j \frac{\partial}{\partial y_j}v_j^y = (\operatorname{div}\mathbf{v})^y$$
QED

M 4.14.
Az előző példa jelöléseit használjuk. A Laplace-operátor a két koord. rendszerben:
$$\triangle^x = \sum_i \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} \quad \text{ill.} \quad \triangle^y = \sum_i \frac{\partial^2}{\partial y_i^2}$$
a láncszabály segítségével:
$$\frac{\partial}{\partial x_i} = \sum_j \frac{\partial}{\partial y_j}\frac{\partial y_j}{\partial x_i}$$
ezért:
$$\frac{\partial}{\partial x_i}\frac{\partial}{\partial x_i} = \left(\sum_j \frac{\partial}{\partial y_j}\frac{\partial y_j}{\partial x_i}\right)\left(\sum_k \frac{\partial}{\partial y_k}\frac{\partial y_k}{\partial x_i}\right) = = \sum_{j,k} \frac{\partial}{\partial y_j}\frac{\partial}{\partial y_k}U_{ji}U_{ki}$$
Az utolsó egyenlőségnél kihasználtuk, hogy $\frac{\partial y_j}{\partial x_i} = U_{ji}$. A Laplace operátor:
$$\Delta^x = \sum_{i,j,k} \frac{\partial}{\partial y_j}\frac{\partial}{\partial y_k}U_{ji}U_{ki}$$
Mivel $\mathbf{U}$ unitér, $\sum_i U_{ji}U_{ki} = \delta_{jk}$. Így
$$\Delta^x = \sum_{jk} \delta_{jk}\frac{\partial}{\partial y_j}\frac{\partial}{\partial y_k} = \sum_j \frac{\partial}{\partial y_j}\frac{\partial}{\partial y_j} = \Delta^y$$
QED

M 4.15.
$\operatorname{div}\mathbf{a} = \frac{\partial}{\partial x}(xz)\mathbf{i}^2 + \frac{\partial}{\partial y}(-y^2)\mathbf{j}^2 + \frac{\partial}{\partial z}(2x^2y)\mathbf{k}^2 = z - 2y$

$\Phi\mathbf{a} = x^3yz^4\mathbf{i} - x^2y^3z^3\mathbf{j} + 2x^4y^2z^3\mathbf{k}$

$$\begin{aligned}\operatorname{rot}(\Phi\mathbf{a}) &= (4x^4yz^3 + 3x^2y^3z^2)\mathbf{i} + \\ &+ (4x^3yz^3 - 8x^3y^2z^3)\mathbf{j} + \\ &+ (-2xy^3z^3 + x^3z^4)\mathbf{k}\end{aligned}$$

5. Többváltozós integrálás

M 5.1.
$\int \mathrm{d}y \int x^3 \,\mathrm{d}x + \int\int x^2 y \,\mathrm{d}x\,\mathrm{d}y = y\frac{x^4}{4} + \int \frac{x^3}{3} y \,\mathrm{d}y = \frac{yx^4}{4} + \frac{x^3y^2}{6} + g(x) + h(y)$
$g(x)$ és $h(y)$ tetszőleges függvények

M 5.2.
$l = \int |ds| = \int \sqrt{(\mathrm{d}x)^2 + (\mathrm{d}y)^2} =$
$= \int\limits_1^2 \sqrt{\left(\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}x}\right)^2 + \left(\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}x}\right)^2} \,\mathrm{d}x = \int\limits_1^2 \sqrt{1+(y')^2}\,\mathrm{d}x =$
$= \int\limits_1^2 \sqrt{1+4x^2}\,\mathrm{d}x$
integráltáblázatból:
$l = \left[\frac{x\sqrt{1+4x^2}}{2} + \frac{1}{4}\ln(4\sqrt{1+4x^2}+8x)\right]_1^2 =$
$= \sqrt{1+16} + \frac{1}{4}\ln(4\sqrt{1+16}+16) - \frac{1}{2}\sqrt{1+4} -$
$- \frac{1}{4}\ln(4\sqrt{1+4}+8) = 3{,}16784$

M 5.3.
$l = \int\limits_{-1}^{1} \sqrt{1+\left(\mathrm{ch}'(x)\right)^2}\,\mathrm{d}x,$
részletesebben: lásd előző feladat
$l = \int\limits_{-1}^{1} \sqrt{1+\mathrm{sh}^2(x)}\,\mathrm{d}x = \int\limits_{-1}^{1} \mathrm{ch}(x)\,\mathrm{d}x =$
$= [\mathrm{sh}]_{-1}^{1} = \mathrm{sh}(1) - \mathrm{sh}(-1) = \frac{e-1/e-1/e+e}{2} = e - \frac{1}{e}$

M 5.4.
Praktikus a polár koord. rendszer ϕ szögét használni paraméterként. Ha r a kör sugara, $x = r\cos(\phi)$ és $y = r\sin(\phi)$ a két Descartes koordináta.
A kör kerülete:
$l = \int \sqrt{(\mathrm{d}x)^2+(\mathrm{d}y)^2} = \int\limits_0^{2\pi} \sqrt{\left(\frac{\mathrm{d}x}{d\phi}\right)^2 + \left(\frac{\mathrm{d}y}{d\phi}\right)^2}\,d\phi =$
$= \int\limits_0^{2\pi} \sqrt{\left(-r\sin(\phi)\right)^2 + \left(r\cos(\phi)\right)^2}\,d\phi =$
$= \int\limits_0^{2\pi} \sqrt{r^2}\,d\phi = r\int\limits_0^{2\pi} d\phi = r[\phi]_0^{2\pi} = r2\pi$

M 5.5.
A parabola és az egyenes metszéspontjai: (-1,1) és (2,4). Az integrál:

$$I = \int_{-1}^{2}\left(\int_{x^2}^{x+2}\mathrm{d}y\right)\mathrm{d}x = \int_{-1}^{2}[y]_{x^2}^{x+2}\,\mathrm{d}x =$$
$$= \int_{-1}^{2}(x+2-x^2)\,\mathrm{d}x = \left[\frac{x^2}{2}+2x-\frac{x^3}{3}\right]_{-1}^{2} = 4{,}5$$

M 5.6.
$\int\int_{\mathcal{R}}(x^2+y^2)\,\mathrm{d}x\,\mathrm{d}y = \int\limits_1^2\left(\int\limits_1^{x^2}(x^2+y^2)\,\mathrm{d}y\right)\mathrm{d}x =$
$\int\limits_1^2\left[x^2y+\frac{y^3}{3}\right]_{y=1}^{y=x^2}\mathrm{d}x = \int\limits_1^2\left(x^4+\frac{x^6}{3}-x^2-\frac{1}{3}\right)\mathrm{d}x =$
$\left[\frac{x^5}{5}+\frac{x^7}{21}-\frac{x^3}{3}-\frac{x}{3}\right]_1^2 = \frac{31}{5}+\frac{127}{21}-\frac{8}{3}$

M 5.7.
Descartes koordináták helyett érdemes síkbeli polárkoordinátákat használni. A transzformáció Jacobi-determinánsának abszolút értéke $|J| = r$. Az R sugarú kör területe:

$$T = \int\int_{\text{kör}}\mathrm{d}x\,\mathrm{d}y = \int\limits_0^R r\,dr\int\limits_0^{2\pi}d\phi =$$
$$= \left[\frac{r^2}{2}\right]_0^R[\phi]_0^{2\pi} = \frac{R^2}{\cancel{2}}\cancel{2}\pi$$

M 5.8.
Polárkoordináta rendszer. Az $(x,y,z) \to (r,\theta,\phi)$ 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:
$F = \int_{\text{gömb}}\mathrm{d}\sigma = \int_0^{2\pi}\int_0^{\pi}R^2\sin(\theta)\,d\theta d\phi =$
$= R^2\int_0^{2\pi}d\phi\int_0^{\pi}\sin(\theta)\,d\theta = R^2[\phi]_0^{2\pi}[-cos(\theta)]_0^{\pi} =$
$= R^2 2(2\pi) = 4R^2\pi$
Jó tudni: 4π az ún térszögintegrál, $\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi}\sin(\theta)d\theta d\phi$. Gömbszimmetrikus függvény integrálásakor megjelenik.

M 5.9.
Az előző példához hasonlóan. A különbség, hogy itt a gömb sugara nem rögzített, hanem r szerint is integrálni kell. Az R sugarú gömb térfogata:
$V = \int_0^R\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi}r^2\sin(\theta)\,d\theta\,d\phi\,dr =$
$= \int_0^R r^2\,dr\int_0^{2\pi}d\phi\int_0^{\pi}\sin(\theta)\,d\theta =$
$= \left[\frac{r^3}{3}\right]_0^R 4\pi = \frac{R^3}{3}4\pi$

M 5.10.
Az (x,y) Descartes koordinátákról érdemes új koordinátákra (r,ϕ) áttérni, az

$$x = a\,r\,\cos(\phi), \quad y = b\,r\,\sin(\phi)$$

transzformáció szerint (r és ϕ itt **nem** a síkbeli polárkoordináták). Az ellipszis nagytengelye a , kistengelye b. Könnyen ellenőrizhető, hogy a fenti paraméterezéssel $r = 1$ esetén tetszőleges ϕ-re teljesül az ellipszis egyenlete $(x^2/a^2 + y^2/b^2 = 1)$. Ha $r < 1$, az ellipszis belsejébe eső pontot kapunk. A fenti transzormáció Jacobi-deteminánsának abszolút értéke $|J| = abr$, ez is könnyen megkapható. Az ellipszis területe:

$$\begin{aligned} T &= \int_0^1 \int_0^{2\pi} abr\,d\phi dr = ab \int_0^1 r\,dr \int_0^{2\pi} d\phi = \\ &= ab \left[\frac{r^2}{2}\right]_0^1 2\pi = ab\pi \end{aligned}$$

M 5.11.
A vektortér az egyenes mentén:
$\mathbf{v}(\mathbf{r}) = (x^2,\, -(-2x+2)x) = (x^2,\, 2x^2 - 2x)$

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

a keresett integrál:

$$\begin{aligned} &\int_L (v_x\,\mathrm{d}x + v_y\,\mathrm{d}y) = \int_0^1 v_x\,\mathrm{d}x + \int_0^1 v_y \frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}x}\,\mathrm{d}x = \\ &= \int_0^1 x^2\,\mathrm{d}x + \int_0^1 (2x^2 - 2x)(-2)\,\mathrm{d}x = \\ &= \int_0^1 \left(-3x^2 + 4x\right)\,\mathrm{d}x = \\ &= \left[-x^3 + 2x^2\right]_0^1 = 1 \end{aligned}$$

M 5.12.
az $\mathbf{F}$ vektortér a görbe paraméterével kifejezve:

$$\begin{aligned} \mathbf{F}(\mathbf{r}(\varphi)) &= \frac{\cos(\varphi)}{\cos^2(\varphi)+\sin^2(\varphi)}\mathbf{i} + \frac{\sin(\varphi)}{\cos^2(\varphi)+\sin^2(\varphi)}\mathbf{j} + 0\mathbf{k} = \\ &= \mathbf{i}\cos(\varphi) + \mathbf{j}\sin(\varphi) + \mathbf{k}0 \end{aligned}$$

a görbe deriváltja a paraméter szerint:
$d\mathbf{r}/d\varphi = -\mathbf{i}\sin(\varphi) + \mathbf{j}\cos(\varphi) + \mathbf{k}$

az $\mathbf{F}\,\dfrac{d\mathbf{r}}{d\varphi}$ skaláris szorzat értéke:
$-\cos(\varphi)\sin(\varphi) + \sin(\varphi)\cos(\varphi) + 0 \cdot 1 = 0$

ezért a keresett integrál:

$$\int_L \mathbf{F}d\mathbf{r} = \int_0^{2\pi} \mathbf{F}(\mathbf{r}(\varphi))\frac{d\mathbf{r}}{d\varphi}d\varphi = \int_0^{2\pi} 0 d\varphi = 0$$

M 5.13.
Az első gradiens tétel értelmében
$\int_A^B \mathrm{grad}\Phi(\mathbf{r})\mathrm{d}\mathbf{r} = \Phi(B) - \Phi(A).$
A kérdéses integrál értéke tehát:
$2^3 \cdot 3 \cdot 5^2 - 1^3 \cdot 1 \cdot 1^2 = 599$

6. Szélsőértékszámítás, variációszámítás

M 6.1.
$f' = (2-x)\,xe^{-x}$
Szélsőérték létezésének szükséges feltétele, hogy $f' = 0$. Mivel $e^x \neq 0$, bármely valós x-re, a derivált függvény $x = 0$ és $x = 2$ esetén lehet nulla. Ezekben a pontokban lehet szélsőértéke f-nek.

A feladat nem kérdezi, de lehet ellenőrizni az elégséges feltételt.
$f'' = 2e^{-x} - 2xe^{-x} - f'$
$f''\big|_{x=0} = 2 > 0$, $x = 0$ esetén ezért minimuma van f-nek
$f''\big|_{x=2} = -2e^{-2} < 0$, $x = 2$ esetén ezért maximuma van f-nek

M 6.2.

1. megoldás: behelyettesítéssel
   A mellékfeltételből: $y = 1 - x$.
   Ezt behelyettesítve f-be:
   $f(x) = x^2(1-x)^2$
   $f' = 2x(1-x)\,[(1-x) - x]$
   $f' = 0$, ha
   $x = 0$. Ekkor $y = 1$.
   vagy $x = 1$. Ekkor $y = 0$.
   vagy $x = 1/2$. Ekkor $y = 1/2$.
   Ebben a három pontban lehet szélsőérték.

2. megoldás: multiplikátor módszerrel
   A mellékfeltétel egyenlete, 0-ra rendezve:
   $g(x,y) = x + y - 1 = 0$

   Tekintsük az alábbi függvényt (λ a Lagrange multiplikátor):
   $F(x,y,\lambda) = f(x,y) - \lambda g(x,y)$

   Az F parciális derivált függvényei:
   $\frac{\partial F}{\partial x} = 2xy^2 - \lambda$

$\frac{\partial F}{\partial y} = 2x^2y - \lambda$
$\frac{\partial F}{\partial \lambda} = g(x,y)$

A mellékfeltételes szélsőérték létezésének szükséges feltétele a parciális deriváltak 0 volta. A λ szerinti derivált eltűnése a mellékfeltételt biztosítja, ezzel egyelőre nem foglalkozunk. A másik két deriváltat nullává téve a
$2xy^2 = 2x^2y$
egyenletet kapjuk. Az egyenlet teljesül, ha $x = 0$ vagy $y = 0$ vagy $x = y$. Ezt a három megoldást a mellékfeltételbe visszahelyettesítve:

$$\begin{array}{rl} & x = 0\,,\ \ y = 1 \\ \text{vagy} & x = 1\,,\ \ y = 0 \\ \text{vagy} & x = y = 1/2 \end{array}$$

A Lagrange féle multiplikátor módszer használata ebben a példában nem indokolt, az 1. megoldás egyszerűbb. Vannak esetek azonban, amikor a multiplikátor módszerrel tudunk sokkal könyebben célt érni (lásd pl. **6.5.**, **6.6.**).

M 6.3.

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} = 2\,, \qquad \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} = 2\,, \qquad \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y} = 1$$

A Hess-mátrix: $\mathbf{H} = \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix}$

$\det \mathbf{H} = 4 - 1 = 3 > 0$
A determináns egyenlő a sajátértékek szorzatával. Mivel a determináns pozitív, ebből következik, hogy a Hess-mátrix két sajátértéke azonos előjelű. Ezért létezik szélsőértéke az f-nek.

A feladat nem kérdezi, de lehet ellenőrizni: a két sajátérték $\lambda_1 = 1$ és $\lambda_2 = 3$. Mindkettő pozitív, f-nek tehát minimuma van. A minimum helyét a

$$\left.\begin{array}{l} \partial f/\partial x = 0 \\ \partial f/\partial y = 0 \end{array}\right\}$$

egyenletrendszerből kapjuk: $x = 0$ és $y = 0$.

M 6.4.
Lagrange multiplikátor módszerrel (lásd **6.2.** példa) a multiplikátor értékére $\frac{3\pm\sqrt{2}}{2}$-t kapunk. A négy (x,y) pontpár:
$(x_1,y_1),(x_1,y_2),(x_2,y_1),(x_2,y_2)$, ahol
$y_1 = 1/\sqrt{4+2\sqrt{2}}\,,\ \ y_2 = -1/\sqrt{4-2\sqrt{2}}$
$x_1 = \sqrt{1 - \frac{1}{4+2\sqrt{2}}}\,,\ \ x_2 = -\sqrt{1 - \frac{1}{4-2\sqrt{2}}}$
A függvényértékeket kiszámolva látható, hogy (x_1,y_1) és (x_2,y_2) esetén maximuma, (x_1,y_2) és (x_2,y_1) esetén pedig minimuma van f-nek az adott mellékfeltétel mellett.

A fenti megoldás helyett egyszerűbb, ha a mellékfeltételt, a geometriai jelentést kihasználva, $x = \cos\varphi$, $y = \sin\varphi$ választással teljesítjük (φ a síkbeli polár koord. rendszer második koordinátája).
Így az
$f(\varphi) = \cos\varphi\ \sin\varphi + \cos^2\varphi + 2\sin^2\varphi$
egyváltozós függvény szélsőértékeit keressük. A $df/d\varphi = 0$ feltételből a
$\cos^2\varphi - \sin^2\varphi + 2\cos\varphi\ \sin\varphi = 0$
egyenletet kapjuk. A kétszeres szögek szögfüggvényeit felhasználva $\cos(2\varphi) = -\sin(2\varphi)$ adódik. Ebből $2\varphi = \frac{3}{4}\pi + k\pi$,
$\varphi = \frac{3}{8}\pi + k\frac{\pi}{2}$
A φ szerinti második derivált,
$f'' = 2\,[\cos(2\varphi) - \sin(2\varphi)]$
negatív $\varphi = \frac{3}{8}\pi$ ill. $\varphi = \frac{11}{8}\pi$ esetén, ezért ezekben a pontokban maximuma van f-nek. A $\varphi = \frac{7}{8}\pi$ ill. $\varphi = \frac{15}{8}\pi$ esetben f'' pozitív, ezeken a helyeken minimuma van f-nek.

M 6.5.

Lagrange multiplikátor módszerrel. A mellékfeltétel 0-ra rendezett egyenlete:
$g(x,y,z) = x^2 + y^2 + z^2 - 1 = 0$

A mellékfeltétellel kiegészített függvény:
$F(x,y,z,\lambda) = f(x,y,z) - \lambda g(x,y,z)$
Ennek x,y,z szerinti parciális deriváltjai:

$\partial F/\partial x = 2y - 2\lambda x\,,\ \ \partial F/\partial z = 2y - 2\lambda z$
$\partial F/\partial y = 2x + 2z - 2\lambda y$

A

$$\left.\begin{array}{l} \partial F/\partial x = 0 \\ \partial F/\partial z = 0 \\ \partial F/\partial y = 0 \end{array}\right\}$$

egyenletrendszer megoldásaként kapjuk, hogy $z = x = y/\lambda$ (az első és a második egyenletből), vagy $\lambda = 0$.

Ha $\lambda = 0$, az

$$\left.\begin{array}{l} x = -z \\ x^2 + z^2 = 1 \end{array}\right\}$$

egyenletrendszerből $x = \pm 1/\sqrt{2}$, $y = 0$ és $z = \mp 1/\sqrt{2}$.
A $z = x = y/\lambda$ esetben $\lambda = \pm\sqrt{2}$-t kapunk. A

mellékfeltételbe a $(\frac{y}{\pm\sqrt{2}}, y, \frac{y}{\pm\sqrt{2}})$ pontot visszahelyettesítve kapjuk, hogy $y = \pm 1/\sqrt{2}$.

Az f stacionárius pontjai tehát: $\pm(\frac{1}{\sqrt{2}}, 0, -\frac{1}{\sqrt{2}})$, $\pm(\frac{1}{2}, \frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{2})$ és $\pm(\frac{1}{2}, -\frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{2})$.
A fügvényértékek a stacionárius pontokban rendre $-1, -1, \frac{1+\sqrt{2}}{2}, \frac{1+\sqrt{2}}{2}, -\sqrt{2}, -\sqrt{2}$ Az f-nek tehát a harmadik és negyedik pontban maximuma, az ötödik és hatodik pontban minimuma van az adott mellékfeltétel mellett.

Itt is lehet polárkoordinátákkal próbálkozni, de a megoldás multiplikátor módszerrel egyszerűbb.

M 6.6.
Lagrange multiplikátor módszer. A nullára rendezett mellékfeltételt egy számmal szorozva az eredeti függvényhez hozzádjuk:
$F(x,y,z,\lambda) = 1/x + 4/y + 9/z + \lambda(x+y+z-12)$

Az F függvény x, y, z szerinti parciális deriváltjait nullává téve a

$$\left.\begin{array}{l} -1/x^2 + \lambda = 0 \\ -4/y^2 + \lambda = 0 \\ -9/z^2 + \lambda = 0 \end{array}\right\}$$

egyenletrendszert kapjuk, ennek megoldása: $y = \pm 2x$ és $y = \pm 3x$.

A mellékfeltételbe visszahelyettesítve:
$x \pm 2x \pm 3x = 12$.
Ez tkp. négy egyenlet, amiből $+,+$ előjel esetén $x = 2$, $y = 4$, $z = 6$ -ot kapunk. Ez az egyik megoldás. A $+,-$ előjeleket választva ellentmondásra jutunk, a $-,+$ eset az $x = 6$, $y = -12$, $z = 18$ megoldásra, a $-,-$ eset pedig az $x = -3$, $y = 6$, $z = 9$ megoldásra vezet.

M 6.7.

(a) $\partial f/\partial x = ye^x$, $\partial f/\partial y = e^x - 1$
Az

$$\left.\begin{array}{l} ye^x = 0 \\ e^x - 1 = 0 \end{array}\right\}$$

egyenletrendszerből kapjuk, hogy a $(0,0)$ pont a stacionárius pont.

(b) a második parciális deriváltak:
$\partial^2 f/\partial x^2 = ye^x$, $\partial^2 f/\partial y^2 = 0$
$\partial^2 f/\partial x \partial y = e^x$

A Hess-mátrix az $x = 0$, $y = 0$ pontban:

$$\mathbf{H}\big|_{(0,0)} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Ennek sajátértékei és normált sajátvektorai:
$\lambda_1 = -1$, $\mathbf{v}_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}(1,-1)$
$\lambda_2 = 1$, $\mathbf{v}_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}(1,1)$

(c) Mivel a $(0,0)$ pontban számított Hess-mátrix egyik sajátértéke pozitív, a másik negatív, ezért f-nek nincs szélsőértéke a $(0,0)$ pontban, hanem nyeregpontja van.

M 6.8.
A funkcionál variációja:

$$\delta J = \int_a^b \left(3f^2(x)x^2\,\delta f - 2f(x)x^3\,\delta f\right)\mathrm{d}x = \\ = \int_a^b \left(3f^2(x)x^2 - 2f(x)x^3\right)\delta f\,\mathrm{d}x$$

A szélsőérték szükséges feltétele, hogy a funkcionál variációja nulla legyen. Az f függvény variációja, δf, tetszőleges. A fenti integrál ezért akkor nulla, ha
$3f^2(x)x^2 - 2f(x)x^3 = 0$
$f(x)\left(3f(x)x^2 - 2x^3\right) = 0$
Az egyenlet megoldásai: $f(x) \equiv 0$ konstans függvény, és $f(x) = \dfrac{2}{3}x$.

M 6.9.
A funkcionál variációja:

$$\delta J = \int_a^b \left(\ln f\,\delta f + f\frac{1}{f}\,\delta f - 2\,\delta f\right)\mathrm{d}x = \\ = \int_a^b (\ln f + 1 - 2)\,\delta f\,\mathrm{d}x$$

A J variációja akkor nulla, ha
$\ln f + 1 - 2 = 0$
fennáll. Ebből kapjuk, hogy a J funkcionálnak az $f \equiv e$ konstans függvény esetén lehet szélsőértéke.

M 6.10.
A J funkcionálhoz hozzáadjuk a mellékfeltételt nullára rendezve, szorozva egy számmal (Lagrange multiplikátor):

$$\tilde{J} = \int_0^{\pi/2} \cos(x)f(x)\,\mathrm{d}x - \lambda\left(\int_0^{\pi/2} f^2(x)\,\mathrm{d}x - 1\right)$$

A $\tilde{J}$ funkcionál variációja:

$$\delta\tilde{J} = \int_0^{\pi/2} (\cos(x) - 2\lambda f(x))\,\delta f\,\mathrm{d}x$$

akkor tűnik el, ha
$\cos(x) = 2\lambda f(x)$, azaz $f(x) = \cos(x)/(2\lambda)$.

A mellékfeltételbe visszahelyettesítve:
$$\frac{1}{4\lambda^2}\int_0^{\pi/2}\cos^2(x)\,\mathrm{d}x = \frac{1}{4\lambda^2}\left[\frac{x}{2}+\frac{1}{4}\sin(2x)\right]_0^{\pi/2} =$$
$$= \frac{1}{4\lambda^2}\frac{\pi}{4} = 1$$
Ebből a multiplikátor értékére $\lambda = \pm\frac{\sqrt{\pi}}{4}$, adódik, a keresett függvény tehát $f(x) = \pm\frac{2\cos(x)}{\sqrt{\pi}}$

M 6.11.

A mellékfeltétel egyenlete: $\int_0^1 f^2(x)\,\mathrm{d}x - 1 = 0$

A
$$\tilde{J} = \int_0^1 x^2 f(x)\,\mathrm{d}x - \lambda\left(\int_0^1 f^2(x)\,\mathrm{d}x - 1\right)$$
funkcionál variációja:
$$\delta\tilde{J} = \int_0^1 x^2\,\delta f\,\mathrm{d}x - \lambda\int_0^1 2f\,\delta f\,\mathrm{d}x =$$
$$= \int_0^1 \left(x^2 - \lambda 2f\right)\,\delta f\,\mathrm{d}x$$
Mivel δf tetszőleges, $\delta\tilde{J}$ akkor nulla, ha $x^2 - \lambda 2f = 0$, azaz $f = x^2/(2\lambda)$.

A mellékfeltételbe visszahelyettesítve:
$$\frac{1}{4\lambda^2}\int_0^1 x^4\,\mathrm{d}x = \frac{1}{4\lambda^2}\frac{1}{5} = 1$$
Ebből $\lambda = \pm 1/(2\sqrt{5})$, ezért $f = \pm\sqrt{5}x^2$

M 6.12.

$\phi(0) = 0+0 = 0$, $\phi(1) = 1+0 = 1$, ϕ tehát teljesíti a peremfeltételeket

Az $E(f)$ funkcionál helyett tekintjük az $E(c) = \int_0^1\left(\phi^2 - (\phi')^2\right)\,\mathrm{d}x$ függvényt, és azt keressük, milyen c szám esetén lehet szélsőértéke $E(c)$-nek.

$\phi^2 = x^2(1+2c+c^2) - x^3(2c^2+2c) + c^2x^4$
$(\phi')^2 = 1 + 2c + c^2 - 4x(c+c^2) + 4x^2c^2$

$$E(c) = \int_0^1\sum_{k=0}^4 a_k x^k\,\mathrm{d}x = \sum_{k=0}^4 a_k\left[\frac{x^{k+1}}{k+1}\right]_0^1 =$$
$$= \sum_{k=0}^4\frac{a_k}{k+1}$$

$$\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}c} = \sum_{k=0}^4\frac{1}{k+1}\frac{\mathrm{d}a_k}{\mathrm{d}c} = 0$$

Az a_k együtthatók és c szerinti deriváltjaik:
$a_0 = -(1+c)^2$, $a_1 = 4c^2+4c$
$a_2 = 1+2c-3c^2$, $a_3 = -2c^2-2c$, $a_4 = c^2$

$\mathrm{d}a_0/\mathrm{d}c = -2(1+c)$, $\mathrm{d}a_1/\mathrm{d}c = 8c+4$
$\mathrm{d}a_2/\mathrm{d}c = 2-6c$, $\mathrm{d}a_3/\mathrm{d}c = -4c-2$
$\mathrm{d}a_4/\mathrm{d}c = 2c$

Az együtthatók c szerinti deriváljait a fenti $\mathrm{d}E/\mathrm{d}c = 0$ feltételbe helyettesítve $c = \frac{5}{18}$-ot kapunk.

Az egzakt megoldáshoz terkintsük a funkcionál variációját:
$$\delta J = \int_0^1\Big(2f(x)\,\delta f(x) - 2f'(x)\,\delta(f'(x))\Big)\,\mathrm{d}x$$
Belátható, hogy $\delta(f'(x)) = (\delta f(x))'$ (u.i. a deriválás lineáris művelet, és variáláskor csak a δf-ben elsőrendű tagokat tekintjük). Így a funkcionál variációja írható, mint
$$\delta J = \int_0^1\left(2f\delta f - 2f'(\delta f)'\right)\,\mathrm{d}x$$
Integráljuk parciálisan a második tagot:
$$2\int_0^1 f'(\delta f)'\,\mathrm{d}x = 2\left[f'\delta f\right]_0^1 - 2\int_0^1 f''\delta f\,\mathrm{d}x$$
Mivel δf nulla az integrálási tartomány határain, ezért a jobb oldalon álló az első tag nulla. A funkcionál variációja tehát:
$$\delta J = \int_0^1\left(2f + 2f''\right)\delta f\,\mathrm{d}x$$
A $\delta J = 0$ feltétel tetszőleges δf-re akkor teljesül, ha $f + f'' = 0$.

Vegyük észre, hogy tkp. az Euler-Lagrange egyenletet vezettük le, az adott speciális esetben. Az Euler-Lagrange egyenlet szerint egy
$$J = \int_a^b F\left(x, f(x), f'(x)\right)\,\mathrm{d}x = 0$$
funkcionált stacionáriussá tevő függvény, a
$$\frac{\partial F}{\partial f} - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\frac{\partial F}{\partial f'} = 0$$
differenciálegyenletnek tesz eleget.

Az ebben a feladatban adódó differenciálegyenlet peremfeltételekhez illeszkedő partikuláris megoldása $f(x) = \sin(x)/\sin(1)$.

M 6.13.

$\mathbf{Hv} = (y, x)\,, \quad E = (x, y)\begin{pmatrix} y \\ x \end{pmatrix} = 2xy$

Tekintjük az

$F = 2xy - \lambda\left(x^2 + y^2 - 1\right)$

függvényt. Ennek x és y szerinti parciális deriváltjait 0-vá téve 2 egyenletetet kapunk a három ismeretlenre:

$\left.\begin{array}{l} 2y - 2\lambda x = 0 \\ 2x - 2\lambda y = 0 \end{array}\right\}$

Az egyenletrendszer megoldása: $\lambda = \pm 1$ és $x = \pm y$.

A mellékfeltételbe visszahelyettesítve: $2x^2 = 1$, tehát $x = 1/\sqrt{2}$ és $y = \pm 1/\sqrt{2}$.

Vegyük észre, hogy a $\mathbf{H}$ mátrix sajátértékfeladatát oldottuk meg, λ-ra a sajátértékeket, $\mathbf{v}$-re a sajátvektorokat kaptuk.

M 6.14.

Legyen a két terepet elválasztó egyenes az x tengellyel párhuzamos. A futó y_1-nyit mozdul el az y koordináta mentén az első terepen, y_2-nyit a második terepen. Kérdés, hogy hogyan osszuk fel az x koordináta mentén szükséges elmozdulást, Δx-et, x_1-re (az első terepen megteendő út) és x_2-re (a második terepen megteendő út) úgy, hogy a futás alatt eltelt idő minimális legyen.

Keressük tehát a $T(x_1, x_2) = t_1(x_1) + t_2(x_2)$ függvény szélsőértékét, ahol t_1 az első terepen futott idő, t_2 a második terepen futott idő. A két változó közötti $x_1 + x_2 = \Delta x$ összefüggést mellékfeltételként figyelembe kell vegyük.

A két terepen futott idő, mint x_1 ill. x_2 függvénye:

$t_1 = \sqrt{x_1^2 + y_1^2}/v_1\,, \;\; t_2 = \sqrt{x_2^2 + y_2^2}/v_2$

A mellékfeltétellel kiegészített függvény:

$\tau = t_1 + t_2 + \lambda(\Delta x - x_1 - x_2)$

Ennek x_1 és x_2 szerinti parciális deriváltjait nullává téve kapjuk:

$\left.\begin{array}{l} \frac{1}{v_1}\sin\alpha - \lambda = 0 \\ \frac{1}{v_2}\sin\beta - \lambda = 0 \end{array}\right\}$

ahol α a „beérkezés” szöge ($\sin\alpha = x_1/\sqrt{x_1^2 + y_1^2}$) és β a „kilépés” szöge ($\sin\beta = x_2/\sqrt{x_2^2 + y_2^2}$). Az egyenletrendszerből a $\dfrac{\sin(\alpha)}{\sin(\beta)} = \dfrac{v_1}{v_2}$ egyenletet adódik (v.ö. Snellius-Descartes törvény).

7. Koordinátarendszerek

M 7.1.

$r = \sqrt{x^2 + y^2} = 3{,}90$

$\varphi = \operatorname{arc\,tg}\dfrac{y}{x} = 140{,}2^o = 2{,}45\,\mathrm{rad}$

M 7.2.

$r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2} = \sqrt{6}$

$\vartheta = \operatorname{arc\,cos}\dfrac{z}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}} = 114^o = 1{,}99\,\mathrm{rad}$

$\varphi = \operatorname{arc\,tg}\dfrac{y}{x} = 243{,}4^o = 4{,}25\,\mathrm{rad}$

M 7.3.

$x = r\cos\varphi = 0$

$y = r\sin\varphi = 1$

M 7.4.

$x = r\sin\vartheta\cos\varphi = -\sqrt{2}$

$y = r\sin\vartheta\sin\varphi = 0$

$z = r\cos\vartheta = \sqrt{2}$

M 7.5.

$x = r\cos\varphi$

$y = r\sin\varphi$

$J = \begin{vmatrix} \frac{\partial x}{\partial r} & \frac{\partial x}{\partial \varphi} \\ \frac{\partial y}{\partial r} & \frac{\partial y}{\partial \varphi} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} \cos\varphi & -r\sin\varphi \\ \sin\varphi & r\cos\varphi \end{vmatrix} =$

$= r\cos^2\varphi - (-r\sin^2\varphi) = r$

M 7.6.

$x = r\sin\vartheta\cos\varphi$

$y = r\sin\vartheta\sin\varphi$

$z = r\cos\vartheta$

$$J = \begin{vmatrix} \frac{\partial x}{\partial r} & \frac{\partial x}{\partial \vartheta} & \frac{\partial x}{\partial \varphi} \\ \frac{\partial y}{\partial r} & \frac{\partial y}{\partial \vartheta} & \frac{\partial y}{\partial \varphi} \\ \frac{\partial z}{\partial r} & \frac{\partial z}{\partial \vartheta} & \frac{\partial z}{\partial \varphi} \end{vmatrix} =$$

$= \begin{vmatrix} \sin\vartheta\cos\varphi & r\cos\vartheta\cos\varphi & -r\sin\vartheta\sin\varphi \\ \sin\vartheta\sin\varphi & r\cos\vartheta\sin\varphi & r\sin\vartheta\cos\varphi \\ \cos\vartheta & -r\sin\vartheta & 0 \end{vmatrix} =$

$= \cos\vartheta[r^2\sin\vartheta\cos\vartheta\cos^2\varphi - (-r^2\sin\vartheta\cos\vartheta\sin^2\varphi)]$

$-\{-r\sin\vartheta[r\sin^2\vartheta\cos^2\varphi - (-r\sin^2\vartheta\sin^2\varphi)]\} =$

$= r^2\sin\vartheta\cos^2\vartheta + r^2\sin^3\vartheta = r^2\sin\vartheta$

M 7.7.

$\mathrm{d}x = \dfrac{\partial x}{\partial r}\,\mathrm{d}r + \dfrac{\partial x}{\partial \varphi}\,\mathrm{d}\varphi = \cos\varphi\,\mathrm{d}r - r\sin\varphi\,\mathrm{d}\varphi$

$\mathrm{d}y = \dfrac{\partial y}{\partial r}\,\mathrm{d}r + \dfrac{\partial y}{\partial \varphi}\,\mathrm{d}\varphi = \sin\varphi\,\mathrm{d}r + r\cos\varphi\,\mathrm{d}\varphi$

$$\mathrm{d}s^2 = \mathrm{d}x^2 + \mathrm{d}y^2 =$$
$$= \cos^2\varphi\,\mathrm{d}r^2 \underline{-2r\cos\varphi\sin\varphi\,\mathrm{d}r\,\mathrm{d}\varphi} + r^2\sin^2\varphi\,\mathrm{d}\varphi^2 +$$
$$+ \sin^2\varphi\,\mathrm{d}r^2 \underline{+2r\cos\varphi\sin\varphi\,\mathrm{d}r\,\mathrm{d}\varphi} + r^2\cos^2\varphi\,\mathrm{d}\varphi^2 =$$
$$= \boxed{1\cdot\mathrm{d}r^2 + r^2\,\mathrm{d}\varphi^2}$$
$$g = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & r^2 \end{pmatrix}$$

M 7.8.

$$\mathrm{d}x = \frac{\partial x}{\partial r}\mathrm{d}r + \frac{\partial x}{\partial\vartheta}\mathrm{d}\vartheta + \frac{\partial x}{\partial\varphi}\mathrm{d}\varphi =$$
$$= \sin\vartheta\cos\varphi\,\mathrm{d}r + r\cos\vartheta\cos\varphi\,\mathrm{d}\vartheta - r\sin\vartheta\sin\varphi\,\mathrm{d}\varphi$$
$$\mathrm{d}y = \frac{\partial y}{\partial r}\mathrm{d}r + \frac{\partial y}{\partial\vartheta}\mathrm{d}\vartheta + \frac{\partial y}{\partial\varphi}\mathrm{d}\varphi =$$
$$= \sin\vartheta\sin\varphi\,\mathrm{d}r + r\cos\vartheta\sin\varphi\,\mathrm{d}\vartheta + r\sin\vartheta\cos\varphi\,\mathrm{d}\varphi$$
$$\mathrm{d}z = \frac{\partial z}{\partial r}\mathrm{d}r + \frac{\partial z}{\partial\vartheta}\mathrm{d}\vartheta + \frac{\partial z}{\partial\varphi}\mathrm{d}\varphi =$$
$$= \cos\vartheta\,\mathrm{d}r + r\sin\vartheta\,\mathrm{d}\vartheta + 0\cdot\mathrm{d}\varphi$$
$$\mathrm{d}s^2 = \mathrm{d}x^2 + \mathrm{d}y^2 + \mathrm{d}z^2 =$$
$$= \sin^2\vartheta\cos^2\varphi\,\mathrm{d}r^2 + r^2\cos^2\vartheta\cos^2\varphi\,\mathrm{d}\vartheta^2 +$$
$$+ r^2\sin^2\vartheta\sin^2\varphi\,\mathrm{d}\varphi^2 +$$
$$\underline{-2r\sin\vartheta\cos\vartheta\cos^2\varphi\,\mathrm{d}r\,\mathrm{d}\vartheta} -$$
$$\underline{\underline{-2r\sin^2\vartheta\cos\varphi\sin\varphi\,\mathrm{d}r\,\mathrm{d}\varphi}} +$$
$$\underline{-r^2\sin\vartheta\cos\vartheta\cos\varphi\sin\varphi\,\mathrm{d}\vartheta\,\mathrm{d}\varphi} +$$
$$+ \sin^2\vartheta\sin^2\varphi\,\mathrm{d}r^2 + r^2\cos^2\vartheta\sin^2\varphi\,\mathrm{d}\vartheta^2 +$$
$$+ r^2\sin^2\vartheta\cos^2\varphi\,\mathrm{d}\varphi^2 +$$
$$\underline{+2r\sin\vartheta\cos\vartheta\sin^2\varphi\,\mathrm{d}r\,\mathrm{d}\vartheta} +$$
$$\underline{\underline{+2r\sin^2\vartheta\sin\varphi\cos\varphi\,\mathrm{d}r\,\mathrm{d}\varphi}} +$$
$$\underline{+r^2\sin\vartheta\cos\vartheta\sin\varphi\cos\varphi\,\mathrm{d}\vartheta\,\mathrm{d}\varphi} + \cos^2\vartheta\,\mathrm{d}r^2 +$$
$$+ r^2\sin^2\vartheta\,\mathrm{d}\vartheta^2 \underline{-2r\sin\vartheta\cos\vartheta\,\mathrm{d}r\,\mathrm{d}\vartheta} =$$
$$= \boxed{1\cdot\mathrm{d}r^2 + r^2\,\mathrm{d}\vartheta^2 + r^2\sin^2\vartheta\,\mathrm{d}\varphi^2}$$
$$g = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & r^2 & 0 \\ 0 & 0 & r^2\sin^2\vartheta \end{pmatrix}$$

M 7.9.

$$\mathrm{d}x = \frac{\partial\mu}{\partial r}\mathrm{d}\mu + \frac{\partial x}{\partial\nu}\mathrm{d}\nu + \frac{\partial x}{\partial\varphi}\mathrm{d}\varphi =$$
$$= \frac{R}{2}\sqrt{1-\nu^2}\cos\varphi\frac{\mu}{\sqrt{\mu^2-1}}\,\mathrm{d}\mu +$$
$$+ \frac{R}{2}\sqrt{\mu^2-1}\cos\varphi\frac{-\nu}{\sqrt{1-\nu^2}}\,\mathrm{d}\nu -$$
$$- \frac{R}{2}\sqrt{(\mu^2-1)(1-\nu^2)}\sin\varphi\,\mathrm{d}\varphi$$
$$\mathrm{d}y = \frac{\partial y}{\partial\mu}\mathrm{d}\mu + \frac{\partial y}{\partial\nu}\mathrm{d}\nu + \frac{\partial y}{\partial\varphi}\mathrm{d}\varphi =$$
$$= \frac{R}{2}\sqrt{1-\nu^2}\sin\varphi\frac{\mu}{\sqrt{\mu^2-1}}\,\mathrm{d}\mu +$$
$$+ \frac{R}{2}\sqrt{\mu^2-1}\sin\varphi\frac{-\nu}{\sqrt{1-\nu^2}}\,\mathrm{d}\nu +$$
$$+ \frac{R}{2}\sqrt{(\mu^2-1)(1-\nu^2)}\cos\varphi\,\mathrm{d}\varphi$$
$$\mathrm{d}z = \frac{\partial z}{\partial\mu}\mathrm{d}\mu + \frac{\partial z}{\partial\nu}\mathrm{d}\nu + \frac{\partial z}{\partial\varphi}\mathrm{d}\varphi = \frac{R}{2}\nu\,\mathrm{d}\mu + \frac{R}{2}\mu\,\mathrm{d}\nu$$
$$\mathrm{d}s^2 = \mathrm{d}x^2 + \mathrm{d}y^2 + \mathrm{d}z^2 =$$
$$= \boxed{\frac{R^2}{4}\frac{\mu^2-\nu^2}{\mu^2-1}\,\mathrm{d}\mu^2 + \frac{R^2}{4}\frac{\mu^2-\nu^2}{1-\nu^2}\,\mathrm{d}\nu^2 +}$$
$$\boxed{+\frac{R^2}{4}(\mu^2-1)(1-\nu^2)\,\mathrm{d}\varphi^2}$$
$$g = \frac{R^2}{4}\begin{pmatrix} \frac{\mu^2-\nu^2}{\mu^2-1} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\mu^2-\nu^2}{1-\nu^2} & 0 \\ 0 & 0 & (\mu^2-1)(1-\nu^2) \end{pmatrix}$$

M 7.10.

M 7.11.

M 7.12.

$$f(x,y,z) = f(r) = \sum_{k\in\mathbb{Z}} c_k r^k \qquad r \neq 0$$
$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \Delta_{\vartheta,\varphi}$$
$$\Delta f = \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right)\sum_{k\in\mathbb{Z}} c_k r^k =$$
$$= \sum_{k\in\mathbb{Z}} c_k k(k-1)r^{k-2} + \sum_{k\in\mathbb{Z}} 2c_k k r^{k-2} =$$
$$= \sum_{k\in\mathbb{Z}} c_k k(k+1)r^{k-2}$$
$$\Delta f = 0 \quad\Leftrightarrow\quad c_k = 0 \;\; \forall k\in\mathbb{Z}\setminus\{0,-1\}$$
$f = \dfrac{1}{r}$ esetében $\Delta f = 0$, ha $r \neq 0$

M 7.13.

Áttérve síkbeli polárkoordinátákra: $|J| = r$

$$\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\sqrt{x^2+y^2}}\,\mathrm{d}x\,\mathrm{d}y = \int_0^{\infty}\int_0^{2\pi} e^{-r}r\,\mathrm{d}r\,\mathrm{d}\varphi =$$
$$= \int_0^{\infty} re^{-r}\,\mathrm{d}r\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\varphi = \frac{2!}{1^2}\cdot 2\pi = 2\pi$$

M 7.14.

Áttérve térbeli polárkoordinátákra: $|J| = r^2\sin\vartheta$

$$\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} \frac{[e^{-\sqrt{x^2+y^2+z^2}}]^{\frac{7}{3}}}{x^2+y^2+z^2}\,\mathrm{d}x\,\mathrm{d}y\,\mathrm{d}z =$$

$$= \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \frac{e^{-\frac{7}{3}r}}{r} r^2 \sin\vartheta \, \mathrm{d}r \, \mathrm{d}\vartheta \, \mathrm{d}\varphi =$$

$$= \int_0^\infty e^{-\frac{7}{3}r} \, \mathrm{d}r \int_0^\pi \sin\vartheta \, \mathrm{d}\vartheta \int_0^{2\pi} \mathrm{d}\varphi == \frac{1!}{\frac{7}{3}} \cdot 2 \cdot 2\pi = \frac{12\pi}{7}$$

M 7.15.

$$\langle \chi_a | \chi_b \rangle = \int_0^\infty \int_0^\infty \int_0^\infty e^{-r_a} e^{-r_b} \, \mathrm{d}x \, \mathrm{d}y \, \mathrm{d}z =$$

$$= \int_1^\infty \int_{-1}^1 \int_0^{2\pi} e^{-\mu R} \frac{R^3}{8} (\mu^2 - \nu^2) \, \mathrm{d}\mu \, \mathrm{d}\nu \, \mathrm{d}\varphi =$$

$$= \frac{R^3}{8} \left[\int_1^\infty e^{-\mu R} \mu^2 \, \mathrm{d}\mu \int_{-1}^1 \mathrm{d}\nu \int_0^{2\pi} \mathrm{d}\varphi - \right.$$

$$\left. - \int_1^\infty e^{-\mu R} \, \mathrm{d}\mu \int_{-1}^1 \nu^2 \, \mathrm{d}\nu \int_0^{2\pi} \mathrm{d}\varphi \right] =$$

$$= \frac{R^3}{8} \left\{ \left[-e^{-\mu R} \left(\frac{\mu^2}{R} + \frac{2\mu}{R^2} + \frac{2}{R^3} \right) \right]_1^\infty \cdot 2 \cdot 2\pi - \right.$$

$$\left. - \left[-\frac{1}{R} e^{-\mu R} \right]_1^\infty \cdot \frac{2}{3} \cdot 2\pi \right\} =$$

$$= \pi e^{-R} \left(\frac{R^2}{3} + R + 1 \right)$$

8. Komplex függvények

M 8.1.
A -1 exponenciális alakja: $-1 = e^{i(\pi + k2\pi)}$

$z = -1^{1/4} = e^{i\left(\frac{\pi}{4} + k\frac{\pi}{2}\right)}$

A négy gyök: $z_1 = e^{i\pi/4}$, $z_2 = e^{i3\pi/4}$

$z_3 = e^{i5\pi/4}$, $z_4 = e^{i7\pi/4}$

$\mathrm{Re}(z_1) = \mathrm{Re}(z_4) = \cos(\pi/4) = 1/\sqrt{2}$

$\mathrm{Re}(z_2) = \mathrm{Re}(z_3) = \cos(3\pi/4) = -1/\sqrt{2}$

M 8.2.

$j = (-i)^{1/2} = \left(e^{i\left(\frac{3\pi}{2} + k2\pi\right)} \right)^{1/2} = e^{i\left(\frac{3\pi}{4} + k\pi\right)}$

Két ilyen szám van: $j_1 = -\dfrac{1}{\sqrt{2}} + i\dfrac{1}{\sqrt{2}}$

és $j_2 = \dfrac{1}{\sqrt{2}} - i\dfrac{1}{\sqrt{2}}$.

M 8.3.
Az i exponenciális alakja: $i = e^{i\pi/2}$

$i^{\,i} = e^{i \cdot i\pi/2} = e^{-\pi/2}$

A képlet érdekessége, hogy három különböző eredetű matematikai állandó között teremt kapcsolatot.

M 8.4.
$f(z) = z^2 = (x + iy)^2 = (x^2 - y^2) + i(2xy) = u + iv$

Az $f(z)$ valós része $u = x^2 - y^2$, képzetes része $v = 2xy$.

M 8.5.
z algebrai alakja: $z = a + ib$

$$\sin z = \frac{e^{iz} - e^{-iz}}{2i} = \frac{e^{ia}e^{-b} - e^{-ia}e^{b}}{2i} =$$

$$= -i\frac{e^{-b}}{2}(\cos a + i \sin a) + i\frac{e^{b}}{2}(\cos a - i \sin a) =$$

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

$$= \sin a \,\mathrm{ch}\, b + i \cos a \,\mathrm{sh}\, b$$

$\mathrm{Re}(z) = \sin a \,\mathrm{ch}\, b$, $\quad \mathrm{Im}(z) = \cos a \,\mathrm{sh}\, b$

M 8.6.
$f(z)$ exponenciális alakja: $\sin(z) = re^{i\varphi}$,

ahol $r = \sqrt{(\mathrm{Re}(f))^2 + (\mathrm{Im}(f))^2}$ és $\mathrm{tg}\,\varphi = \dfrac{\mathrm{Im}(f)}{\mathrm{Re}(f)}$

Az előző példa eredményét felhasználva:

$$r = \sqrt{\sin^2 a \,\mathrm{ch}^2 b + \mathrm{sh}^2 b \cos^2 a} =$$

$$= \sqrt{\sin^2 a \,\mathrm{ch}^2 b + \mathrm{sh}^2 b - \mathrm{sh}^2 b \sin^2 a} =$$

$$= \sqrt{\sin^2 a + \mathrm{sh}^2 b}$$

$\mathrm{tg}\,\varphi = \mathrm{th}\, b \,\mathrm{ctg}\, a$

M 8.7.
$\sin z = \sin(a + ib) = A + iB$

Az $\sin z$ domborzata, a **8.6.** példa eredményét felhasználva:

$|\sin z| = \sqrt{A^2 + B^2} = \sqrt{\sin^2 a + \mathrm{sh}^2 b}$

M 8.8.
A függvények analitikus voltáról dönthetünk a Cauchy-Riemann feltételek alapján vagy a függvények Laurent-sora alapján. Most az utóbbit nézzük:

a.) $\cos z = 1 - \dfrac{z^2}{2!} + \dfrac{z^4}{4!} \mp \ldots$

Nem szerepel negatív kitevőjű tag a sorban, ezért $\cos z$ az egész komplex számsíkon analitikus.

b.) $\sin z = z - \frac{z^3}{3!} + \frac{z^5}{5!} \mp \ldots$
analitikus az egész komplex síkon

c.) $e^z = 1 + z + \frac{z^2}{2!} + \frac{z^3}{3!} + \ldots$
analitikus az egész komplex síkon

d.) $\frac{\cos z}{z} = \frac{1}{z} - \frac{z}{2!} + \frac{z^3}{4!} \mp \ldots$
$z = 0$-ban szinguláris (elsőrendű pólusa van), a komplex sík többi pontjában reguláris

e.) $\frac{\sin z}{z} = 1 - \frac{z^2}{3!} + \frac{z^4}{5!} \mp \ldots$
analitikus az egész komplex síkon

f.) $\frac{e^z}{z} = \frac{1}{z} + 1 + \frac{z}{2!} + \frac{z^2}{3!} + \ldots$
$z = 0$-ban szinguláris (elsőrendű pólusa van), a komplex sík többi pontjában reguláris

---

M 8.9.
A Cauchy-Riemann feltételeket ellenőrizzük. Azaz azt vizsgáljuk, hogy $f(x+iy) = u + iv$-re $\partial u/\partial x = \partial v/\partial y$ és $\partial u/\partial y = -\partial v/\partial x$ teljesül-e.

a.) $\partial u/\partial x = 2x\,,\quad \partial v/\partial y = 2x\,,$ az első feltétel teljesül
$\partial u/\partial y = -2y\,,\quad \partial v/\partial x = 2y\,,$ a második is teljesül
f az egész komplex síkon analitikus

b.) $\partial u/\partial x = 2\,,\quad \partial v/\partial y = 2\,,$ az első feltétel teljesül
$\partial u/\partial y = 1\,,\quad \partial v/\partial x = 1$ a második feltétel nem teljesül
Nincs olyan pontja a komplex síknak, ahol mind a két feltétel teljesülne, ezért f sehol sem analitikus.

M 8.10.
A függvény analitikus, ezért a szokásos deriválási szabályokat alkalmazhatjuk.
$\mathrm{d}f/\mathrm{d}z = nz^{n-1}e^z + z^n e^z$

M 8.11.
$f(z) = \frac{1}{z^4} + \frac{1}{z^3} + \frac{1}{2!z^2} + \frac{1}{3!z} + \frac{1}{4!} + \frac{z}{5!} + \frac{z^2}{6!} + \ldots$
A $z = 0$ pont kivételével f mindenütt analitikus a komplex síkon.

M 8.12.

a.) $f(z) = \frac{1}{a+ib} = \frac{1}{a+ib}\frac{a-ib}{a-ib} = \frac{a-ib}{a^2+b^2}$

$$\mathrm{Re}(f) = \frac{a}{a^2+b^2}\,,\quad \mathrm{Im}(f) = -\frac{b}{a^2+b^2}$$

b.) $f(z)$ a 0 kivételével mindenütt analitikus

M 8.13.
parciális integrálás:
$\int ze^z\,dz = ze^z - \int e^z\,dz = ze^z - e^z + C$
C tetszőleges komplex szám

M 8.14.
Jelölje G_R az R sugarú félkörívet. Az $f(z)$ függvény G_R kontúron számított integrálja:

$$I = \int_{G_R} f(z)\,dz = \int_0^\pi f(Re^{i\varphi})\frac{dz}{d\varphi}\,d\varphi =$$
$$= \int_0^\pi f(Re^{i\varphi})iRe^{i\varphi}\,d\varphi = i\int_0^\pi Rf(Re^{i\varphi})e^{i\varphi}\,d\varphi$$

A végtelen sugarú félköríven vett integrált az I határértékeként kapjuk, ahogy $R \longrightarrow \infty$. Ahhoz, hogy ez a határérték nulla legyen, a fentiek alapján az szükséges, hogy $Rf(Re^{i\varphi}) \longrightarrow 0$, ahogy $R \longrightarrow \infty$, és a φ szerinti integrál korlátos legyen.

A **8.15.** feladatban szereplő $f(z) = 1/(4+z^2)$ függvény esetén például ahogy $R \longrightarrow \infty$ az $f(Re^{i\varphi}) = 1/(R^2e^{2i\varphi}+4)$ függvény tart $1/R^2e^{2i\varphi}$-hez. Az utóbbi kifejezés R-nek -2-odfokú homogén függvénye, R-rel szorozva is 0-hoz tart, ha $R \longrightarrow \infty$. A φ függő rész integrálja ebben az esetben $\int_0^\pi e^{-2i\varphi+i\varphi}\mathrm{d}\varphi = \int_0^\pi e^{-i\varphi}\mathrm{d}\varphi = -2i$, korlátos.

M 8.15.

$$I = \int \frac{\mathrm{d}x}{(x+2i)(x-2i)} = \int_G \frac{1/(z+2i)}{z-2i}\,dz$$

A G legyen egy olyan zárt görbe a komplex síkon, amely a valós tengely $-\infty$-től ∞-ig, lezárva egy végtelen sugarú félkörrel a felső félsíkon. A görbe irányítása pozitív. A fenti egyenlőség fennáll, mivel $1/(4+x^2)$ végtelen sugarú félkörön vett komplex integrálja nulla (lásd **8.14.** feladat). Az egyenlet jobb oldalán az integrandus számlálója analitikus a kontúron belül, a nevezőben álló $z-2i$ miatt az integrandusnak egy pólusa van G-n belül, $z = 2i$-nél. Felhasználjuk a

$$\int_G \frac{f(z)}{z-z_0}\mathrm{d}z = 2\pi i f(z_0)$$

Cauchy-féle integrálformulát (itt $f(z)$ analitikus G-n belül, az integrandusnak csak $z = z_0$ esetén van pólusa G-n belül). Ennek segítségével kapjuk, hogy:

$$I = 2\pi i \frac{1}{2i+2i} = \pi/2$$

M 8.16.

$$I = \int \frac{\cos x}{(x+i)(x-i)}\,\mathrm{d}x = \int_G \frac{\cos z/(z+i)}{z-i}\,dz =$$

$$= 2\pi i \frac{\cos i}{2i} = \pi\cos(i) = \pi\ \mathrm{ch}\,(1)$$

Magyarázatot lásd az előző példánál.

9. Lineáris terek és operátorok, mátrixszámítás

M 9.1.

$\langle \mathbf{a}|\mathbf{a}\rangle = 4+0+16+5 = 25$

$|\mathbf{a}| = \sqrt{\langle \mathbf{a}|\mathbf{a}\rangle} = 5$

$\tilde{\mathbf{a}} = \mathbf{a}/|\mathbf{a}| = \frac{1}{5}(-2, 0, 4, \sqrt{5})$

M 9.2.

$\langle \mathbf{a}|\mathbf{b}\rangle = 2 + (2i)^* - 3i = 2 - 5i$

M 9.3.

a.) $\langle e^{i\alpha}x|e^{i\alpha}x\rangle = e^{-i\alpha}e^{i\alpha}\langle x|x\rangle = \langle x|x\rangle =$

$$= \int_a^b x^2\,\mathrm{d}x = \left[\frac{x^3}{3}\right]_a^b = \frac{b^3-a^3}{3}$$

b.) $\langle (a+ib)\mathbf{x}|\mathbf{y}\rangle\,\langle \mathbf{x}|(a+ib)\mathbf{y}\rangle =$

$= (a+ib)^*\,(a+ib)\langle \mathbf{x}|\mathbf{y}\rangle\,\langle \mathbf{x}|\mathbf{y}\rangle = (a^2+b^2)\langle \mathbf{x}|\mathbf{y}\rangle^2$

M 9.4.

Tudjuk, hogy $|a\rangle$ és $|b\rangle$ ortonormáltak, tehát $\langle a|a\rangle = \langle b|b\rangle = 1$ és $\langle a|b\rangle = \langle b|a\rangle = 0$.

Ellenőrizzük $|c'\rangle$ átfedését $|a\rangle$-val:

$$\begin{aligned}\langle a|c'\rangle &= \langle a|c\rangle - \underbrace{\langle a|a\rangle}_{1}\langle a|c\rangle - \underbrace{\langle a|b\rangle}_{0}\langle b|c\rangle = \\ &= \langle a|c\rangle - \langle a|c\rangle = 0\end{aligned}$$

Ellenőrizzük $|c'\rangle$ átfedését $|b\rangle$-vel:

$$\begin{aligned}\langle b|c'\rangle &= \langle b|c\rangle - \underbrace{\langle b|a\rangle}_{0}\langle a|c\rangle - \underbrace{\langle b|b\rangle}_{1}\langle b|c\rangle = \\ &= \langle b|c\rangle - \langle b|c\rangle = 0\end{aligned}$$

Vegyük észre, hogy $|c'\rangle$ a $|c\rangle$ Schmidt-ortogonalizáltja.

M 9.5.

a) Ellenőrizzük az ortogonalitást:

$\langle \mathbf{e}_1|\mathbf{e}_2\rangle = -\sqrt{3} + \sqrt{3} = 0$

Normálás:

$\tilde{\mathbf{e}}_1 = \mathbf{e}_1/|\mathbf{e}_1| = \frac{1}{2}\mathbf{e}_1$

$\tilde{\mathbf{e}}_2 = \mathbf{e}_2/|\mathbf{e}_2| = \frac{1}{2}\mathbf{e}_2$

b) $\mathbf{v} = v_1\tilde{\mathbf{e}}_1 + v_2\tilde{\mathbf{e}}_2$

A v_1 és v_2 kifejtési koefficienseket a fenti egyenletet skalárisan szorozva $\tilde{\mathbf{e}}_1$-vel illetve $\tilde{\mathbf{e}}_2$-vel kapjuk:

$v_1 = \langle \tilde{\mathbf{e}}_1|\mathbf{v}\rangle = \frac{1}{2}(0+\sqrt{3}) = \frac{\sqrt{3}}{2}$

$v_2 = \langle \tilde{\mathbf{e}}_2|\mathbf{v}\rangle = \frac{1}{2}(0+1) = \frac{1}{2}$

M 9.6.

$\mathbf{A}^{-1} = \frac{1}{\det\mathbf{A}}\,\mathrm{adj}(\mathbf{A})$,

ahol adj($\mathbf{A}$) elemeit az $\mathbf{A}$ transzponáltjának megfelelő eleméhez tartozó előjeles aldetermináns adja

A fenti kifejezés értelmetlen, ha $\det\mathbf{A} = 0$. Ilyenkor $\mathbf{A}$ nem invertálható. Ebben a példában $\det\mathbf{A} = 2 - 2x$, így $\mathbf{A}$-nak $x = 1$ esetén nem létezik inverze.

Ha $x \neq 1$, az $\mathbf{A}$ inverze:

$\mathbf{A}^{-1} = \frac{1}{2-2x}\begin{pmatrix} 2 & -2 \\ -x & 1 \end{pmatrix}$

($\mathbf{A}$-val szorozva ellenőrizhető, hogy hibáztunk-e.)

Ha elfelejtenénk a mátrix invertálás fent írt képletét, azt bármikor megtehetjük, hogy az inverz mátrix definícióját használjuk. Ekkor egy n^2 ismeretlenes, n^2 egyenletet tartalmazó egyenleterendszert megoldva kapjuk meg az inverz mátrix elemeit (n a mátrix dimenziója). Ebben az esetben a

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 \\ x & 2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

egyenlet alapján az a, b, c, d számokat kell megkeressük. A fenti mátrixegyenlet tkp. négy egyenlet, amiket a mátrixszorzást komponensenként kiírva kapunk meg:

$$\left.\begin{aligned} a+2c&=1\\ ax+2c&=0\\ b+2d&=0\\ bx+2d&=1 \end{aligned}\right\}$$

Lehet ellenőrizni, hogy ezen a úton is ugyanarra az $\mathbf{A}^{-1}$-re jutunk.

M 9.7.

a.)

$\det\mathbf{A} = 200 - 100 = 100$

Az $\mathbf{A}$ karakterisztikus egyenlete:

$(10-\lambda)^2(2-\lambda) - 25(2-\lambda) = 0$,

az egyenlet megoldásai $\lambda_1 = 2, \lambda_2 = 5$ és $\lambda_3 = 15$. Ezek a számok $\mathbf{A}$ sajátértékei.

A sajátvektorokat kaphatjuk például az

$$\begin{pmatrix} 10-\lambda & 5 & 0\\ 5 & 10-\lambda & 0\\ 0 & 0 & 2-\lambda \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x\\ y\\ z\end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0\\0\\0\end{pmatrix}$$

egyenletrendszer megoldásaként.

A normált sajátvektorok rendre:

$$\mathbf{v}_1 = \begin{pmatrix}0\\0\\1\end{pmatrix},\ \mathbf{v}_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\-1\\0\end{pmatrix},\ \mathbf{v}_3 = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\1\\0\end{pmatrix}$$

A példát egyszerűbben is megoldhatjuk, ha észrevesszük, hogy az $\mathbf{A}$ egy 2×2-es és egy 1×1-es mátrix direkt összege. Ezért elegendő a 2×2-es problémát megoldani. A bal felső 2×2-es blokk ráadásul nagyon egyszerű,

$\begin{pmatrix} a & b\\ b & a\end{pmatrix}$ szerkezetű. Könnyen kijön, és hasznos emlékezni rá, hogy az ilyen mátrix sajátértékei $a-b$ és $a+b$, a megfelelő (normálatlan) sajátvektorok pedig $(1,-1)$ és $(1,1)$.

b.)

$\det\mathbf{B} = 3 + 3i$

Mint az előző $\mathbf{A}$ mátrix esetén, itt is egy 2×2-es és egy 1 dimenziós mátrix direkt összege áll. Rögtön kiolvasható, hogy az egyik sajátérték $\lambda_1 = 3$, a hozzá tartozó sajátvektor $\mathbf{v}_1 = \begin{pmatrix}0\\1\\0\end{pmatrix}$.

Az első és a harmadik sor ill. oszlop adta 2×2-es mátrix karakterisztikus egyenlete

$(1-\lambda)^2 + i = 0$,

ennek megoldása a másik két sajátérték, $\lambda_{2,3} = 1 \pm i\sqrt{i}$. Mivel a mátrix nem szimmetrikus, a λ_2-höz ill. a λ_3-hoz tartozó bal-és jobboldali sajátvektorok nem egyeznek meg. A sajátértékegyenletbe helyettesítve kapjuk, hogy az $1+i\sqrt{i}$-hez tartozó jobboldali sajátvektor

$$\mathbf{v}_2 = \frac{1}{\sqrt{1-i}}\begin{pmatrix}-i\sqrt{i}\\0\\1\end{pmatrix},$$

a balodali $\mathbf{u}_2 = \frac{1}{\sqrt{1+i}}\left(\sqrt{i}, 0, 1\right)$.

A $1 - i\sqrt{i}$ sajátértékhez tartozó jobboldali sajátvektor

$$\mathbf{v}_3 = \frac{1}{\sqrt{1-i}}\begin{pmatrix}i\sqrt{i}\\0\\1\end{pmatrix},$$

a balodali $\mathbf{u}_2 = \frac{1}{\sqrt{1+i}}\left(-\sqrt{i}, 0, 1\right)$.

M 9.8.

$$\mathbf{AB} = \begin{pmatrix} 11 & 20\\ 8 & 15\end{pmatrix} \qquad \mathbf{BA} = \begin{pmatrix} 3 & 4\\ 16 & 23\end{pmatrix}$$

$$[\mathbf{A},\mathbf{B}] = \mathbf{AB} - \mathbf{BA} = \begin{pmatrix} 8 & 16\\ -8 & -8\end{pmatrix} = 8\begin{pmatrix} 1 & 2\\ -1 & -1\end{pmatrix}$$

M 9.9.

1. $(\mathbf{AB})_{ik} = \sum_j A_{ij}B_{jk}$

   Mivel $\mathbf{A}$ és $\mathbf{B}$ diagonális, $A_{ik} = \delta_{ik}A_i$ és $B_{jk} = \delta_{jk}B_j$. Ezt kihasználva a szorzat ik-adik elemére kapjuk:

   $(\mathbf{AB})_{ik} = \sum_j \delta_{ij}A_i\delta_{jk}B_j = \delta_{ik}A_iB_i$

   Fordított sorrendben szorozva :

   $(\mathbf{BA})_{ik} = \sum_j \delta_{ij}B_i\delta_{jk}A_j = \delta_{ik}A_iB_i$

   Két diagonális mátrix szorzása tehát felcserélhető.

2. A különbség az előző ponthoz képest, hogy csak az $\mathbf{A}$ diagonális. Az $\mathbf{AB}$ szorzat ik-adik eleme ekkor:

   $(\mathbf{AB})_{ik} = \sum_j \delta_{ij}A_iB_{jk} = A_iB_{ik}$

   A fordított sorrendű szorzat ik-adik eleme: $(\mathbf{BA})_{ik} = \sum_j B_{ij}\delta_{jk}A_j = B_{ik}A_k \neq (\mathbf{AB})_{ik}$.

   Egy általános és egy diagonális mátrix szorzása tehát nem cserélhető fel.

M 9.10.

Az $\mathbf{A}$ és a $\mathbf{B}$ mátrix is forgásmátrix. A z tengely körül, α szöggel forgat az $\mathbf{A}$, β-val a $\mathbf{B}$ mátrix. Mivel az azonos tengely körüli két forgatás sorrendje felcserélhető, a két mátrix kommutál.

Szorzással ellenőrizve:

$\mathbf{AB} =$

$$= \begin{pmatrix} \cos\alpha\cos\beta - \sin\alpha\sin\beta & -\sin\beta\cos\alpha - \sin\alpha\cos\beta & 0 \\ \cos\beta\sin\alpha + \sin\beta\cos\alpha & -\sin\alpha\sin\beta + \cos\alpha\cos\beta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$= \mathbf{BA} = \begin{pmatrix} \cos(\alpha+\beta) & -\sin(\alpha+\beta) & 0 \\ \sin(\alpha+\beta) & \cos(\alpha+\beta) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

M 9.11.
A valós unitér mátrixokat ortogonális mátrixoknak is nevezik. Ortogonális mátrix sorai ill. oszlopai egymásra merőlegesek és egyre normáltak. Ezt ellenőrizzük. Az oszlopok normája:

1. $1/3 + 4/6 = 1$
2. $1/3 + 1/6 + 1/2 = 1$
3. $1/3 + 1/6 + 1/2 = 1$

A sorok normája:

1. $1/3 + 1/3 + 1/3 = 1$
2. $4/6 + 1/6 + 1/6 = 1$
3. $1/2 + 1/2 = 1$

Az oszlopok átfedése:

$\langle 1|2\rangle \quad -1/3 + 2/6 = 0$

$\langle 1|3\rangle \quad -1/3 + 2/6 = 0$

$\langle 2|3\rangle \quad 1/3 + 1/6 - 1/2 = 0$

A sorok átfedése:

$\langle 1|2\rangle \quad -2/\sqrt{18} + 1/\sqrt{18} + 1/\sqrt{18} = 0$

$\langle 1|3\rangle \quad 1/\sqrt{6} - 1/\sqrt{6} = 0$

$\langle 2|3\rangle \quad 1/\sqrt{12} - 1/\sqrt{12} = 0$

Ortogonális mátrix inverze egyenlő a transzponáltjával:

$$\mathbf{A}^{-1} = \begin{pmatrix} -\frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{2}{\sqrt{6}} & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{1}{\sqrt{6}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}$$

Szorzással lehet ellenőrizni, hogy tényleg ez az inverz.

M 9.12.
A síkban 30^o-kal, pozitív irányba forgató mátrix:

$$\begin{pmatrix} \cos(30^o) & -\sin(30^o) \\ \sin(30^o) & \cos(30^o) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sqrt{3}/2 & -1/2 \\ 1/2 & \sqrt{3}/2 \end{pmatrix}$$

Az elforgatott $\mathbf{v}$ vektor:

$$\mathbf{v}' = \begin{pmatrix} \sqrt{3}/2 & -1/2 \\ 1/2 & \sqrt{3}/2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ \sqrt{3} \end{pmatrix} =$$

$$= \begin{pmatrix} \sqrt{3}/2 - \sqrt{3}/2 \\ 1/2 + 3/2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

M 9.13.

1. diagonalizálás ($\mathbf{D} = \mathbf{U}^T\mathbf{A}\mathbf{U}$)
2. kiszámítjuk $\cos\mathbf{D}$ -t
3. visszatranszformálás az eredeti bázisba ($\cos\mathbf{A} = \mathbf{U}\cos(\mathbf{D})\,\mathbf{U}^T$)

A $\mathbf{D}$ diagonális mátrix, $\mathbf{A}$ sajátértékeit tartalmazza. Az $\mathbf{U}$ mátrix oszlopai az $\mathbf{A}$ normált sajátvektorai. A $\mathbf{D}$ és az $\mathbf{U}$ mátrix ebben az esetben:

$$\mathbf{D} = \frac{\pi}{4}\begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 3 \end{pmatrix} \quad \text{és} \quad \mathbf{U} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix}$$

A $\mathbf{D}$ cosinusza:

$$\cos\mathbf{D} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Az $\mathbf{A}$ cosinusza:

$$\cos\mathbf{A} = \frac{1}{2\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} =$$

$$= -\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

M 9.14.
$(\hat{A} + \hat{B})^2 = \hat{A}^2 + \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A} + \hat{B}^2$
A fenti egyenlőség csak akkor volna tovább írható, mint $\hat{A}^2 + 2\hat{A}\hat{B} + \hat{B}^2$, ha $\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A}$, azaz $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$ fennállna.

M 9.15.
$[\hat{B}, \hat{C}] = \hat{B}\hat{C} - \hat{C}\hat{B}$

$[\hat{A}, [\hat{B}, \hat{C}]] = \hat{A}[\hat{B}, \hat{C}] - [\hat{B}, \hat{C}]\hat{A} =$
$= \hat{A}\hat{B}\hat{C} - \hat{A}\hat{C}\hat{B} - \hat{B}\hat{C}\hat{A} + \hat{C}\hat{B}\hat{A}$

$[\hat{A}, [\hat{B}, \hat{C}]] + [\hat{B}, [\hat{C}, \hat{A}]] + [\hat{C}, [\hat{A}, \hat{B}]] =$
$= \hat{A}\hat{B}\hat{C} - \hat{A}\hat{C}\hat{B} - \hat{B}\hat{C}\hat{A} + \hat{C}\hat{B}\hat{A} +$
$+ \hat{B}\hat{C}\hat{A} - \hat{B}\hat{A}\hat{C} - \hat{C}\hat{A}\hat{B} + \hat{A}\hat{C}\hat{B} +$
$+ \hat{C}\hat{A}\hat{B} - \hat{C}\hat{B}\hat{A} - \hat{A}\hat{B}\hat{C} + \hat{B}\hat{A}\hat{C} = 0$

M 9.16.
Az inverz operátor definíciójából indulunk ki:
$(\hat{A}\hat{B})^{-1}\hat{A}\hat{B} = 1$
Szorozva az egyenletet jobbról $\hat{B}^{-1}$-zel,
$(\hat{A}\hat{B})^{-1}\hat{A} = \hat{B}^{-1}$,
szorozva jobbról $\hat{A}^{-1}$-zel:
$(\hat{A}\hat{B})^{-1} = \hat{B}^{-1}\hat{A}^{-1}$ QED

M 9.17.
Az adjungált operátor definíciója:

$\langle f|(\hat{A}\hat{B})^\dagger g\rangle = \langle \hat{A}\hat{B}f|g\rangle$,
tetszőleges f és g függvényekre az $\hat{A}$ és $\hat{B}$ értelmezési tartományából.
A jobb oldalon álló skaláris szorzatban adjungáljuk $\hat{A}$-t:
$\langle \hat{A}\hat{B}f|g\rangle = \langle \hat{B}f|\hat{A}^\dagger g\rangle$, majd adjungáljuk $\hat{B}$-t:
$\langle \hat{A}\hat{B}f|g\rangle = \langle f|\hat{B}^\dagger\hat{A}^\dagger g\rangle$.
Azt kaptuk tehát, hogy $\langle f|(\hat{A}\hat{B})^\dagger g\rangle = \langle f|\hat{B}^\dagger\hat{A}^\dagger g\rangle$ tetszőleges f-re és g-re, amiből következik, hogy
$(\hat{A}\hat{B})^\dagger = \hat{B}^\dagger\hat{A}^\dagger$ QED

M 9.18.
Ha $\hat{A}$ lineáris, akkor tetszőleges α, β valós számokra ill. tetszőleges f, g függvényekre $\hat{A}$ értelmezési tartományából
$\hat{A}(\alpha f + \beta g) = \alpha\hat{A}f + \beta\hat{A}g$ fennáll.

Ugyanezt ellenőrizzük $\hat{A}^2$-re:

$$\begin{aligned}\hat{A}^2(\alpha f + \beta g) &= \hat{A}\left(\hat{A}(\alpha f + \beta g)\right) = \\ &= \hat{A}\left(\alpha\hat{A}f + \beta\hat{A}g\right) = \alpha\hat{A}\hat{A}f + \beta\hat{A}\hat{A}g = \\ &= \alpha\hat{A}^2 f + \beta\hat{A}^2 g\end{aligned}$$

Ha tehát $\hat{A}$ lineáris, akkor $\hat{A}^2$ is lineáris.

M 9.19.

a) $\langle f|(\hat{A} + \hat{B})^\dagger g\rangle = \langle(\hat{A} + \hat{B})f|g\rangle = \langle\hat{A}f|g\rangle + \langle\hat{B}f|g\rangle = \langle f|\hat{A}g\rangle + \langle f|\hat{B}g\rangle = \langle f|(\hat{A} + \hat{B})g\rangle$
A fenti egyenlőségek írásakor rendre az alábbiakat használtuk:

- adjungált operátor definíciója
- skaláris szorzás additivitása
- $\hat{A}$ és $\hat{B}$ önadjungált
- skaláris szorzás additivitása

Mivel a fenti egyenlet tetszőleges f és g függvényekre igaz az $\hat{A}$ és $\hat{B}$ értelmezési tartományából, ezért következik, hogy $(\hat{A}+\hat{B})^\dagger = \hat{A} + \hat{B}$. Hermitikus operátorok összege tehát hermitikus.

b) $\langle f|(\alpha\hat{A} + \beta\hat{B})^\dagger g\rangle = \langle(\alpha\hat{A} + \beta\hat{B})f|g\rangle = \langle\alpha\hat{A}f|g\rangle + \langle\beta\hat{B}f|g\rangle = \alpha^*\langle f|\hat{A}g\rangle + \beta^*\langle f|\hat{B}g\rangle = \langle f|\alpha^*\hat{A}g\rangle + \langle f|\beta^*\hat{B}g\rangle = \langle f|(\alpha^*\hat{A} + \beta^*\hat{B})g\rangle$
A fenti egyenlőségek írásakor rendre az alábbiakat használtuk:

- adjungált operátor definíciója
- skaláris szorzás additivitása
- $\hat{A}$ és $\hat{B}$ önadjungált; skaláris szorzat homogenitása
- skaláris szorzat homogenitása
- skaláris szorzás additivitása

Mivel f és g tetszőleges, ebből következik, hogy hermitikus operátorok valós együtthatós lineáris kombinációja hermitikus.

c) Tudjuk, hogy $(\hat{A}\hat{B})^\dagger = \hat{B}^\dagger\hat{A}^\dagger$ (lásd **9.17.** példa). Felhasználva, hogy $\hat{A}$ és $\hat{B}$ önadjungált, $(\hat{A}\hat{B})^\dagger = \hat{B}\hat{A}$. Hermitikus operátorok szorzata ezért akkor hermitikus, ha kommutálnak (ekkor u.i. $\hat{B}\hat{A} = \hat{B}\hat{A}$).

M 9.20.
Az egyenes 1-re normált irányvektora:
$\langle\mathbf{n}| = \frac{1}{\sqrt{10}}(1, 3)$
Az egyenesre vetítő projekciós operátor:
$\hat{P} = |\mathbf{n}\rangle\langle\mathbf{n}|$
A $\mathbf{v}$ vektornak az egyenesre eső vetülete:

$$\hat{P}|\mathbf{v}\rangle = |\mathbf{n}\rangle\langle\mathbf{n}|\mathbf{v}\rangle = \tfrac{1}{10}\begin{pmatrix}1\\3\end{pmatrix}\langle(1,3)|\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix}\rangle = \tfrac{1}{10}\begin{pmatrix}1\\3\end{pmatrix}4 = \tfrac{2}{5}\begin{pmatrix}1\\3\end{pmatrix}$$

A feladat nem kérdezi, de a projektor mátrixát is fel tudjuk írni:

$$\mathbf{P} = \tfrac{1}{10}\begin{pmatrix}1\\3\end{pmatrix}(1,3) = \begin{pmatrix}1 & 3\\3 & 9\end{pmatrix}$$

Vektoroknak ezt a fajta szorzását („oszlop-sor”, a szokásos „sor-oszlop” skaláris szorzással szemben), diadikus szorzásnak nevezik. Míg a skaláris szorzás eredménye szám, a diadikus szorzással mátrixot kapunk.

M 9.21.
Az $(1 + \hat{P})$ invertálható, ha nincs 0 sajátértéke (u.i. a determináns a sajátértékek szorzata). Az $(1 + \hat{P})$-nek minden sajátértéke nagyobb egyenlő egy (u.i. az egységoperátor minden sajátértéke egy, a $\hat{P}$ sajátértékei pedig nem negatívak), ezért invertálható.

Ellenőrizzük, hogy valóban $(1 - \dfrac{\hat{P}}{2})$ az inverz:

$$(1+\hat{P})(1-\frac{\hat{P}}{2}) = 1+\hat{P}-\frac{\hat{P}}{2}-\frac{\hat{P}^2}{2} = 1+\hat{P}-2\frac{\hat{P}}{2} = 1$$

M 9.22.

a) Az egységoperátor spektrális alakja:
$\hat{I} = \sum_i |i\rangle\langle i|$. A $\hat{T}$ operátor:
$\hat{T} = \hat{I} - 2\hat{P} = \sum_i |i\rangle\langle i| - 2|k\rangle\langle k| =$
$= \sum_{i\neq k} |i\rangle\langle i| - |k\rangle\langle k|$
Az utóbbi a $\hat{T}$ operátor spektrális alakja, ebből leolvasható, hogy a $\hat{T}$ sajátértéke 1 vagy -1 lehet (-1 tartozik a $|k\rangle$ sajátvektorhoz, 1 az összes többihez).

b) $\hat{T}^2 = (\hat{I} - 2\hat{P})^2 = \hat{I}^2 - 4\hat{P} + 4\hat{P}^2 = \hat{I}$

M 9.23.

$$\hat{P}^2 = \tfrac{1}{4}(\hat{I}+\hat{T})(\hat{I}+\hat{T}) = \tfrac{1}{4}(\hat{I}^2 + \hat{I}\hat{T} + \hat{T}\hat{I} + \hat{T}^2) = = \tfrac{1}{4}(\hat{I} + 2\hat{T} + \hat{I}) = \tfrac{1}{2}(\hat{I}+\hat{T}) = \hat{P}$$

$$\hat{Q} = \hat{I} - \hat{P} = \hat{I} - \tfrac{1}{2}\hat{I} - \tfrac{1}{2}\hat{T} = \tfrac{1}{2}(\hat{I} - \hat{T})$$

M 9.24.

$\exp\hat{P} = \hat{I} + \hat{P} + \hat{P}^2/2! + \hat{P}^3/3! + \cdots =$
$= \hat{I} + \hat{P} + \hat{P}/2! + \hat{P}/3! + \cdots =$
$= \hat{I} + \hat{P}(1 + 1/2! + 1/3! + \ldots) = \hat{I} + \hat{P}(e-1)$

M 9.25.

A $\hat{Q}$ mátrixa az $|u\rangle$, $|v\rangle$ bázisán:

$$\mathbf{Q} = \begin{pmatrix} \langle u|\hat{Q}u\rangle & \langle u|\hat{Q}v\rangle \\ \langle v|\hat{Q}u\rangle & \langle v|\hat{Q}v\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Ugyanis az $1,1$ komponens például:
$\langle u|\hat{Q}u\rangle = \langle u|u\rangle\,\langle v|u\rangle = 1\cdot 0 = 0.$
Itt kihasználtuk, hogy $|u\rangle$, $|v\rangle$ ortogonálisok, és normáltak.

A $\hat{Q}$ spúrja $\mathrm{Sp}(\hat{Q}) = 0$, a diagonális elemek összege.

M 9.26.

a) $\hat{s}_x|\alpha\rangle = \frac{1}{2}\left(|\alpha\rangle\langle\beta|\alpha\rangle + |\beta\rangle\langle\alpha|\alpha\rangle\right) =$
$= \frac{1}{2}\left(0|\alpha\rangle + 1|\beta\rangle\right) = \frac{1}{2}|\beta\rangle$

$\hat{s}_x|\beta\rangle = \frac{1}{2}\left(|\alpha\rangle\langle\beta|\beta\rangle + |\beta\rangle\langle\alpha|\beta\rangle\right) =$
$= \frac{1}{2}\left(1|\alpha\rangle + 0|\beta\rangle\right) = \frac{1}{2}|\alpha\rangle$

$\langle\alpha|\hat{s}_x\alpha\rangle = \frac{1}{2}\langle\alpha|\beta\rangle = 0$
$\langle\beta|\hat{s}_x\alpha\rangle = \frac{1}{2}\langle\beta|\beta\rangle = 1/2$
$\langle\alpha|\hat{s}_x\beta\rangle = \frac{1}{2}\langle\alpha|\alpha\rangle = 1/2$
$\langle\beta|\hat{s}_x\beta\rangle = \frac{1}{2}\langle\beta|\alpha\rangle = 0$

$$\mathbf{s}_x = \begin{pmatrix} \langle\alpha|\hat{s}_x\alpha\rangle & \langle\alpha|\hat{s}_x\beta\rangle \\ \langle\beta|\hat{s}_x\alpha\rangle & \langle\beta|\hat{s}_x\beta\rangle \end{pmatrix} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Hasonlóan:

$$\mathbf{s}_y = \frac{i}{2}\begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \qquad \mathbf{s}_z = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

b) $\hat{s}_y\hat{s}_z = \frac{i}{4}\left(|\beta\rangle\langle\alpha| - |\alpha\rangle\langle\beta|\right)\left(|\alpha\rangle\langle\alpha| - |\beta\rangle\langle\beta|\right) =$
$= \frac{i}{4}\left(|\beta\rangle\langle\alpha|\alpha\rangle\langle\alpha| - |\beta\rangle\langle\alpha|\beta\rangle\langle\beta| - |\alpha\rangle\langle\beta|\alpha\rangle\langle\alpha| +\right.$
$\left. + |\alpha\rangle\langle\beta|\beta\rangle\langle\beta|\right) = \frac{i}{4}\left(|\beta\rangle\langle\alpha| + |\alpha\rangle\langle\beta|\right)$

$\hat{s}_z\hat{s}_y = \frac{i}{4}\left(|\alpha\rangle\langle\alpha| - |\beta\rangle\langle\beta|\right)\left(|\beta\rangle\langle\alpha| - |\alpha\rangle\langle\beta|\right) =$
$= \frac{i}{4}\left(|\alpha\rangle\langle\alpha|\beta\rangle\langle\alpha| - |\alpha\rangle\langle\alpha|\alpha\rangle\langle\beta| - |\beta\rangle\langle\beta|\beta\rangle\langle\alpha| +\right.$
$\left. + |\beta\rangle\langle\beta|\alpha\rangle\langle\beta|\right) = \frac{i}{4}\left(-|\alpha\rangle\langle\beta| - |\beta\rangle\langle\alpha|\right)$

$[\hat{s}_y, \hat{s}_z] = \hat{s}_y\hat{s}_z - \hat{s}_z\hat{s}_y =$
$= \frac{i}{2}\left(|\beta\rangle\langle\alpha| + |\alpha\rangle\langle\beta|\right) = i\hat{s}_x$
Hasonlóan látható a másik két kommutátor.

c)

$$\mathbf{s}_x\mathbf{s}_y = \frac{i}{4}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \qquad \mathbf{s}_y\mathbf{s}_x = \frac{i}{4}\begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$[\mathbf{s}_x, \mathbf{s}_y] = \mathbf{s}_x\mathbf{s}_y - \mathbf{s}_y\mathbf{s}_x = \frac{i}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = i\mathbf{s}_z$$

Hasonlóan kijön a másik kettő is.

d) $\hat{s}_+ = |\alpha\rangle\langle\beta|$ és $\hat{s}_- = |\beta\rangle\langle\alpha|$

$$\mathbf{s}_+ = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \text{és} \quad \mathbf{s}_- = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

A léptető operátorok $\hat{s}_x$, $\hat{s}_y$-nal kifejezve:

$\hat{s}_+ = \hat{s}_x + i\hat{s}_y$ és $\hat{s}_- = \hat{s}_x - i\hat{s}_y$

M 9.27.

Projekciós operátor idempotens, azaz $\hat{P}^2 = \hat{P}$.
Tegyük fel, hogy $\hat{P}$ hermitikus. Ekkor a spektrális felbontása:

$$\hat{P} = \sum_i p_i|i\rangle\langle i|$$

ahol az $|i\rangle$ vektorok – $\hat{P}$ sajátvektorai – egymásra ortogonálisok és normáltak, azaz $\langle i|j\rangle = \delta_{ij}$. A p_i-k $\hat{P}$ sajátértékei, valós számok.

Kihasználva hogy $\hat{P}$ idempotens:

$\sum_i p_i|i\rangle\langle i| = \sum_{i,j} p_i p_j |i\rangle\langle i|j\rangle\langle j| = \sum_i p_i^2|i\rangle\langle i|$

Ebből következik, hogy minden i-re $p_i^2 = p_i$, ami a valós számok körében 0-ra és 1-re igaz. Projekciós operátor sajétértéke tehát 0 vagy 1 lehet.

(Ha $\hat{P}$ nem hermitikus, akkor a spektrális felbontása $\hat{P} = \sum_i p_i|v_i\rangle\langle u_i|$ alakú, ahol a p_i sajátértékek nem feltétlenül valósak. A $|v_i\rangle$-k a $\hat{P}$ jobboldali sajátvektorai (azaz $\hat{P}|v_i\rangle = p_i|v_i\rangle$), $\langle u_i|$-k a baloldali sajátvektorok (azaz $\langle u_i|\hat{P} = \langle u_i|p_i$). A bal- és jobboldali sajátvektorok biortogonális rendszert alkonak, vagyis $\langle u_i|v_j\rangle = \delta_{ij}$. Azonban $\langle v_i|v_j\rangle = S_{ij} \neq \delta_{ij}$, és hasonlóan az $\langle u_i|$ vektorok sem ortonormáltak. A baloldali sajátértékegyenletbe helyettesítve ellenőrizhető, hogy az $\langle u_i|$ vektorok előállnak, mint $\langle u_i| = \sum_j \left(S^{-1}\right)_{ij}\langle v_j|$. A $\hat{P}$ projektor sajátértértékeire az idempotenciát felhasználva ekkor is 0-t vagy 1-et kapunk, mivel a $p_i = p_i^2$ egyenletnek a komplex számok körében is ezek a megoldásai.)

M 9.28.
Az $\hat{U}$ sajátértékegyenlete jobbról:
$\hat{U}|i\rangle = \lambda_i|i\rangle$.
Az egyenletet adjungálva:
$\langle i|\hat{U}^\dagger = \langle i|\lambda_i^*$.
Szorozzuk a második egyenletet jobbról az első egyenlettel:
$\langle i|\hat{U}^\dagger\hat{U}|i\rangle = \langle i|\lambda_i^*\lambda_i|i\rangle$.
Mivel $\hat{U}$ unitér, $\hat{U}^\dagger\hat{U} = \hat{I}$ ($\hat{I}$ az egységoperátor). Ezért a fenti egyenlet az alábbiak szerint írható tovább:
$\langle i|i\rangle = \lambda_i^*\lambda_i\langle i|i\rangle$.
Az $\langle i|i\rangle$ skalárszorzat nem 0 (u.i. a nullvektor nem lehet sajátvektor), ezért $\langle i|i\rangle$-vel egyszerűsíthetünk.
Kapjuk tehát, hogy:
$1 = \lambda_i^*\lambda_i$ QED

M 9.29.
tömör megoldás:
$\hat{U}^\dagger = e^{-i\hat{G}^\dagger} = e^{-i\hat{G}} = \left(e^{i\hat{G}}\right)^{-1} = \hat{U}^{-1}$ QED
A második egyenlőségnél használtuk ki, hogy $\hat{G}$ hermitikus.

részletesebb megoldás, spektrális felbontással:

$$\hat{G} = \sum_j g_j|j\rangle\langle j|$$

$$i\hat{G} = \sum_j ig_j|j\rangle\langle j|$$

$$e^{i\hat{G}} = \sum_j e^{ig_j}|j\rangle\langle j|$$

$$\left(e^{i\hat{G}}\right)^\dagger = \sum_j \left(e^{ig_j}\right)^*|j\rangle\langle j| = \sum_j e^{-ig_j}|j\rangle\langle j|$$

Az utolsó egyenlőség igaz, mivel g_j-k valós számok (u.i. $\hat{G}$ hermitikus). Ellenőrizzük, hogy $\left(e^{i\hat{G}}\right)^\dagger$ egyenlő-e $e^{i\hat{G}}$ inverzével:

$$e^{i\hat{G}}\left(e^{i\hat{G}}\right)^\dagger = \sum_{j,k} e^{ig_j}e^{-ig_k}|j\rangle\langle j|k\rangle\langle k| =$$

$$= \sum_j e^{ig_j-ig_k}|j\rangle\delta_{jk}\langle k| = \sum_j |j\rangle\langle j| = \hat{I}$$

QED

M 9.30.

1. $f_1(x)$ nem eleme, mert $f_1^2(x) = x^4 - \frac{2}{3}x^2 + \frac{1}{9}$ nem tűnik el $\pm\infty$-ben, ezért nem integrálható $-\infty$-től ∞-ig
2. $f_2(x)$ nem eleme, mert $f_2^2(x) = e^{-2x}$ nem tűnik el $-\infty$-ben
3. $f_3(x)$ eleme, mert $f_3^2(x) = e^{-x^2}$ elég gyorsan eltűnik $\pm\infty$-ben
4. $f_4(x)$ nem eleme, mert $f_4^2(x) = e^{x^2}$ nem tűnik el $\pm\infty$-ben

---

M 9.31.

$$||y||^2 = \int_{-\pi/2}^{\pi/2} y^2(x)\,\mathrm{d}x = \int_{-\pi/2}^{\pi/2}\cos(x)\,\mathrm{d}x =$$

$$= [\sin(x)]_{-\pi/2}^{\pi/2} = 1 + 1 = 2$$

$||y|| = \sqrt{2}$

$\tilde{y} = y/||y|| = \frac{1}{\sqrt{2}}\sqrt{\cos(x)}$

M 9.32.

$$\langle f(x)|g(x)\rangle = \int_0^1 f^*(x)g(x)\,\mathrm{d}x =$$

$$= \int_0^1 (2x + 3x^4)(x^3 - 5x^2)\,\mathrm{d}x =$$

$$= \int_0^1 (2x^4 + 3x^7 - 10x^3 - 15x^6)\,\mathrm{d}x =$$

$$= 2\left[\frac{x^5}{5}\right]_0^1 + 3\left[\frac{x^8}{8}\right]_0^1 - 10\left[\frac{x^4}{4}\right]_0^1 - 15\left[\frac{x^7}{7}\right]_0^1 =$$

$$= \frac{2}{5} + \frac{3}{8} - \frac{10}{4} - \frac{15}{7} = -\frac{1083}{280}$$

M 9.33.

$d(f(x), g(x)) = ||f-g|| =$
$= \sqrt{\langle f(x)-g(x)|f(x)-g(x)\rangle} =$
$= \int_0^1 (2x+3x^4-x^3+5x^2)\,\mathrm{d}x = 2\frac{1}{2}+3\frac{1}{5}-\frac{1}{4}+5\frac{1}{3} =$
$= \frac{181}{60}$

M 9.34.

$A\cdot = \langle f_1|f_1\rangle = \int_0^\infty e^{-2x^2}\,\mathrm{d}x = \sqrt{\frac{\pi}{2}}\frac{1}{2}$

$B\cdot = \langle f_2|f_2\rangle = \langle f_1|f_3\rangle = \int_0^\infty x^2 e^{-2x^2}\,\mathrm{d}x = \sqrt{\frac{\pi}{2}}\frac{1}{8}$

$C\cdot = \langle f_3|f_3\rangle = \int_0^\infty x^4 e^{-2x^2}\,\mathrm{d}x = \sqrt{\frac{\pi}{2}}\frac{3}{32}$

$D\cdot = \langle f_1|f_2\rangle = \int_0^\infty x e^{-2x^2}\,\mathrm{d}x = \frac{1}{4}$

$\langle f_2|f_3\rangle = \int_0^\infty x^3 e^{-2x^2}\,\mathrm{d}x = \frac{1}{4} = D$

a) A függvényeket Schmidt szerint ortogonalizáljuk. (Lehetne ezen kívül Löwdin féle szimmetrikus ortogonalizációval, vagy az átfedési mátrixot diagonalizálva. Az utóbbit kanonikus ortogonalizációnak hívják.) Először normáljuk f_1-et:
$\tilde{f}_1 = f_1/\sqrt{A}$
Az ortogonalizált rendszer első eleme $\tilde{f}_1$. Az f_1-re vetítő projektor:
$\hat{P}_1 = |\tilde{f}_1\rangle\langle\tilde{f}_1|$
Kivetítjük f_2-ből az f_1-gyel párhuzamos komponenst:
$f_{2,ort} = f_2 - \hat{P}_1 f_2 = f_2 - f_1\frac{\langle f_1|f_2\rangle}{A} = f_2 - \frac{D}{A}f_1$
Normáljuk $f_{2,ort}$-ot:
$||f_{2,ort}||^2 = B - 2\frac{D}{A}D + \frac{D^2}{A^2}A = B - \frac{D^2}{A}$
$\tilde{f}_2 = f_{2,ort}/||f_{2,ort}|| = \sqrt{\frac{A}{AB-D^2}}\left(f_2 - \frac{D}{A}f_1\right)$
Az ortogonalizált rendszer második eleme $\tilde{f}_2$. Az $\tilde{f}_2$-re vetítő projektor:
$\hat{P}_2 = |\tilde{f}_2\rangle\langle\tilde{f}_2| = \frac{A}{AB-D^2}|f_2 - \frac{D}{A}f_1\rangle\langle f_2 - \frac{D}{A}f_1|$
Kivetítjük f_3-ból az f_1-gyel és az $\tilde{f}_2$-vel párhuzamos komponenst:
$f_{3,ort} = f_3 - \hat{P}_1 f_3 - \hat{P}_2 f_3 =$
$= f_3 + \frac{D^2-B^2}{AB-D^2}f_1 - \frac{D(A-B)}{AB-D^2}f_2$
Normáljuk $f_{3,ort}$-ot:
$||f_{3,ort}||^2 = \left(C(AB-D^2)^2 + B^3D^2 + 2B^2AD^2 - \right.$
$\left. -B^4A - D^2A^2B - 2D^4B\right) / \left(AB-D^2\right)^2$
$\tilde{f}_3 = f_{3,ort}/||f_{3,ort}||$
Az ortogonalizált rendszer harmadik eleme $\tilde{f}_3$.

b) Az $\tilde{f}_1(x), \tilde{f}_2(x), \tilde{f}_3(x)$ bázison kifejtve az $f(x)$ függvényt: $\overline{f(x)} = g_1\tilde{f}_1(x) + g_2\tilde{f}_2(x) + g_3\tilde{f}_3(x)$, ahol a g_1, g_2, g_3 koefficienseket rendre az
$g_1 = \langle e^{-x}|\tilde{f}_1(x)\rangle = \int_0^\infty e^{-x}\tilde{f}_1(x)\,\mathrm{d}x$
$g_2 = \langle e^{-x}|\tilde{f}_2(x)\rangle = \int_0^\infty e^{-x}\tilde{f}_2(x)\,\mathrm{d}x$
$g_3 = \langle e^{-x}|\tilde{f}_3(x)\rangle = \int_0^\infty e^{-x}\tilde{f}_3(x)\,\mathrm{d}x$
integrálok adják.

M 9.35.

A $\hat{D}$ önadjungált, ha $\langle f|\hat{D}g\rangle = \langle\hat{D}f|g\rangle$ tetszőleges f-re és g-re az értelmezési tartományból.

1. $\langle f|\hat{D}_1 g\rangle = \int_{-\infty}^\infty f^* g'\,\mathrm{d}x =$
$= [f^* g]_{-\infty}^\infty - \int_{-\infty}^\infty f^{*\prime} g\,\mathrm{d}x = -\langle\hat{D}_1 f|g\rangle$
u.i. $[f^* g]_{-\infty}^\infty$ nulla, ha f és g $L_2(-\infty,\infty)$-beli. Kihasználtuk azt is, hogy a deriválás és a komplex konjugálás felcserélhető műveletek. A $\hat{D}_1$ tehát nem hermitikus, hanem úm. antihermitikus.

2. $\langle f|\hat{D}_2 g\rangle = \int_{-\infty}^\infty f^* g''\,\mathrm{d}x =$
$= [f^* g']_{-\infty}^\infty - \int_{-\infty}^\infty f^{*\prime} g'\,\mathrm{d}x =$
$= [f^* g']_{-\infty}^\infty - [f^{*\prime} g]_{-\infty}^\infty + \int_{-\infty}^\infty f^{*\prime\prime} g\,\mathrm{d}x =$
$= \langle\hat{D}_2 f|g\rangle$
u.i. $[f^* g']_{-\infty}^\infty$ és $[f^{*\prime} g]_{-\infty}^\infty$ nulla, ha f és g $L_2(-\infty,\infty)$-beli. A $\hat{D}_2$ tehát hermitikus.

3. $\langle f|\hat{D}_3 g\rangle = i\int_{-\infty}^\infty f^* g'\,\mathrm{d}x$
$= i\,[f^* g]_{-\infty}^\infty - i\int_{-\infty}^\infty f^{*\prime} g\,\mathrm{d}x = \langle\hat{D}_3 f|g\rangle$
Magyarázat: mint az első pontban. A $\hat{D}_3$ tehát hermitikus.

4. $\langle f|\hat{D}_4 g\rangle = i\int_{-\infty}^\infty f^* g''\,\mathrm{d}x =$
$= i\,[f^* g']_{-\infty}^\infty - i\int_{-\infty}^\infty f^{*\prime} g'\,\mathrm{d}x =$
$= i\,[f^* g']_{-\infty}^\infty - i\,[f^{*\prime} g]_{-\infty}^\infty + i\int_{-\infty}^\infty f^{*\prime\prime} g\,\mathrm{d}x =$
$= -\langle\hat{D}_4 f|g\rangle$
Magyarázat: mint a második pontban. A $\hat{D}_4$ tehát antihermitikus.

M 9.36.
Az f függvény:
$$f(x) = \begin{cases} 1 & \text{ha } 0 < x < \pi/2 \text{ vagy } \pi < x < 3\pi/2 \\ -1 & \text{ha } \pi/2 < x < \pi \text{ vagy } 3\pi/2 < x < 2\pi \end{cases}$$

Az f Fourier sorfejtése az adott bázison:
$$|\overline{f}\rangle = I|f\rangle = \sum_{i=1}^{5} |\phi_i\rangle\langle\phi_i|f\rangle$$

Az f páratlan függvény, ezért páros függvényekkel számított integrálja nulla. A Fourier sor együtthatóit adó integrálok közül így $\langle\phi_1|f\rangle$, $\langle\phi_2|f\rangle$ és $\langle\phi_4|f\rangle$ nulla. (Lehet ellenőrizni.) A páratlan bázisfüggvényekkel vett integrálok:
$$\langle\phi_3|f\rangle = \frac{1}{\sqrt{\pi}}\left(\int_0^{\pi/2} \sin x\,\mathrm{d}x - \int_{\pi/2}^{\pi} \sin x\,\mathrm{d}x + \right.$$
$$\left. + \int_{\pi}^{3\pi/2} \sin x\,\mathrm{d}x - \int_{3\pi/2}^{2\pi} \sin x\,\mathrm{d}x\right) =$$
$$= \frac{1}{\sqrt{\pi}}\left(-[\cos x]_0^{\pi/2} + [\cos x]_{\pi/2}^{\pi} - [\cos x]_{\pi}^{3\pi/2} + \right.$$
$$\left. + [\cos x]_{3\pi/2}^{2\pi}\right) = \frac{1}{\sqrt{\pi}}(1 - 1 - 1 + 1) = 0$$
$$\langle\phi_5|f\rangle = \frac{1}{\sqrt{\pi}}\left(-\left[\frac{\cos 2x}{2}\right]_0^{\pi/2} + \left[\frac{\cos 2x}{2}\right]_{\pi/2}^{\pi} - \right.$$
$$\left. - \left[\frac{\cos 2x}{2}\right]_{\pi}^{3\pi/2} + \left[\frac{\cos 2x}{2}\right]_{3\pi/2}^{2\pi}\right) =$$
$$= \frac{1}{\sqrt{\pi}}(1 + 1 + 1 + 1) = \frac{4}{\sqrt{\pi}}$$
Az f Fourier sorának ezen a bázison egyetlen tagja van:
$$\overline{f}(x) = \frac{4}{\sqrt{\pi}}\phi_5(x)$$

M 9.37.
Mivel Ψ normált:
$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^2(r, R)\,\mathrm{d}r = 1$$
Deriváljuk az egyenletet R szerint, és feltesszük, hogy az r szerinti integrálás és az R szerinti deriválás sorrendje felcserélhető. Ekkor kapjuk:
$$2\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial\Psi}{\partial R}\Psi\,\mathrm{d}r = 0 \quad \text{azaz} \quad \langle\frac{\partial\Psi}{\partial R}|\Psi\rangle = 0$$
Tehát Ψ merőleges $\frac{\partial\Psi}{\partial R}$-re.

M 9.38.
Parciális integrálással:
$$\int_{-\infty}^{\infty} f^*(x)f'(x)\,\mathrm{d}x =$$
$$= [f^*(x)f(x)]_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} f^{*\prime}(x)f(x)\,\mathrm{d}x =$$
$$= -\int_{-\infty}^{\infty} f^{*\prime}(x)f(x)\,\mathrm{d}x$$
Az utóbbi egyenlőség igaz, mert $f(x)$ az $L_2(-\infty, \infty)$-nek eleme. Ha $f(x)$ valós függvény, a fentiekből kapjuk, hogy
$$2\int_{-\infty}^{\infty} f'(x)f(x)\,\mathrm{d}x = 0$$
ezért ekkor f minden további feltétel nélkül merőleges a deriváltjára.

Ha f komplex, akkor a fenti egyenlőséget részletezve kapjuk, hogy
$$\int_{-\infty}^{\infty} (\mathrm{Re}f - i\mathrm{Im}f)((\mathrm{Re}f)' + i(\mathrm{Im}f)')\,\mathrm{d}x =$$
$$= -\int_{-\infty}^{\infty} ((\mathrm{Re}f)' - i(\mathrm{Im}f)')(\mathrm{Re}f + i\mathrm{Im}f)\,\mathrm{d}x$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} (\mathrm{Re}f(\mathrm{Re}f)' - i\mathrm{Im}f(\mathrm{Re}f)' +$$
$$+ i\mathrm{Re}f(\mathrm{Im}f)' + \mathrm{Im}f(\mathrm{Im}f)')\,\mathrm{d}x =$$
$$= -\int_{-\infty}^{\infty} (\mathrm{Re}f(\mathrm{Re}f)' + i\mathrm{Im}f(\mathrm{Re}f)' -$$
$$- i\mathrm{Re}f(\mathrm{Im}f)' + \mathrm{Im}f(\mathrm{Im}f)')\,\mathrm{d}x$$

$$2\int_{-\infty}^{\infty} (\mathrm{Re}f(\mathrm{Re}f)' + \mathrm{Im}f(\mathrm{Im}f)')\,\mathrm{d}x = 0$$
Ezért ahhoz, hogy f merőleges legyen a deriváltjára elegendő, ha
$$\int_{-\infty}^{\infty} (\mathrm{Im}f(\mathrm{Re}f)' - \mathrm{Re}f(\mathrm{Im}f)')\,\mathrm{d}x = 0$$
teljesül.

10. Differenciálegyenletek

M 10.1.
A differenciálegyenlet szokásos alakban felírva:
$$f^{(4)}(x) + 2xf''(x) + 2f'(x) + x^2 f(x) = 0$$

M 10.2.
Az egyenletekből közvetlen integrálással kapjuk:

1. $\int \mathrm{d}f = \int c\,\mathrm{d}x + C$
   $f(x) = cx + C$

2. $\int \mathrm{d}f = \int \cos x \, \mathrm{d}x + C$
$f(x) = \sin x + C$

3. $\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x} = cx + C$
$\int \mathrm{d}f = \int (cx + C) \, \mathrm{d}x + C_1$
$f(x) = cx^2 + Cx + C_1$

4. $\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x} = \sin x + C$
$\int \mathrm{d}f = \int (\sin x + C) \, \mathrm{d}x + C_1$
$f(x) = -\cos x + Cx + C_1$

M 10.3.
$\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x} = \frac{1}{x+1}$
$\int \mathrm{d}f = \int \frac{\mathrm{d}x}{x+1} + C$
$f(x) = \ln|x+1| + C$
$f(0) = \ln|1| + C = C = 1$
$f(x) = \ln|x+1| + 1$

M 10.4.
$f'(x) = -(\lambda + x^2) f(x)$
$\int \frac{\mathrm{d}f}{f} = -\int (\lambda + x^2) \, \mathrm{d}x + C$
$\ln|f(x)| = -\lambda x - \frac{x^3}{3} + C$
$f(x) = \pm e^{-\frac{x^3}{3} - \lambda x + C}$

M 10.5.
$\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}x} = \frac{1}{y^2}$
$\int y^2 \, \mathrm{d}y = \int \mathrm{d}x + C$
$\frac{y^3}{3} = x + C$
$y = \sqrt[3]{3(x+C)}$

M 10.6.
$\int \frac{\mathrm{d}f}{f} = -\int 2x \, \mathrm{d}x + C$
$\ln|f(x)| = -x^2 + C$
$f(x) = \pm e^{-x^2 + C}$

M 10.7.
$\int \frac{\mathrm{d}f}{f^2} = -\int \mathrm{d}x + C$
$-1/|f(x)| = x + C$
$f(x) = -1/(x + C)$

M 10.8.
$\int \frac{\mathrm{d}f}{f^3} = -\int \mathrm{d}x + C$
$-\frac{1}{2f^2(x)} = x + C$
$f(x) = \pm\sqrt{-\frac{1}{2(x+C)}}$

M 10.9.
$\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x} = \sqrt{f - 6}$
$\int \frac{\mathrm{d}f}{\sqrt{f-6}} = \int \mathrm{d}x + C$
$2\sqrt{f(x) - 6} = x + C$
$f(x) = \frac{1}{4}(x + C)^2 + 6$

M 10.10.
$f'(x) f(x) = xe^x$
$\int f \, \mathrm{d}f = \int xe^x \, \mathrm{d}x + C$
$\frac{f^2(x)}{2} = e^x(x-1) + C$
$f(x) = \pm\sqrt{2e^x(x-1) + C}$

M 10.11.
Legyen $u = x + y$.
Ekkor $u' = 1 + y' \quad y' = u' - 1$
$\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}x} = u + 1$
$\int \frac{\mathrm{d}u}{u+1} = \int \mathrm{d}x + C$
$\ln|u+1| = x + C$
$u = \pm e^{x+C} - 1$
$y = \pm e^{x+C} - (1 + x)$

M 10.12.
Legyen $u = 2x - y \quad u' = 2 - y'$
$u' = 2 - \frac{1}{u} = \frac{2u-1}{u}$
$\int \frac{u}{2u-1} \, \mathrm{d}u = \int \mathrm{d}x + C$
$\frac{u}{2} + \frac{1}{4} \ln\left|u - \frac{1}{2}\right| = x + C$
$-\frac{y}{2} + \frac{1}{4} \ln|2x - y - 1/2| = C$
Az $x = 2$, $y = -1$ pontot behelyettesítve a konstansra kapjuk:
$\ln(9/2) = 4C - 2$

M 10.13.

A homogén egyenelet megoldása: $f'(x)+\dfrac{1}{x}f(x)=0$

$$\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x}=-\frac{f(x)}{x}$$
$$\int\frac{\mathrm{d}f}{f}=-\int\frac{\mathrm{d}x}{x}+C$$
$$\ln|f(x)|=-\ln|x|+C=-\ln C_1|x|$$
$$f(x)=\frac{1}{C_1x}$$

Írjunk C_1 helyébe olyan függvényt, hogy $f(x)$ megoldása legyen az inhomogén egyenletnek (állandó variálása):

$$f(x)=\frac{1}{C_1(x)x}$$
$$f'(x)=\frac{1}{C_1(x)x}\cdot-\frac{1}{x^2}-\frac{C_1'(x)}{C_1^2(x)}\cdot\frac{1}{x}$$
$$\frac{1}{C_1(x)x}\cdot-\frac{1}{x^2}-\frac{C_1'(x)}{C_1^2(x)}\cdot\frac{1}{x}+\frac{1}{x^2}\cdot\frac{1}{C_1(x)}=\sin x$$
$$-\frac{C_1'(x)}{C_1^2(x)}=x\sin x$$
$$\int-\frac{\mathrm{d}C_1}{C_1^2}=\int x\sin x\,\mathrm{d}x+C$$
$$\frac{1}{C_1(x)}=\sin x-x\cos x+C$$
$$f(x)=\frac{\sin x}{x}-\cos x+\frac{C}{x}$$

M 10.14.

$$y'=2+Ce^x$$
$$2+Ce^x-2x-Ce^x=2-2x=2(1-x)$$
$$3=y(0)=2\cdot 0+Ce^0=C$$
$$C=3\qquad y=2x+Ce^x$$

M 10.15.

Szorozzuk meg a differenciálegyenlet mindkét oldalát $e^{-\int x\,\mathrm{d}x}=e^{-\frac{x^2}{2}}$ -tel (integráló tényező)!

$$e^{-\frac{x^2}{2}}y'-xe^{-\frac{x^2}{2}}y=x^3$$
$$\left(ye^{-\frac{x^2}{2}}\right)'=x^3$$
$$ye^{-\frac{x^2}{2}}=\frac{x^4}{4}+C$$
$$y=e^{\frac{x^2}{2}}\left(\frac{x^4}{4}+C\right)$$

M 10.16.

Legyen $\dfrac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}x}=u$

$$\frac{\mathrm{d}^2y}{\mathrm{d}x^2}=\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}y}\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}x}=\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}y}u$$
$$\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}y}u+\frac{k}{m}y=0$$
$$\int u\,\mathrm{d}u=-\frac{k}{m}\int y\,\mathrm{d}y+C$$
$$\frac{u^2}{2}=C-\frac{k}{m}\frac{y^2}{2}\qquad\omega^2=\frac{k}{m}$$
$$u=\sqrt{2C-\omega^2y^2}$$
$$\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}x}=\sqrt{2C-\omega^2y^2}\qquad C_0^2=2C$$
$$\int\frac{\mathrm{d}y}{\sqrt{C_0^2-\omega^2y^2}}=\int\mathrm{d}x+C_1$$
$$\frac{1}{\omega}\arcsin\frac{\omega y}{C_0}=x+C_1$$
$$\boxed{y=\frac{C_0}{\omega}\sin(\omega x+C_2)}$$

M 10.17.

$$\frac{\mathrm{d}q}{\mathrm{d}t}=k(100-q)\qquad q(t=0)=0$$
$$\int\frac{\mathrm{d}q}{100-q}=\int k\,\mathrm{d}t+C$$
$$-\ln(100-q)=kt+C$$
$$q(t)=100-e^{-kt+C}$$

A kezdeti feltétel szerint:

$$0=100-e^C$$
$$q(t)=100(1-e^{-kt})$$

M 10.18.

Írjuk fel az etil-acetát fogyására vonatkozó kinetikai differenciálegyenletet:

$$-\frac{\mathrm{d}[\text{etil-acetát}]}{\mathrm{d}t}=k[\text{etil-acetát}][\text{NaOH}]$$

Vezessük be a következő jelöléseket:

$$[\text{etil-acetát}]_{t=0}=a$$
$$[\text{NaOH}]_{t=0}=b$$
$$x=[\text{etil-acetát}]_{t=0}-[\text{etil-acetát}]_t$$

A feladat differenciálegyenlete a fenti jelölésekkel:

$$\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t}=k(a-x)(b-x)$$

Ez egy egyszerű, szétválasztható változójú differenciálegyenlet:

$$\int\frac{\mathrm{d}x}{(a-x)(b-x)}=\int k\mathrm{d}t+C$$
$$\frac{1}{b-a}\ln\frac{a-x}{b-x}=kt+C$$
$$\frac{a-x}{b-x}=e^{(b-a)kt+C_1}$$

Kezdeti feltétel: $x(t=0)=0$

Innen: $\dfrac{a}{b}=e^{C_1}$

Behelyettesítve és x-et kifejezve:

$$x=\frac{ab(e^{akt}-e^{bkt})}{ae^{bkt}-be^{akt}}$$

A feladat szövegében szereplő számértékek behelyettesítésével a fenti egyenletből k értéke meghatározható, és annak ismeretében a kérdés megválaszolható.

M 10.19.
A differenciálegyenlet aszimptotikus alakja $x \to \pm\infty$ esetén:
$f''(x) - x^2 f(x) = 0$
Ennek a feltételt kielégítő aszimptotikus megoldása:
$f_a(x) = Ce^{-\frac{x^2}{2}}$
Keressük a az eredeti differenciálegyenlet megoldását
$g(x) = f_a(x) \sum_k a_k x^k$
alakban, ahol legyen $H(x) = \sum_k a_k x^k$
Visszahelyettesítve az eredeti differenciálegyenletbe:
$f_a''(x)H(x) + 2f_a'(x)H'(x) + f_a(x)H''(x)+$
$+Ef_a(x)H(x) - x^2 f_a(x)H(x) = 0$

$(-1+x^2)f_a(x)H(x) + 2xf_a(x)H'(x) + f_a(x)H''(x)+$
$+Ef_a(x)H(x) - x^2 f_a(x)H(x) = 0$

$[H''(x) - 2xH'(x) + (E-1)H(x)]\, f_a(x) = 0$

$$\boxed{H''(x) - 2xH'(x) + (E-1)H(x) = 0}$$

$H(x)$ kifejtését behelyettesítve:
$\sum_k a_k k(k-1)x^{k-2} - 2x \sum_k a_k k x^{k-1} +$
$(E-1)\sum_k a_k x^k = 0$

$$\sum_k [a_{k+2}k(k-1) - 2a_k k + (E-1)a_k]\, x^k = 0$$

Ez bármely x esetén csak úgy teljesülhet, ha:

$$\boxed{a_{k+2} = \frac{2k+1-E}{(k+1)(k+2)} a_k}$$

A fenti összefüggés egy rekurziós formulát ad a $H(x)$ polinomok együtthatóira. A kapott polinomok csak abban az esetben lesznek végesek (azaz $a_k = 0$, ha k nagyobb, mint egy adott természetes szám), ha

$$\boxed{E = 2k+1}$$

Az ekkor kapható függvényeket Hermite-polinomoknak hívjuk.

M 10.20.
A differenciálegyenlet aszimptotikus alakja $x \to \infty$ esetén:
$f''(x) - \frac{1}{4} f(x) = 0$
Ennek a feltételt kielégítő partikuláris megoldása:
$f_a(x) = Ce^{-\frac{x}{2}}$
Keressük a az eredeti differenciálegyenlet megoldását
$g(x) = x^\alpha f_a(x) \sum_k a_k x^k$
alakban, ahol legyen $L(x) = \sum_k a_k x^k$
és α tetszőleges valós szám.
Visszahelyettesítve az eredeti differenciálegyenletbe, a következő alakra hozható kifejezést kapunk:
$x^\alpha \sum_k g_k x^k = 0$
Itt g_k nem függ x-től, csak a differenciálegyenlet konstansait tartalmazza. Bármely x esetén a fenti egyenelet csak akkor áll fenn, ha $g_k = 0$, bármely k esetén. $k = 0$-ra felírva:
$g_0 = c_0\,[\alpha(\alpha+1) - c] = 0$
Innen
$\alpha = -\frac{1}{2} + \sqrt{\frac{1}{4} + c}$
esetén kapunk a feltételeknek megfelelő megoldást. A fenti α-val felírva $g(x)$-et, és visszaírva az eredeti differenciálegyenletbe, $L(x)$-re az alábbi differenciálegyenlet adódik:

$$\boxed{L''(x) + \left(1 + \sqrt{1+4c} - x\right) L'(x) +}$$
$$\boxed{+ \left(b + \frac{1}{2} + \sqrt{\frac{1}{4} + c}\right) L(x) = 0}$$

Az **10.19.** feladat megoldásához hasonlóan, $L(x)$ együtthatóira kapjuk:

$$\boxed{c_{k+1} = \frac{k + \frac{1}{2} + \sqrt{\frac{1}{4} + c} - b}{(k+1+\sqrt{1+4c})(k+1)} c_k}$$

A kapott polinom akkor lesz véges, ha

$$\boxed{b = k + \frac{1}{2} + \sqrt{\frac{1}{4} + c}}$$

Abban az esetben, ha $c = l(l+1)$ alakú, ahol l nemnegatív egész szám, b szintén egész szám, adott b esetén l lehetséges értékei:
$l = 0, 1, 2, \ldots, b-1$
Az ekkor kapott $L(x)$ függvényeket asszociált Laguerre polinomoknak nevezzük.

M 10.21.
$2s^2F(s) - 2f(0)s - 2f'(0) - 3sF(s) + 3f(0) + 4F(s) =$
$= \frac{1}{(s+1)^2}$

$F(s) = \dfrac{(s+1)(3f(0) - 2f'(0) - 2f(0)s) + 1}{(2s^2 - 3s + 4)(s+1)}$

Felhasználva a kezdeti feltételeket:

$F(s) = \dfrac{(s+1)(3-2s)+1}{(2s^2-3s+4)(s+1)}$

M 10.22.

$s^2F(s) - f(0)s - f'(0) + 2a(sF(s) - f(0)) + bF(s) =$
$= e^{-sx_0}$

$F(s)(s^2 + 2as + b) = e^{-sx_0} + f(0)(s+2a) + f'(0)$

$F(s) = \dfrac{e^{-sx_0}}{s^2+2as+b} + \dfrac{f(0)(s+2a)}{s^2+2as+b} + \dfrac{f'(0)}{s^2+2as+b}$

Felhasználva a kezdeti feltételeket:

$F(s) = \dfrac{e^{-sx_0}}{s^2+2as+b}$

Visszatranszformálva (pl. táblázat segítségével):

$f(x) = \dfrac{e^{-a(x-x_0)}}{\sqrt{b^2-a^2}} \sin\left[\sqrt{b^2-a^2}(x-x_0)\right]$

M 10.23.

A

$f''(x) = g(x) \qquad f'(x) = h(x)$

jelölések bevezetésével a feladat egyenlete az alábbi homogén differenciálegyenletrendszerként írható fel:

$g'(x) + 5g(x) - 4f(x) = 0$

$h'(x) - g(x) = 0$

$f'(x) - h(x) = 0$

M 10.24.

$\displaystyle\int \frac{\partial f}{\partial x \partial y}\,\mathrm{d}x = \int \mathrm{d}x + C(y)$

$\dfrac{\partial f}{\partial y} = x + C(y)$

$\displaystyle f(x,y) = xy + \int C(y)\,\mathrm{d}y + C_2(x)$

Legyen:

$\displaystyle C_1(y) = \int C(y)\,\mathrm{d}y$

A kezdeti feltételeket alkalmazva:

$1 = C_1(y) + C_2(0) \qquad x^2 + 1 = C_1(0) + C_2(x)$

Az első egyenletben $y = 0$-t helyettesítve:

$1 = C_1(0) + C_2(0)$

innen $C_1(0)$-t beírva a második feltételi egyenletbe:

$C_2(x) = x^2 + C_2(0)$

Az első egyenletből $C_1(y)$-t kifejezve:

$C_1(y) = 1 - C_2(0)$

A $C_1(y)$-ra és $C_2(x)$-re kapott kifejezéseket $f(x,y)$-ba visszahelyettesítve:

$\boxed{f(x,y) = xy + x^2 + 1}$

M 10.25.

Keressük a megoldást szorzatfüggvény alakban: $f(x,y) = g(x)h(y)$

Behelyettesítve a differenciálegyenletbe:

$g''(x)h(y) + x^2g'(x)h(y) + g(x)h''(y) = 0$

$\dfrac{g''(x)}{g(x)} + \dfrac{x^2g'(x)}{g(x)} + \dfrac{h''(y)}{h(y)} = 0$

$\dfrac{g''(x) + x^2g'(x)}{g(x)} = C$

$\dfrac{h''(y)}{h(y)} = -C$

M 10.26.

Legyen: $\Psi(r,t) = a(r)b(t)$

Ekkor:

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

$i\hbar\dfrac{1}{b(t)}\dfrac{\mathrm{d}b(t)}{\mathrm{d}t} = \dfrac{1}{a(r)}\hat{H}(r)a(r)$

$i\hbar\dfrac{b'(t)}{b(t)} = -E \qquad \dfrac{\hat{H}(r)a(r)}{a(r)} = E$

$b(t) = e^{-i\frac{E}{\hbar}} \qquad \hat{H}(r)a(r) = Ea(r)$

M 10.27.

Legyen: $\Psi(r,\vartheta,\varphi) = R(r)Y(\vartheta,\varphi)$

$\Delta = \dfrac{\partial^2}{\partial r^2} + \dfrac{2}{r}\dfrac{\partial}{\partial r} + \dfrac{1}{r^2\sin\vartheta}\left[\dfrac{\partial}{\partial\vartheta}\left(\sin\vartheta\dfrac{\partial}{\partial\vartheta}\right) + \dfrac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]$

$-\dfrac{1}{2}\left(\dfrac{\partial^2}{\partial r^2} + \dfrac{2}{r}\dfrac{\partial}{\partial r} + \dfrac{1}{r^2}\Delta_{\vartheta,\varphi}\right)R(r)Y(\vartheta,\varphi) +$
$+\dfrac{1}{r}R(r)Y(\vartheta,\varphi) = ER(r)Y(\vartheta,\varphi)$

$\left(-\dfrac{1}{2}\dfrac{\partial^2R(r)}{\partial r^2} - \dfrac{1}{r}\dfrac{\partial R(r)}{\partial r}\right)Y(\vartheta,\varphi) -$
$e\dfrac{1}{2r^2}R(r)\Delta_{\vartheta,\varphi}Y(\vartheta,\varphi) + \dfrac{1}{r}R(r)Y(\vartheta,\varphi) =$
$= ER(r)Y(\vartheta,\varphi)$

$\left(-\dfrac{1}{2}\dfrac{\partial^2R(r)}{\partial r^2} - \dfrac{1}{r}\dfrac{\partial R(r)}{\partial r}\right)\dfrac{1}{R(r)} + \dfrac{1}{r} -$
$-\dfrac{1}{2r^2}\dfrac{\Delta_{\vartheta,\varphi}Y(\vartheta,\varphi)}{Y(\vartheta,\varphi)} = E$

$\left(r^2\dfrac{\partial^2R(r)}{\partial r^2} + 2r\dfrac{\partial R(r)}{\partial r}\right)\dfrac{1}{R(r)} - 2r -$
$-\dfrac{\Delta_{\vartheta,\varphi}Y(\vartheta,\varphi)}{Y(\vartheta,\varphi)} = -2Er^2$

$\dfrac{\Delta_{\vartheta,\varphi}Y(\vartheta,\varphi)}{Y(\vartheta,\varphi)} = l(l+1)$

$$\frac{\partial^2 R(r)}{\partial r^2}+\frac{2}{r}\frac{\partial R(r)}{\partial r}+\left(2E-\frac{2}{r}-\frac{l(l+1)}{r^2}\right)R(r)=0$$

Az utóbbi, r-re vonatkozó egyenlet megoldását lásd a **10.20.** feladatnál.

11. Ortogonális polinomok, speciális függvények

M 11.1.
$P_2''=2$
$P_2'=2x$
$$(1-x^2)\cdot 2-2x\cdot 2x+2(2+1)(x^2-\frac{1}{3})=0$$
$$2-2x^2-4x^2+6x^2-2=0$$

M 11.2.
$f_1'=f_1=1$
$$f_2'=f_2-\langle f_2|f_1'\rangle=f_2-\langle f_2|f_1\rangle=$$
$$=\frac{1}{\sqrt{2}}x-\int_0^\infty e^{-x}\cdot 1\cdot\frac{1}{\sqrt{2}}x\,\mathrm{d}x=$$
$$=\frac{1}{\sqrt{2}}x-\frac{1}{\sqrt{2}}\int_0^\infty xe^{-x}\,\mathrm{d}x=\frac{1}{\sqrt{2}}(x-1)$$

M 11.3.
$f_1'=f_1=1$
$$f_2'=f_2-\frac{\langle f_2|f_1'\rangle}{\langle f_1'|f_1'\rangle}=f_2-\frac{\langle f_2|f_1\rangle}{\langle f_1|f_1\rangle}=$$
$$=x-\frac{\int_{-\infty}^{\infty}e^{-x^2}\cdot 1\cdot x\,\mathrm{d}x}{\int_{-\infty}^{\infty}e^{-x^2}\,\mathrm{d}x}=x-\frac{0}{\sqrt{\pi}}=x$$
$$f_3'=f_3-\frac{\langle f_3|f_1'\rangle}{\langle f_1'|f_1'\rangle}-\frac{\langle f_3|f_2'\rangle}{\langle f_2'|f_2'\rangle}=f_3-\frac{\langle f_3|f_1\rangle}{\langle f_1|f_1\rangle}-\frac{\langle f_3|f_2'\rangle}{\langle f_2'|f_2'\rangle}=$$
$$=x^2-\frac{\int_{-\infty}^{\infty}e^{-x^2}\cdot x^2\cdot 1\,\mathrm{d}x}{\int_{-\infty}^{\infty}e^{-x^2}\,\mathrm{d}x}-\frac{\int_{-\infty}^{\infty}e^{-x^2}\cdot x^2\cdot x\,\mathrm{d}x}{\int_{-\infty}^{\infty}e^{-x^2}\cdot x\cdot x\,\mathrm{d}x}=$$
$$=x^2-\frac{2\cdot\frac{\sqrt{\pi}}{4}}{\sqrt{\pi}}-\frac{0}{2\cdot\frac{\sqrt{\pi}}{4}}=x^2-\frac{1}{2}$$

M 11.4.
$H_0=f_1=1$ triviális $c=0$
$H_1=f_2'=x \quad H_1''=0 \;\; H_1'=1$
$-2x\cdot 1+c\cdot x=0 \quad c=2$
$$H_2=f_3'=x-\frac{1}{2} \quad H_2''=2 \;\; H_2'=2x$$
$$2-2x\cdot 2x+c(x^2-\frac{1}{2})=0 \quad c=4$$

A differenciálegyenlet megoldását lásd a **10.19.** feladat megoldásánál.

M 11.5.
$$\langle Y_{lm}|Y_{l'm'}\rangle=$$
$$=\mathcal{N}_{lm}^2\int_0^\pi\int_0^{2\pi}P_{lm}(\cos\vartheta)e^{-im\varphi}P_{l'm'}(\cos\vartheta)e^{im'\varphi}\sin\vartheta\,\mathrm{d}\vartheta\,\mathrm{d}\varphi=$$
$$=\mathcal{N}_{lm}^2\int_0^\pi P_{lm}(\cos\vartheta)P_{l'm'}(\cos\vartheta)\sin\vartheta\,\mathrm{d}\vartheta\int_0^{2\pi}e^{-(m-m')\varphi}\,\mathrm{d}\varphi=$$
$$=2\pi\mathcal{N}_{lm}^2\delta_{mm'}\cdot$$
$$\cdot\int_0^\pi(1-\cos^2\vartheta)^{\frac{m+m'}{2}}\frac{\mathrm{d}^{m+l}(\cos^2\vartheta-1)^l}{\mathrm{d}(\cos\vartheta)^{m+l}}\frac{\mathrm{d}^{m'+l'}(\cos^2\vartheta-1)^{l'}}{\mathrm{d}(\cos\vartheta)^{m'+l'}}\cdot$$
$$\cdot\sin\vartheta\,\mathrm{d}\vartheta=$$
$$=\mathcal{N'}_{lm}^2\delta_{mm'}\delta_{mm'}\delta_{ll'}=\mathcal{N'}_{lm}^2\delta_{mm'}\delta_{ll'}$$
Utóbbi egyenlőség az asszociált Legendre polinomok ortogonalitásából adódik.

12. Csoportelmélet

M 12.1.
Ellenőrizzük a csoportaxiómákat.

a.) ZÁRTSÁG $1\cdot 1=1\in\mathcal{G}$
$-1\cdot 1=-1\in\mathcal{G}$
$-1\cdot(-1)=1\in\mathcal{G}$
teljesül

b.) ASSZOCIATIVITÁS A valós számok körében értelmezett szorzás asszociatív.

c.) EGYSÉGELEM Az 1 az egységelem, (lásd a.) pont).

d.) INVERZ ELEM Minden elemnek van inverze, és az eleme a csoportnak: $1^{-1}=1\in\mathcal{G}$ és $(-1)^{-1}=-1\in\mathcal{G}$

M 12.2.
Ellenőrizzük a csoportaxiómákat.

a.) ZÁRTSÁG $\hat{E}\hat{\sigma}_h=\hat{\sigma}_h\in\mathcal{G}$
$\hat{\sigma}_h\hat{\sigma}_h=\hat{E}\in\mathcal{G}$
$\hat{E}\hat{E}=\hat{E}\in\mathcal{G}$
teljesül

b.) ASSZOCIATIVITÁS Szimmetria operátorok egymás utáni alkalmazása zárójelezhető.

c.) EGYSÉGELEM Az $\hat{E}$ az egységelem, (lásd a.) pont).

d.) INVERZ ELEM Minden elemnek van inverze, és az eleme a csoportnak: $\hat{\sigma}_h^{-1} = \hat{\sigma}_h \in \mathcal{G}$ és $\hat{E}^{-1} = \hat{E} \in \mathcal{G}$

M 12.3.
a) C_{2v} b) C_{3v} c) C_{2v} d) $C_{\infty h}$ e) D_{4h} f) D_{2h} g) S_6 h) D_{3h} i) D_{6h} j) D_{2h} k) D_{2h} l) S_4 m) I_h n) C_{3v}
o) C_{2v} p) D_{2h} q) S_4 r) D_{2h} s) C_1 általában, C_s ha sík, C_3 ha az -OH csoportok úgy állnak mint a propeller szárnyai, C_{3h} ha sík és propeller

M 12.4.
a.) A D_{3h} csoport elemeinek karakterei az elmozdulás-egységvektorok alkotta ábrázolásban (jelöljük az ábrázolást Γ-val):
$\chi_\Gamma(E) = 9$ $\chi_\Gamma(C_3) = 0$
$\chi_\Gamma(C_2) = 1 - 2 = -1$ $\chi_\Gamma(\sigma_h) = 6 - 3 = 3$
$\chi_\Gamma(S_3) = 0$ $\chi_\Gamma(\sigma_v) = 2 - 1 = 1$

	E	$2C_3$	$3C_2$	σ_h	$2S_3$	$2\sigma_v$
Γ	9	0	-1	3	0	1

A Λ i.r. súlya a Γ redukálható reprezentációban:
$$n_\Lambda = \frac{1}{g}\sum_{R\in\mathcal{G}} \chi_\Lambda(R)\chi_\Gamma(R)$$
ahol g a csoport rendje.

Az egyes i.r.-ek súlya Γ-ban:
$$n_{A_1'} = \frac{1}{12}(9+0-3+3+0+3) = 1$$
$$n_{A_2'} = \frac{1}{12}(9+0-3+3+0+3) = 1$$
$$n_{E'} = \frac{1}{12}(18+0+0+6+0+0) = 2$$
$$n_{A_1''} = \frac{1}{12}(9+0-3-3+0-3) = 0$$
$$n_{A_2''} = \frac{1}{12}(9+0+3-3+0+3) = 1$$
$$n_{E''} = \frac{1}{12}(18+0+0-6+0+0) = 1$$

A Γ tehát a következő i.r.-ekre bontható
$\Gamma = A_1' \oplus A_2' \oplus 2E' \oplus A_2'' \oplus E''$

b.) A karaktertáblából kiolvasva a transzlációs szabadsági fokok
$\Gamma_{tr} = E' \oplus A_2''$
i.r.-ekhez tartoznak, a forgási szabadsági fokok
$\Gamma_{rot} = A_2' \oplus E''$
i.r.-ekhez sorolhatók. A normálrezgések szimmetriái:
$\Gamma_v = \Gamma - \Gamma_{tr} - \Gamma_{rot} = A_1' \oplus E'$

12.5.
C_{2v} pontcsoport
a.) A szimmetriaoperátorok karakterei az adott reprezentációban:

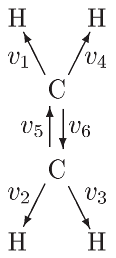
	E	C_2	σ_v	σ_v'
Γ	2	0	2	0

Az egyes i.r.-ek súlya ebben a reprezentációban:
$$n_{A_1} = \frac{1}{4}(2+2) = 1$$
$$n_{B_1} = \frac{1}{4}(2+2) = 1$$
$$n_{A_2} = \frac{1}{4}(2-2) = 0$$
$$n_{B_2} = \frac{1}{4}(2-2) = 0$$

Ez az ábrázolás tehát $\Gamma = A_1 \oplus B_1$ i.r.-ekre bomlik.

b.) A Λ i.r. szerint transzformálódó függvényt eredményező projekciós operátor:
$$\hat{P}_\Lambda = \frac{1}{g}\sum_{R\in\mathcal{G}} \chi_\Lambda(R)\, R\,.$$
Jelöljük p_1-gyel az egyik, p_2-vel a másik Cl atomon elhelyezett p_x függvényt. Az A_1 szerint transzformálódó lineáris kombináció:
$$\hat{P}_{A_1}\, p_1 = \frac{1}{4}(E + C_2 + \sigma_v + \sigma_v')\, p_1 = \\ = \frac{1}{4}(p_1 - p_2 + p_1 - p_2) = \frac{p_1 - p_2}{2}$$
A B_1 szerint transzformálódó lineáris kombináció:
$$\hat{P}_{B_1}\, p_1 = \frac{1}{4}(E - C_2 + \sigma_v - \sigma_v')\, p_1 = \\ = \frac{1}{4}(p_1 + p_2 + p_1 + p_2) = \frac{p_1 + p_2}{2}$$

12.6.
D_{2h} pontcsoport
Legyen a z tengely a C=C kötéssel párhuzamos és az xz sík a molekulasík. Jelöljük a reprezentáció vektorait ahogy az ábra mutatja.



A csoport elemeinek karakterei ebben az ábrázolásban:

	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:

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

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

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:

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

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

B_{3u} szimmetriájú:

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

M 12.7.
C_{2h} pontcsoport
a.) A szimmetria műveletek karakterei a négy p_z függvény alkotta reprezentációban:

	E	C_2	i	σ_h
Γ	4	0	0	-4

Az i.r.-ek súlya:

$$n_{A_g} = \frac{1}{4}(4-4) = 0 \qquad n_{B_u} = \frac{1}{4}(4-4) = 0$$
$$n_{B_g} = \frac{1}{4}(4+4) = 2 \qquad n_{A_u} = \frac{1}{4}(4+4) = 2$$

Az ábrázolás felbontása i.r-ekre:
$\Gamma = 2A_u \oplus 2B_g$

b.) Az A_u i.r. számára bázist képező szimmetriapályák:

$$\hat{P}_{A_u} p_F = \frac{1}{4}(E + C_2 - i - \sigma_h) p_F = \\ = \frac{1}{4}(p_F + p'_F + p_F + p'_F) = \frac{p_F + p'_F}{2}$$

$$\hat{P}_{A_u} p_N = \frac{p_N + p'_N}{2}$$

A B_g i.r. számára bázist képező szimmetriapályák:

$$\hat{P}_{B_g} p_F = \frac{1}{4}(E - C_2 + i - \sigma_h) p_F = \\ = \frac{1}{4}(p_F - p'_F + p_F - p'_F) = \frac{p_F - p'_F}{2}$$

$$\hat{P}_{B_g} p_N = \frac{p_N - p'_N}{2}$$

M 12.8.
Az atomok elmozdulásvektorainak (a Descartes koordinátarendszer x, y, z tengelyével párhuzamos

egységvektorok) 12 dimenziós ábrázolását redukáljuk i.r.-ekre. A C_{3v} szimmetriaelemeinek karakterei ebben az ábrázolásban:

	E	$2C_3$	$3\sigma_v$
Γ	12	0	2

A C_3 karakterének megállapításához fel kellett építsük a szimmetia operátor mátrixát a P atom x és y irányú elmozdulásvektorának bázisán. A C_3 művelet ugyanis ezt a két vektort egymás lineáris kombinációjába transzformálja. A C_3 mátrixa ezen az altéren a 120^o-kal pozitív irányba forgató $2x2$-es mátrix:

$$\begin{pmatrix} -1/2 & -\sqrt{3}/2 \\ \sqrt{3}/2 & -1/2 \end{pmatrix}$$

A mátrix spúrja -1. A C_3 karaktere így $1-1=0$, mivel a többi bázisvektor közül csak a P atom z irányú elmozdulásvektorát nem mozdítja el a C_3 művelet.

Az egyes i.r.-ek súlya a Γ reprezentációban:

$n_{A_1} = \frac{1}{6}(12+6) = 3 \qquad n_{A_2} = \frac{1}{6}(12-6) = 1$

$n_E = \frac{1}{6}24 = 4$

Az ábrázolás tehát a

$\Gamma = 3A_1 \oplus A_2 \oplus 4E$

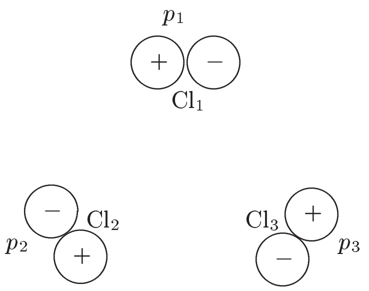
i.r.-ekre redukálódik. Ezekből $\Gamma_{tr} = A_1 \oplus E$ tartozik a molekula tömegközéppontjának elmozdulásához, $\Gamma_{rot} = A_2 \oplus E$ tartozik a molekula forgatásához. A rezgési módusok a

$\Gamma_v = \Gamma - \Gamma_{tr} - \Gamma_{rot} = 2A_1 \oplus 2E$

i.r.-eknek felelnek meg.

M 12.9.

Tekintsük a három Cl atom meghatározta síkot (xy sík) és számozzuk a három Cl atomot, ahogy az ábra mutatja. Legyen az x tengely a vízszintes koordináta tengely.



Az ábrán vázolt p_1, p_2 és p_3 függvények összege egy olyan lineáris kombináció, amely az A_2 i.r. szerint transzformálódik. A p_1, p_2 és p_3 függvények a Cl_i atomokon centrált p_{xi}, p_{yi}, p_{zi} függvények segítségével az alábbiak szerint adhatók meg:

$p_1 = p_{x1}$

$p_2 = \cos(60^o)p_{x2} - \sin(60^o)p_{y2}$

$p_3 = \sin(30^o)p_{x3} + \cos(30^o)p_{y3}$

(Azaz p_2-t a p_{x2} -60^o-os elforgatásával, p_3-at a p_{y3} -30^o-os elfogatásával kapjuk.)

M 12.10.

a.) Indexeljük a szénvázat építő atomokat rendre 1, 2, 3, 4-gyel, a felső középső atomtól indulva, pozitív körüljárással. Ellenőrizzük, hogy a D_{2d} szimmetriaelemei ezt az objektumot helyben hagyják.

C_2 hatása:	1↔3 és 2↔4
S_4 hatása:	1→2, 2→3, 3→4 és 4→1
C_2' hatása:	1↔2 és 3↔4
σ_d hatása:	1, 3 helyben marad és 2↔4

b.) A szimmetriaelemek karakterei az s függvények reprezentációjában:

	E	$2S_4$	C_2	$2C_2'$	$2\sigma_d$
Γ	4	0	0	0	2

Az i.r.-ek súlya:

$n_{A_1} = \frac{1}{8}(4+4) = 1 \qquad n_{A_2} = \frac{1}{8}(4-4) = 0$

$n_{B_1} = \frac{1}{8}(4-4) = 0 \qquad n_{B_2} = \frac{1}{8}(4+4) = 1$

$n_E = \frac{1}{8}8 = 1$

Az ábrázolás tehát a következő i.r.-ekre redukálódik:

$$\Gamma = A_1 \oplus B_2 \oplus E$$

c.) A szimmetria műveletek karakterei a koordináta reprezentációban:

	E	$2S_4$	C_2	$2C_2'$	$2\sigma_d$
Γ	12	0	0	0	2

Az i.r.-ek súlya:

$n_{A_1} = \frac{1}{8}(12+4) = 2 \qquad n_{A_2} = \frac{1}{8}(12-4) = 1$

$n_{B_1} = \frac{1}{8}(12-4) = 1 \qquad n_{B_2} = \frac{1}{8}(12+4) = 2$

$n_E = \frac{1}{8}24 = 3$

Az ábrázolás felbontása i.r.-ekre:

$\Gamma = 2A_1 \oplus 2B_2 \oplus B_1 \oplus A_2 \oplus 3E$

A transzlációs szabadsági fokok $\Gamma_{tr} = B_2 \oplus E$ i.r.-ekhez sorolhatók, a molekula forgása $\Gamma_{rot} = A_2 \oplus E$ i.r.-ekre bontható. A rezgési szabdsági

fokok így
$\Gamma_v = \Gamma - \Gamma_{tr} - \Gamma_v = 2A_1 \oplus B_2 \oplus B_1 \oplus E$
szerint oszlanak el az i.r.-ek között.

M 12.11.

Először belátjuk, hogy véges csoport esetén minden A elemre létezik $n \in \mathbb{N}$, hogy $A^n = E$ (E az egységelem).

Mivel a csoport véges, minden $k \in \mathbb{N}$-re létezik k-nál nagyobb $l \in \mathbb{N}$ hogy
$A^l = A^k$.
Szorozzuk ezt az egyenletet A^{-k}-val. Ekkor kapjuk:
$A^{l-k} = A^{k-k} = A^0 = E$,
tehát az $n = l - k$ természetes számra teljesül, hogy
$A^n = E$.

Legyen n ilyen. Ellenőrizzük a $\mathcal{G} = \{A, A^1, \dots A^k | k \leq n\}$ halmazra a csoportaxiómákat.

a.) ZÁRTSÁG

$$A^k A^l = A^{k+l} = \begin{cases} A^{k+l}, & \text{ha } k+l < n \\ E, & \text{ha } k+l = n \\ A^{k+l-n}, & \text{ha } k+l > n \end{cases}$$

Mindhárom esetben az eredmény eleme $\mathcal{G}$-nek.

b.) ASSZOCIATIVITÁS triviális

c.) EGYSÉGELEM $A^n = E$ az egységelem

d.) INVERZ ELEM Minden $k \leq n$ számra $\left(A^k\right)^{-1} = A^{n-k} \in \mathcal{G}$

M 12.12.

a.) D_{3h}

b.) p_x, p_y, p_z rendre ugyanúgy transzformálódik, mint x, y, z; ez a három dimenziós reprezentáció $\Gamma_{tr} = A_2'' \oplus E'$ i.r.-ekre redukálódik

c.) A szimmetria operátorok karakterei az s függvények ábrázolásában:

	E	$2C_3$	$3C_2'$	σ_h	$2S_3$	$3\sigma_v$
Γ	3	0	1	3	0	1

Az egyes i.r.-ek súlya ebben az s függvények alkotta ábrázolásban:

$n_{A_1'} = \frac{1}{12}(3+3+3+3) = 1$

$n_{A_2'} = \frac{1}{12}(3-3+3-3) = 0$

$n_{A_1''} = \frac{1}{12}(3+3-3-3) = 0$

$n_{A_2''} = \frac{1}{12}(3-3-3+3) = 0$

$n_{E'} = \frac{1}{12}(6+6) = 1 \qquad n_{E''} = \frac{1}{12}(6-6) = 0$

Az s függvények tere tehát az alábbi i.r.-ekre redukálódik:

$$\Gamma = A_1' \oplus E'$$

d.) A $q = \frac{1}{\sqrt{3}}(p_1+p_2+p_3)$ az A_2'' i.r. bázisfüggvénye.

e.) Az S_1 jelű elmozdulás az A_1' (totálszimmetrikus) i.r.-hez tartozik, az S_2 jelű pedig az A_2'' i.r.-hez.

f.) A csoportelemek karaktere a koordináta reprezentációban:

	E	$2C_3$	$3C_2'$	σ_h	$2S_3$	$3\sigma_v$
Γ	12	0	-2	4	-2	2

Az egyes i.r.-ek súlya ebben az ábrázolásban:

$n_{A_1'} = \frac{1}{12}(12-6+4-4+6) = 1$

$n_{A_2'} = \frac{1}{12}(12+6+4-4-6) = 1$

$n_{E'} = \frac{1}{12}(24+8+4) = 3$

$n_{A_1''} = \frac{1}{12}(12-6-4+4-6) = 0$

$n_{A_2''} = \frac{1}{12}(12+6-4+4+6) = 2$

$n_{E''} = \frac{1}{12}(24-8-4) = 1$

Az ábrázolás tehát a következő i.r.-ekre redukálódik:

$$\Gamma = A_1' \oplus A_2' \oplus 2A_2'' \oplus 3E' \oplus E''$$

A rotáció $\Gamma_{rot} = E'' \oplus A_2'$ i.r.-ekhez tartozik, a transzlációt a b.) pontban láttuk. A rezgések $\Gamma_v = \Gamma - \Gamma_{tr} - \Gamma_{rot} = A_1' \oplus A_2'' \oplus 2E'$ i.r.-ekre bonthatók.

M 12.13.

Az r_1, r_2, r_3, r_4 vektorok megegyeznek a **12.6.** feladat megoldásában szereplő v_1, v_2, v_3, v_4 vektorokkal. A molekula elhelyezése a Descartes koordináta rendszerben különbözik a **12.6.** feladatban szereplőtől.

a.) A csoportelemek karakterei a négydimenziós ábrázolásban:

	E	$C_2(z)$	$C_2(y)$	$C_2(x)$	i	$\sigma(xy)$	$\sigma(xz)$	$\sigma(yz)$
Γ	4	0	0	0	0	4	0	0

Az egyes i.r.-ek súlya ebben a reprezentációban:

$n_{A_g} = \frac{1}{8}(4+4) = 1 \qquad n_{B_{1g}} = \frac{1}{8}(4+4) = 1$

$n_{A_u} = \frac{1}{8}(4-4) = 0 \qquad n_{B_{1u}} = \frac{1}{8}(4-4) = 0$

$n_{B_{2g}} = \frac{1}{8}(4-4) = 0 \qquad n_{B_{3g}} = \frac{1}{8}(4-4) = 0$

$n_{B_{2u}} = \frac{1}{8}(4+4) = 1 \qquad n_{B_{3u}} = \frac{1}{8}(4+4) = 1$

Az ábrázolás felbontása i.r.-ekre:
$\Gamma = A_g \oplus B_{1g} \oplus B_{2u} \oplus B_{3u}$

b.) az A_g szimmetriájú koordináta:

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

a B_{1g} szimmetriájú koordináta:

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

a B_{2u} szimmetriájú koordináta:

$$\hat{P}_{B_{2u}} v_1 = \frac{1}{4}(v_1 + v_2 - v_3 - v_4)$$

a B_{3u} szimmetriájú koordináta:

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

Látjuk, hogy a koordináta rendszer irányításától függetlenül ugyanazokat a szimmetrizált vektorokat kaptuk, mint a **12.6.** feladatban.

c.) Legyenek az s_1, s_2, s_3, s_4 függvények rendre azon a H atomon centráltak, amelyre a **12.6.** megoldásban szereplő ábrán a v_1, v_2, v_3, v_4 vektor mutat. Ez az ábrázolás ugyanaz, mint az a.) pontban szereplő, az s_i függvény játssza a v_i vektor szerepét.

d.) Az $\frac{1}{2}(p_1 + p_2 + p_3 + p_4)$ függvény B_{1u} szimmetriájú.

M 12.14.

Direkt szorzat reprezentáció karaktere egyenlő a karakterek szorzatával, ezért

$$\chi_{\Gamma\otimes\Gamma}(R) = \Big(\chi_\Gamma(R)\Big)^2$$

A totálszimmetrikus i.r. (jelöljük A_1-gyel) súlya a $\Gamma \otimes \Gamma$ ábrázolásban:

$$n_{A_1} = \frac{1}{g}\sum_{R\in\mathcal{G}} \chi_{A_1}(R)\chi_{\Gamma\otimes\Gamma}(R) = \\ = \frac{1}{g}\sum_{R\in\mathcal{G}} 1 \cdot \Big(\chi_\Gamma(R)\Big)^2 > 0$$

(g a csoport rendjét jelöli) Az utolsó egyenlőtlenség fennáll, mert 0-nál nagyobb egyenlő számok összegét kaptuk, amelyek közül legalább egy biztosan nem 0.

Ha Γ irreducibilis ábrázolás, akkor a kis ortogonalitási tétel (LOT)

$$\sum_{R\in\mathcal{G}} \Big(\chi_\Gamma(R)\Big)^2 = g$$

alapján a totálszimmetrikus i.r. súlya a $\Gamma \otimes \Gamma$ ábrázolásban $n_{A_1} = \frac{1}{g} g = 1$.

M 12.15.

a.) A csoport elemeinek karaktere a Γ_v ábrázolásban:

	E	$2C_4$	C_2	$2\sigma_v$	$2\sigma_d$
Γ_v	3	1	-1	1	1

Az i.r.-ek súlya Γ_v-ben:

$$n_{A_1} = \frac{1}{8}(3 + 2 - 1 + 2 + 2) = 1$$
$$n_{A_2} = \frac{1}{8}(3 + 2 - 1 - 2 - 2) = 0$$
$$n_{B_1} = \frac{1}{8}(3 - 2 - 1 + 2 - 2) = 0$$
$$n_{B_2} = \frac{1}{8}(3 - 2 - 1 - 2 + 2) = 0$$
$$n_E = \frac{1}{8}(6 + 2) = 1$$

Az ábrázolás tehát $\Gamma_v = A_1 \oplus E$ i.r. összetevőkre bontható.

b.) Direkt szorzat reprezentáció karakterei a karakterek szorzata. Így a karakterek a $\Gamma_v \otimes E$ ábrázolásban:

	E	$2C_4$	C_2	$2\sigma_v$	$2\sigma_d$
$\Gamma_v \otimes E$	6	0	2	0	0

Az egyes i.r.-ek súlya:

$$n_{A_1} = \frac{1}{8}(6 + 2) = 1 \qquad n_{A_2} = \frac{1}{8}(6 + 2) = 1$$
$$n_{B_1} = \frac{1}{8}(6 + 2) = 1 \qquad n_{B_2} = \frac{1}{8}(6 + 2) = 1$$
$$n_E = \frac{1}{8}(12 - 4) = 1$$

A $\Gamma_v \otimes E$ ábrázolás i.r. összetevői tehát:

$\Gamma_v \otimes E = A_1 \oplus B_1 \oplus A_2 \oplus B_2 \oplus E$

M 12.16.

A szimmetria műveletek karakterei a koordináta reprezentációban:

	E	$2C_4$	C_2	$2\sigma_v$	$2\sigma_d$
Γ	18	2	-2	4	2

Az i.r.-ek súlya a koordináta reprezentációban:

$$n_{A_1} = \frac{1}{8}(18 + 4 - 2 + 8 + 4) = 4$$

$$n_{A_2} = \frac{1}{8}(18+4-2-8-4) = 1$$
$$n_{B_1} = \frac{1}{8}(18-4-2+8-4) = 2$$
$$n_{B_2} = \frac{1}{8}(18-4-2-8+4) = 1$$
$$n_E = \frac{1}{8}(36+4) = 5$$

A Γ tehát a következő i.r. összetevőkre bontható:
$\Gamma = 4A_1 \oplus A_2 \oplus 2B_1 \oplus B_2 \oplus 5E$
A karaktertáblából kiolvasható, hogy a transzlációs szabadsági fokok közül egy tartozik az A_1-hez (a z irányú eltolás), a forgási szabadsági fokok közül egy sem. A rezgési szabadsági fokok közül tehát $4-1=3$ tartozik a totálszimmetrikus i.r.-hez, így három paraméter szükséges a molekula egyensúlyi geometriájának meghatározására.

M 12.17.
a.) A szimmetria operátorok karakterei ebben az ábrázolásban:

	E	C_2	i	σ_h
Γ	12	0	0	4

Az i.r.-ek súlya ebben az ábrázolásban:

$$n_{A_g} = \frac{1}{4}(12+4) = 4 \qquad n_{A_u} = \frac{1}{4}(12-4) = 2$$
$$n_{B_g} = \frac{1}{4}(12-4) = 2 \qquad n_{B_u} = \frac{1}{4}(12+4) = 4$$

Az ábrázolás tehát az alábbi i.r.-ekre bontható:
$$\Gamma = 4A_g \oplus 2A_u \oplus 2B_g \oplus 4B_u$$
A transzláció és a rotáció a $\Gamma_{tr} = A_u \oplus 2B_u$ és $\Gamma_{rot} = A_g \oplus 2B_g$ i.r.-ekhez tartozik, így a rezgési szabadsági fokok a $\Gamma_v = \Gamma - \Gamma_{tr} - \Gamma_{rot} = 3A_g \oplus A_u \oplus 2B_u$ i.r.-ek között oszlanak meg. A totálszimmetrikus i.r.-hez három belső szabadsági fok tartozik, ennyi paraméter szükséges az egyensúlyi geometria jellemzéséhez.

b.) A dipólusmomentum: $\mu = \int \rho(\mathbf{r})\mathbf{r}\,\mathrm{d}V$.

Mivel a molekula elektronsűrűsége a totálszimmetrikus i.r-hez tartozik, az elűnő integrálok szabálya alapján a fenti integrál csak akkor nem nulla, ha $\mathbf{r}$ valamelyik komponense a totálszimmetrikus i.r.-hez tartozik. Ebben a pontcsoportban sem az x sem az y sem a z irány nem transzformálódik a totálszimmetrikus i.r. szerint. Ezért C_{2h} szimmetriájú molekulának nincs állandó dipólusnyomatéka.

M 12.18.
A molekula a D_{3d} pontcsoportba tartozhat. A ciklohexán szénváza szék konformációban pl. a kritériumoknak megfelelő.

M 12.19.
Egy R szimmetriaoperátor hatását egy $f(\mathbf{r})$ függvényre a következőképp értjük:
$Rf(\mathbf{r}) = f(R^{-1}\mathbf{r})$.
Az S_4^{-1} hatása $\mathbf{r}$-re: $S_4^{-1}(x,y,z) = (-y,x,-z)$.
Ha $f(x,y,z) = \frac{yz}{x}$, az $S_4 f$:
$$S_4 f(x,y,z) = \frac{xz}{y}$$

M 12.20.
Kommutatív (másnéven Abel) csoport esetén minden szimmetriaelem külön osztályt alkot, u.i. tetszőleges $A,B \in \mathcal{G}$-re $BAB^{-1} = BB^{-1}A = A$. Ezért Abel csoportban minden i.r. egy dimenziós. Legyen $\mathbf{u}$ az egyik i.r. bázisvektora, ekkor $R\mathbf{u} = \lambda\mathbf{u}$, ahol λ az R csoportelem karaktere. Ha n az R rendje (az a szám, amire $R^n = E$ teljesül, v.ö. **12.11.** feladat), akkor $R^n\mathbf{u} = \lambda^n\mathbf{u} = \mathbf{u}$
ebből következik, hogy $\lambda^n = 1$.

QED

M 12.21.
Ellenőrizzük, hogy a φ_1 ill. φ_2 függvény α szögű elforgatottja megadható-e φ_1 és φ_2 lineáris kombinációjával. Az xy síkban α szöggel pozitív irányba forgató mátrix:
$$\mathbf{O}(\alpha) = \begin{pmatrix} \cos\alpha & -\sin\alpha \\ \sin\alpha & \cos\alpha \end{pmatrix}$$
A φ_1 elforgatottja:
$$\hat{O}(\alpha)\varphi_1(\mathbf{r}) = \varphi_1(\mathbf{O}^{-1}(\alpha)\mathbf{r}) =$$
$$= (x\cos\alpha + y\sin\alpha)^2 - (-x\sin\alpha + y\cos\alpha)^2 =$$
$$= (\cos^2\alpha - \sin^2\alpha)(x^2-y^2) + (2\cos\alpha\sin\alpha)2xy =$$
$$= (\cos^2\alpha - \sin^2\alpha)\varphi_1 + (2\cos\alpha\sin\alpha)\varphi_2$$
A fenti egyenlet írásakor kihasználtuk, hogy az $\mathbf{O}(\alpha)$ inverze egyenlő a transzponáltjával, ezért
$$\mathbf{O}^{-1}(\alpha)\mathbf{r} = \begin{pmatrix} x\cos\alpha + y\sin\alpha \\ -x\sin\alpha + y\cos\alpha \end{pmatrix}$$
A φ_2 elforgatottja:
$$\hat{O}(\alpha)\varphi_2(\mathbf{r}) = \varphi_2(\mathbf{O}^{-1}(\alpha)\mathbf{r}) =$$
$$= 2(x\cos\alpha + y\sin\alpha)(-x\sin\alpha + y\cos\alpha) =$$
$$= (-2\cos\alpha\sin\alpha)(x^2-y^2) + (\cos^2\alpha - \sin^2\alpha)2xy =$$
$$= (-2\cos\alpha\sin\alpha)\varphi_1 + (\cos^2\alpha - \sin^2\alpha)\varphi_2$$

Az elforgatott függvények kifejezhetők φ_1, φ_2 -vel ezért $\{\varphi_1, \varphi_2\}$ bázist alkot a feladatban szereplő függvények terében. Az $\hat{O}(\alpha)$ mátrixa az elforgatott bázisfüggvények kifejtési koefficienseiből áll

$$\mathbf{O}_\varphi(\alpha) = \begin{pmatrix} \cos^2\alpha - \sin^2\alpha & -2\cos\alpha\sin\alpha \\ 2\cos\alpha\sin\alpha & \cos^2\alpha - \sin^2\alpha \end{pmatrix}$$

az alsó φ index a bázisra utal.

M 12.22.
A feladatban szereplő ábrán vázolt elektromos tér hatására az atom gömbszimmetriája D_{3h}-ra csökken. Redukáljuk a $2s, 2p_x, 2p_y, 2p_z$ függvények alkotta ábrázolást a D_{3h} csoportban. A szimmetriaelemek karakterei:

	E	$2C_3$	$3C_2'$	σ_h	$2S_3$	$3\sigma_v$
Γ	4	1	0	2	-1	2

Az i.r.-ek súlya ebben a négydimenziós ábrázolásban:

$$n_{A_1'} = \frac{1}{12}(4+2+2-2+6) = 1$$
$$n_{A_2'} = \frac{1}{12}(4+2+2-2-6) = 0$$
$$n_{A_1''} = \frac{1}{12}(4+2-2+2-6) = 0$$
$$n_{A_2''} = \frac{1}{12}(4+2-2+2+6) = 1$$
$$n_{E'} = \frac{1}{12}(8-2+4+2) = 1$$
$$n_{E''} = \frac{1}{12}(8-2-4-2) = 0$$

Az ábrázolás a következő i.r.-ekre redukálódik:
$\Gamma = A_1' \oplus A_2'' \oplus E'$

A Γ felbontásában két egydimenziós és egy kétdimenziós i.r. szerepel. Ezért az eredetileg elfajult szintek három szintre hasadnak fel, egy nívó kétszeresen elfajult marad.

M 12.23.
D_{3h} pontcsoport
A karaktertáblából kiolvasható, hogy a (p_x, p_y) pályák a kétdimenziós E' i.r. szerint transzformálódnak. A feladatban szereplő függvények az $E' \otimes E'$ direkt szorzat reprezentációt adják.

13. Kvantummechanikai alkalmazások

M 13.1.
Feleltessük meg a feladatban szereplő mennyiségeknek az alábbi operátorokat: $\varphi \to \hat{\varphi} = \varphi\cdot$

$$l_\varphi \to \hat{l}_\varphi = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}$$

$$\left[\hat{\varphi}, \hat{l}_\varphi\right] = \hat{\varphi}\hat{l}_\varphi - \hat{l}_\varphi\hat{\varphi} =$$

$$= -i\hbar\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi} - (-i\hbar) + -i\hbar\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi} = i\hbar$$

M 13.2.

$$\hat{l}_\alpha = \cos\alpha\,\hat{l}_z + \sin\alpha\,\hat{l}_x$$
$$\left[\hat{l}_z, \hat{l}_\alpha\right] = \hat{l}_z\hat{l}_\alpha - \hat{l}_\alpha\hat{l}_z =$$
$$= \hat{l}_z\left(\cos\alpha\,\hat{l}_z + \sin\alpha\,\hat{l}_x\right) - \left(\cos\alpha\,\hat{l}_z + \sin\alpha\,\hat{l}_x\right)\hat{l}_z =$$
$$= \cos\alpha\,\hat{l}_z^2 + \sin\alpha\,\hat{l}_z\hat{l}_x - \cos\alpha\,\hat{l}_z^2 - \sin\alpha\,\hat{l}_x\hat{l}_z =$$
$$= \sin\alpha\,\left[\hat{l}_z, \hat{l}_x\right]$$

A fenti kommutátor akkor lesz zérus, ha $\sin\alpha = 0$, ez viszont $\alpha = k\pi,\ k \in \mathbb{Z}$ esetén teljesül.

M 13.3.

$$\left[\hat{p}_x, \hat{x}^2\right] = \hat{p}_x\hat{x}^2 - \hat{x}^2\hat{p}_x =$$
$$= (\hat{x}\hat{p}_x - i\hbar)\,\hat{x} - \hat{x}\,(i\hbar + \hat{p}_x\hat{x}) =$$
$$= \hat{x}\hat{p}_x\hat{x} - i\hbar\hat{x} - i\hbar\hat{x} - \hat{x}\hat{p}_x\hat{x} = -2i\hbar\hat{x}$$

Nem önadjungált.

M 13.4.

$$\hat{l}_z = \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x$$
$$\left[\hat{l}_z, \hat{x}\right] = \hat{l}_z\hat{x} - \hat{x}\hat{l}_z =$$
$$= (\hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x)\,\hat{x} - (\hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x)\,\hat{x} =$$
$$= \hat{x}\hat{p}_y\hat{x} - \hat{y}\hat{p}_x\hat{x} - \hat{x}\hat{x}\hat{p}_y + \hat{x}\hat{y}\hat{p}_x =$$
$$= \hat{x}\hat{p}_y\hat{x} - \hat{y}\hat{p}_x\hat{x} - \hat{x}\hat{p}_y\hat{x} + \hat{y}\hat{x}\hat{p}_x =$$
$$= \hat{y}\,(\hat{x}\hat{p}_x - \hat{p}_x\hat{x}) = \hat{y}\,[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar\hat{y}$$

Nem lehet, mert a fenti kommutátor nem 0.

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 13.6.
Vizsgáljuk meg a kommutátor, mint operátor

hatását egy, az operátorok értelmezési tartományában levő Ψ függvényre.

$$\left[\hat{T},\hat{V}\right]\Psi = \left(\hat{T}\hat{V}-\hat{V}\hat{T}\right)\Psi =$$
$$= -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\Delta V\right)\Psi + \frac{\hbar^2}{2m}V\Delta\Psi =$$
$$= -\frac{\hbar^2}{2m}\mathrm{div}\left(V\mathrm{grad}\Psi + \Psi\mathrm{grad}V\right) + \frac{\hbar^2}{2m}V\Delta\Psi =$$
$$= -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\mathrm{grad}\Psi\mathrm{grad}V + V\Delta\Psi + \mathrm{grad}V\mathrm{grad}\Psi + \right.$$
$$\left. +\Psi\Delta V\right) + \frac{\hbar^2}{2m}V\Delta\Psi =$$
$$= -\frac{\hbar^2}{2m}\left(2\,\mathrm{grad}V\mathrm{grad}\Psi + \left(\Delta V\right)\Psi\right)$$

A fenti kifejezés akkor lesz azonosan 0-val egyenlő, ha $\mathrm{grad}V = \mathbf{0}$, azaz $V=$ konstans.

M 13.7.

$$\hat{l}_x = \hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y$$
$$\hat{l}_z = \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x$$
$$\left[\hat{l}_x,\hat{l}_z\right] = \hat{l}_x\hat{l}_z - \hat{l}_z\hat{l}_x =$$
$$= \left(\hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y\right)\left(\hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x\right) -$$
$$- \left(\hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x\right)\left(\hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y\right) =$$

$$= \hat{y}\hat{p}_z\hat{x}\hat{p}_y - \hat{z}\hat{p}_y\hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_z\hat{y}\hat{p}_x + \hat{z}\hat{p}_y\hat{y}\hat{p}_x -$$
$$-\hat{x}\hat{p}_y\hat{y}\hat{p}_z + \hat{y}\hat{p}_x\hat{y}\hat{p}_z + \hat{x}\hat{p}_y\hat{z}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x\hat{z}\hat{p}_y =$$

$$= \hat{y}\hat{x}\hat{p}_z\hat{p}_y - \underline{\hat{z}\hat{x}\hat{p}_y\hat{p}_y} - \hat{y}\hat{y}\hat{p}_z\hat{p}_x + \hat{z}\hat{p}_y\hat{y}\hat{p}_x -$$
$$-\hat{x}\hat{p}_y\hat{y}\hat{p}_z + \hat{y}\hat{y}\hat{p}_x\hat{p}_z + \underline{\hat{x}\hat{z}\hat{p}_y\hat{p}_y} - \hat{y}\hat{z}\hat{p}_x\hat{p}_y =$$

$$= \hat{y}\hat{x}\hat{p}_z\hat{p}_y - \hat{x}\left(i\hbar + \hat{y}\hat{p}_y\right)\hat{p}_z +$$
$$+\hat{z}\left(i\hbar + \hat{y}\hat{p}_y\right)\hat{p}_x - \hat{y}\hat{z}\hat{p}_x\hat{p}_y =$$

$$= \underline{\hat{y}\hat{x}\hat{p}_z\hat{p}_y} - i\hbar\hat{x}\hat{p}_z - \underline{\hat{x}\hat{y}\hat{p}_y\hat{p}_z} +$$
$$+i\hbar\hat{z}\hat{p}_x + \hat{z}\hat{y}\hat{p}_y\hat{p}_x - \hat{y}\hat{z}\hat{p}_x\hat{p}_y =$$

$$= i\hbar\left(\hat{x}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_x\right) = -i\hbar\hat{l}_y$$

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:

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

A probléma gömbszimmetriáját megtartandó, Descartes koordinátákról attérünk 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 13.9.

Az energia-idő határozatlansági reláció szerint:

$$\Delta E \cdot \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}$$

$$\Delta t \geq \frac{\hbar}{2\Delta E} = \frac{6{,}2 \cdot 10^{-34}\,\mathrm{J\cdot s}}{4\pi \cdot 1{,}602 \cdot 10^{-25}\,\mathrm{J}} = 3{,}08 \cdot 10^{-10}\,\mathrm{s}$$

M 13.10.

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + \frac{1}{2}kx^2$$

$$\hat{H}\Psi_0(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\left(e^{-\frac{1}{2}\gamma x^2}\right) + \frac{1}{2}kx^2 \cdot e^{-\frac{1}{2}\gamma x^2} =$$
$$= -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left(-\gamma x e^{-\frac{1}{2}\gamma x^2}\right) + \frac{1}{2}kx^2 \cdot e^{-\frac{1}{2}\gamma x^2} =$$
$$= -\frac{\hbar^2}{2m}\left(-\gamma e^{-\frac{1}{2}\gamma x^2} + \gamma^2 x^2 e^{-\frac{1}{2}\gamma x^2}\right) +$$
$$+\frac{1}{2}kx^2 \cdot e^{-\frac{1}{2}\gamma x^2} =$$

$$= \left[\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{\sqrt{km}}{\hbar} - \frac{\hbar^2}{2m}\frac{km}{\hbar^2}x^2 + \frac{1}{2}kx^2\right]e^{-\frac{1}{2}\gamma x^2} =$$

$= E_0\Psi_0(x)$

Innen:

$$E_0 = \frac{1}{2}\frac{h}{2\pi}\sqrt{\frac{k}{m}} = \frac{1}{2}h\nu$$

M 13.11.

a.) $\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}$

$\langle\hat{T}\rangle = \langle\Psi_0(x)|\hat{T}|\Psi_0(x)\rangle =$

$$= -\sqrt{\frac{\gamma}{\pi}}\frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{1}{2}\gamma x^2}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}e^{-\frac{1}{2}\gamma x^2}$$

Az $e^{-\frac{1}{2}\gamma x^2}$ második deriváltja x szerint:

$\frac{\mathrm{d}^2(e^{-\frac{1}{2}\gamma x^2})}{\mathrm{d}x^2} = e^{-\frac{1}{2}\gamma x^2}(\gamma^2x^2 - \gamma)$

A $\langle\hat{T}\rangle$-ben szereplő integrál (táblázatból):

$\int_{-\infty}^{\infty} e^{\gamma x^2}(\gamma^2x^2 - \gamma) = -\gamma\sqrt{\frac{\pi}{\gamma}} + \frac{\gamma^2}{2}\sqrt{\frac{\pi}{\gamma^3}}$

A $\hat{T}$ várható értéke:

$\langle\hat{T}\rangle = \frac{1}{2}\gamma\frac{\hbar^2}{2m} = \frac{1}{2}\frac{h}{2\pi}\sqrt{\frac{k}{m}} = \frac{1}{4}h\nu$

b.) $\hat{H}^{(0)} = \hat{T} + \frac{1}{2}kx^2$

$\hat{W} = bx^6$

$E^{(0)} + E^{(1)} = \langle\Psi_0(x)|\hat{H}^{(0)} + \hat{W}|\Psi_0(x)\rangle =$

$$= \frac{1}{2}hv + b\sqrt{\gamma}\frac{1\cdot3\cdot5\cdot7\cdot9\cdot11}{2^6}$$

M 13.12.

$$\text{a, } \langle f(x)|f(x)\rangle = \int_{-a}^{a}\cos^2\frac{\pi}{2a}x\mathrm{d}x =$$

$$= \left[\frac{1}{2}x + \frac{2a}{4\pi}\sin\frac{\pi}{a}x\right]_{-a}^{a} = \frac{a}{2} - \left(-\frac{a}{2}\right) = a$$

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

A variációs elv szerint:

$$E_0 \le E(a) = \langle f'(x)|\hat{H}f'(x)\rangle =$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{a}\int_{-a}^{a}\cos\frac{\pi}{2a}x\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\left(\cos\frac{\pi}{2a}x\right)\,\mathrm{d}x+$$

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

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

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

$$= \frac{h^2}{32ma^3}a + \frac{k}{a}\left[\frac{2\cdot4a^2x}{\pi^2}\cos\frac{\pi}{2a}x+\right.$$

$$\left.+\left(\frac{2ax^2}{\pi} - \frac{2\cdot8a^3}{\pi^3}\right)\sin\frac{\pi}{2a}x\right]_{-a}^{a} =$$

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

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

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

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

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

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

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

M 13.13.

$$F = -\operatorname{grad}V = -\frac{\partial V}{\partial x} = -ax + bx^2$$

$$V(x) = \int -ax + bx^2\,\mathrm{d}x + c = -\frac{a}{2}x^2 + \frac{b}{3}x^3 + c$$

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} - \frac{a}{2}x^2 + \frac{b}{3}x^3 + c$$

A Schrödinger-egyenlet:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\Psi}{\mathrm{d}x^2} + \left(-\frac{a}{2}x^2 + \frac{b}{3}x^3 + c - E\right)\Psi = 0$$

M 13.14.

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

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

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

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 13.16.

a, $F = -\dfrac{\partial V}{\partial q} = 2D\left(1 - e^{-\beta q}\right)\cdot \beta e^{-\beta q} =$
$= 2\beta D\left(1 - e^{-\beta q}\right) e^{-\beta q}$

b, A potenciál paraméterei közül a D a részecske végtelenbeli potenciális energiája, a β pedig erőállandó jellegű (lásd harmonikus oszcillátor k-ja).

c, $-\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{\mathrm{d}^2\Psi}{\mathrm{d}q^2} + \left[D\left(1 - e^{-\beta q}\right)^2 - E\right]\Psi = 0$

M 13.17.
Normáljuk a próbafüggvényt:

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

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

A variációs elv szerint:

$$E_0 \leq E(\alpha) = \langle \varphi'(x)|\hat{H}\varphi'(x)\rangle =$$
$$= -\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{2\alpha}{\pi}\int\limits_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha x^2}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\left(e^{-\alpha x^2}\right)\mathrm{d}x +$$
$$+\frac{2\alpha}{\pi}\cdot\frac{1}{2}F\int\limits_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-2\alpha x^2}\,\mathrm{d}x =$$

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

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

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

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

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

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

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

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

M 13.18.
A normált próbafüggvény a következő:

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

A variációs elv szerint:

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

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 13.19.

$T_1 = \langle \Psi_1 | \hat{T}\Psi_1 \rangle =$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m}\int_{-1}^{1}\cos\frac{\pi x}{2}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\left(\cos\frac{\pi x}{2}\right)\mathrm{d}x =$$

$$= \frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{\pi^2}{4}\int_{-1}^{1}\cos^2\frac{\pi x}{2}\,\mathrm{d}x = \frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{\pi^2}{4} = \frac{h^2}{32m}$$

$T_2 = \langle \Psi_2 | \hat{T}\Psi_2 \rangle =$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\frac{1}{4}}^{\frac{1}{4}} 2\cos 2\pi x\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\left(2\cos 2\pi x\right)\mathrm{d}x =$$

$$= \frac{\hbar^2}{2m}\cdot 4\pi^2\int_{-\frac{1}{4}}^{\frac{1}{4}} 4\cos^2 2\pi x\,\mathrm{d}x = \frac{\hbar^2}{2m}\cdot 4\pi^2 = \frac{h^2}{2m}$$

A második számú hullámfüggvény esetében lesz nagyobb a kinetikus energia.

M 13.20.

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + e^{-x^2}$$

A Schrödinger-egyenlet:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\Psi}{\mathrm{d}x^2} + \left(e^{-x^2} - E\right)\Psi = 0$$

M 13.21.

$$\Psi(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{6\pi}}\left(2\cos 2\varphi - 1\right)$$

$$\hat{l}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}$$

$\langle l_z \rangle = \langle \Psi | \hat{l}_z \Psi \rangle =$

$$= \int_0^{2\pi}\frac{1}{\sqrt{6\pi}}\left(2\cos 2\varphi - 1\right)\cdot$$

$$\cdot\left[-i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}\left(\frac{1}{\sqrt{6\pi}}\left(2\cos 2\varphi - 1\right)\right)\right]\mathrm{d}\varphi =$$

$$= -\frac{i\hbar}{6\pi}\int_0^{2\pi}\left(2\cos 2\varphi - 1\right)\left(-2\cdot 2\sin 2\varphi\right)\mathrm{d}\varphi =$$

$$\frac{4i\hbar}{6\pi}\int_0^{2\pi}\left(\sin 4\varphi - \sin 2\varphi\right)\mathrm{d}\varphi = 0$$

A keresett valószínűségek rendre: 0, 0, 1, 0, 0

M 13.22.

$$\Psi_{1s} = \Psi_{100} = \frac{1}{\sqrt{\pi}}e^{-r}$$

$$\langle \Psi_{1s} | \Psi_{1s} \rangle = \int_0^{\infty}\int_0^{\pi}\int_0^{2\pi}\frac{1}{\pi}e^{-2r}r^2\sin\vartheta\,\mathrm{d}r\,\mathrm{d}\vartheta\,\mathrm{d}\varphi =$$

$$= \frac{1}{\pi}\int_0^{\infty}r^2e^{-2r}\,\mathrm{d}r\int_0^{\pi}\sin\vartheta\,\mathrm{d}\vartheta\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\varphi = \frac{1}{\pi}\cdot\frac{2!}{2^3}\cdot 4\pi = 1$$

M 13.23.

$$\Psi_{1s} = \Psi_{100} = \frac{1}{\sqrt{\pi}}e^{-r}$$

$$\Psi_{2s} = \Psi_{200} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}}\left(2-r\right)e^{-\frac{r}{2}}$$

$\langle \Psi_{1s} | \Psi_{2s} \rangle =$

$$= \int_0^{\infty}\int_0^{\pi}\int_0^{2\pi}\frac{1}{\sqrt{\pi}}e^{-r}\frac{1}{4\sqrt{2\pi}}\left(2-r\right)e^{-\frac{r}{2}}r^2\sin\vartheta\,\mathrm{d}r\,\mathrm{d}\vartheta\,\mathrm{d}\varphi =$$

$$= \frac{1}{4\pi\sqrt{2}}\int_0^{\infty}r^2\left(2-r\right)e^{-\frac{3}{2}r}\,\mathrm{d}r\int_0^{\pi}\sin\vartheta\,\mathrm{d}\vartheta\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\varphi =$$

$$= \frac{1}{4\pi\sqrt{2}}\left[\int_0^{\infty}2r^2e^{-\frac{3}{2}r}\,\mathrm{d}r + \int_0^{\infty}-r^3e^{-\frac{3}{2}r}\,\mathrm{d}r\right]\cdot 4\pi =$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(2\cdot\frac{2!}{\left(\frac{3}{2}\right)^3} - \frac{3!}{\left(\frac{3}{2}\right)^4}\right) = 0$$

M 13.24.

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

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

$\langle V \rangle = \langle \Psi_{2p_0} | \hat{V}\Psi_{2p_0} \rangle =$

$$= -\frac{1}{32\pi}\int_0^{\infty}\int_0^{\pi}\int_0^{2\pi}re^{-\frac{r}{2}}\cos\vartheta\frac{1}{r}re^{-\frac{r}{2}}\cos\vartheta\cdot$$

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

$$= -\frac{1}{32\pi}\cdot 2\pi\int_0^{\infty}r^3e^{-r}\,\mathrm{d}r\int_0^{\pi}\cos^2\vartheta\sin\vartheta\,\mathrm{d}\vartheta =$$

$$= -\frac{1}{16}\cdot\frac{3!}{1^4}\cdot\left(-\frac{1}{3}\left[\cos^3\vartheta\right]_0^{\pi}\right) = -\frac{1}{4}$$

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

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

$$\langle T\rangle = \langle\Psi_{2p_0}|\hat{V}\Psi_{2p_0}\rangle =$$
$$= \frac{1}{32\pi}\int_0^\infty\int_0^\pi\int_0^{2\pi} re^{-\frac{r}{2}}\cos\vartheta\left(1-\frac{r}{8}\right)e^{-\frac{r}{2}}\cos\vartheta\cdot$$
$$\cdot r^2\sin\vartheta\,\mathrm{d}r\,\mathrm{d}\vartheta\,\mathrm{d}\varphi =$$
$$= \frac{1}{32\pi}\cdot 2\pi\int_0^\infty\left(r^3-\frac{r^4}{8}\right)e^{-r}\,\mathrm{d}r\int_0^\pi\cos^2\vartheta\sin\vartheta\,\mathrm{d}\vartheta =$$
$$= \frac{1}{16}\cdot\left(\frac{3!}{1^4}-\frac{4!}{8\cdot 1^5}\right)\cdot\left(-\frac{1}{3}\left[\cos^3\vartheta\right]_0^\pi\right) = \frac{1}{8}$$

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

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

M 13.25.

$$\langle r\rangle = \langle\Psi_{2p_0}|\hat{r}|\Psi_{2p_0}\rangle =$$
$$\int_0^\infty\int_0^\pi\int_0^{2\pi}\frac{1}{4\sqrt{2\pi}}re^{-\frac{r}{2}}\cos\vartheta\, r\,\frac{1}{4\sqrt{2\pi}}re^{-\frac{r}{2}}\cos\vartheta\cdot$$
$$\cdot r^2\sin\vartheta\,\mathrm{d}r\,\mathrm{d}\vartheta\,\mathrm{d}\varphi =$$
$$= \frac{1}{32\pi}\int_0^\infty r^5e^{-r}\,\mathrm{d}r\int_0^\pi\cos^2\vartheta\sin\vartheta\,\mathrm{d}\vartheta\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\varphi =$$
$$= \frac{1}{32\pi}\cdot\frac{5!}{1^6}\cdot\frac{2}{3}\cdot 2\pi = 5$$

M 13.26.

$$\Psi_{100s} = \Psi_{100,0,0}$$
$$\langle r\rangle = \frac{a_0}{2}\left[3\cdot 100^2 - 0\,(0+1)\right] = 15000a_0 =$$
$$= 1{,}5\cdot 10^4\cdot 0.529\cdot 10^{-10}\,\mathrm{m} = 7{,}935\cdot 10^{-7}\,\mathrm{m} \approx 10^{-6}\,\mathrm{m}$$

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.

$$\langle V\rangle = \langle\Psi_{3p_{+1}}|\hat{V}\Psi_{3p_{+1}}\rangle =$$
$$= -\frac{1}{81^2\pi}\int_0^\infty\int_0^\pi\int_0^{2\pi}\left(6r-r^2\right)^2e^{-\frac{2r}{3}}\frac{1}{r}\sin^2\vartheta\, e^{-i\varphi}e^{i\varphi}\cdot$$
$$\cdot r^2\sin\vartheta\,\mathrm{d}r\,\mathrm{d}\vartheta\,\mathrm{d}\varphi =$$
$$= -\frac{1}{6561\pi}\cdot 2\pi\int_0^\infty r\left(6r-r^2\right)^2e^{-\frac{2r}{3}}\,\mathrm{d}r\int_0^\pi\sin^3\vartheta\,\mathrm{d}\vartheta =$$
$$= -\frac{2}{6561}\int_0^\infty\left(36r^3-12r^4+r^5\right)e^{-\frac{2r}{3}}\,\mathrm{d}r\cdot$$
$$\cdot\left[-\cos\vartheta+\frac{1}{3}\cos^3\vartheta\right]_0^\pi =$$
$$-\frac{2}{3^8}\cdot\frac{4}{3}\cdot\left(36\frac{3!3^4}{2^4} - 12\frac{4!3^5}{2^5} + \frac{5!3^6}{2^6}\right) = -\frac{1}{9}$$

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

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

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

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

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

$\langle L\rangle = \sqrt{2}\hbar$ (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 13.28.

a, $\Psi_{2s} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}}(2-r)\,e^{-\frac{r}{2}}$

$r_{cs} = 2$

b, A függvény jelentése: az elektron r körüli dr vastagságú gömbhéjban való megtalálásának valószínűsége.

$$\Phi(r) = |\Psi(r)|^2 4\pi r^2 = \sqrt{\frac{\pi}{2}} r^2 (2-r)^2 e^{-r}$$

Szélsőértéke a függvénynek ott lehet, ahol az első deriváltja 0:

$$\frac{\partial \Phi}{\partial r} = 0$$

$$\sqrt{\frac{\pi}{2}}\Big[-2r^2(2-r)\,e^{-r} - r^2(2-r)^2 e^{-r} + +2r(2-r)^2 e^{-r}\Big] = 0$$

$$(2-r)\left[-2r^2 - r^2(2-r) + 2r(2-r)\right] = 0$$

$$r(2-r)\left(r^2 - 6r + 4\right) = 0$$

Az egyenlet megoldásai:

$r_1 = 0 \quad r_2 = 2 \quad r_3 = 3+\sqrt{3} \quad r_4 = 3-\sqrt{3}$

M 13.29.

a, Az állapotfüggvény az alábbi két sajátfüggvény lineáris kombinációja:

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{2}}(\Psi_{32+1} + \Psi_{32-1})$$

A fenti egyenlőség könnyen belátható az alábbi azonosság alapján:

$$\cos m\varphi = \frac{e^{im\varphi} + e^{-im\varphi}}{2}$$

b, $\langle l_z \rangle = \pm\hbar$

A két érték egyaránt $\frac{1}{2}$–$\frac{1}{2}$ valószínűséggel mérhető.

M 13.30.

Igen, mivel az integrandus az x és az y változó szerint is páratlan függvény lesz. Integrálással:

$$\langle 2p_x | 2p_y \rangle = \frac{1}{2i}\langle 2p_{+1} + 2p_{-1} | 2p_{+1} - 2p_{-1} \rangle =$$

$$= \frac{1}{2i}\big(\langle 2p_{+1}|2p_{+1}\rangle + \langle 2p_{+1}|2p_{-1}\rangle -$$

$$-\langle 2p_{-1}|2p_{+1}\rangle - \langle 2p_{-1}|2p_{-1}\rangle\big) =$$

$$= \frac{1}{2i}(1+0-0-1) = 0$$

M 13.31.

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

$$\alpha = 1$$

M 13.32.

$$P(r < a_0) = \int\limits_0^1 |\Psi_{1s}|^2 4\pi r^2 \,\mathrm{d}r = \frac{1}{\pi}\int\limits_0^1 4\pi r^2 e^{-2r}\,\mathrm{d}r =$$

$$= 4\int\limits_0^1 r^2 e^{-2r}\,\mathrm{d}r = 4\left[e^{-r2}\left(-\frac{r^2}{2} - \frac{2r}{4} - \frac{2}{8}\right)\right]_0^1 =$$

$$= 4\left[\frac{1}{e^2}\left(-\frac{1}{2} - \frac{1}{2} - \frac{1}{4}\right) + \frac{1}{4}\right] = 1 - \frac{5}{e^2} \approx 0{,}32$$

M 13.33.

$$\operatorname{grad}\Psi_{2s} = \frac{\partial \Psi_{2s}}{\partial r}\mathbf{e}_r = \left[-\frac{1}{2}(2-r)\,e^{-\frac{r}{2}} - e^{-\frac{r}{2}}\right]\mathbf{e}_r =$$

$$= \left(\frac{r}{2} - 2\right)e^{-\frac{r}{2}}\mathbf{e}_r$$

M 13.34.

$$N^2 = \langle \Psi_{2s}|\Psi_{2s}\rangle =$$

$$= \int\limits_0^\infty \int\limits_0^\pi \int\limits_0^{2\pi} (2-r)^2\, e^{-r} r^2 \sin\vartheta \,\mathrm{d}r\,\mathrm{d}\vartheta\,\mathrm{d}\varphi =$$

$$= \int\limits_0^\infty r^2 (2-r)^2 e^{-r}\,\mathrm{d}r \int\limits_0^\pi \sin\vartheta\,\mathrm{d}\vartheta \int\limits_0^{2\pi}\mathrm{d}\varphi =$$

$$= 4\pi \int\limits_0^\infty \left(4r^2 - 4r^3 + r^4\right) e^{-r}\,\mathrm{d}r =$$

$$= 4\pi\left(4\frac{2!}{1^3} - 4\frac{3!}{1^4} + \frac{4!}{1^5}\right) = 32\pi$$

$$N = 4\sqrt{2\pi}$$

$$\Psi'_{2s} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}}(2-r)\,e^{-\frac{r}{2}}$$

A keresett valószínűség:

$$P(r < a_0) = \int\limits_0^1 |\Psi_{2s}|^2 4\pi r^2\,\mathrm{d}r =$$

$$= \frac{1}{32\pi}\int\limits_0^1 4\pi r^2 (2-r)^2 e^{-r}\,\mathrm{d}r =$$

$$= \frac{1}{8}\int\limits_0^1 \left(4r^2 - 4r^3 + r^4\right) e^{-r}\,\mathrm{d}r$$

Táblázat segítségével az alábbi értékekeket kapjuk az integrál egyes tagjaira:

$$\int\limits_0^1 r^2 e^{-r}\,\mathrm{d}r = 2 - \frac{5}{e}$$

$$\int\limits_0^1 r^3 e^{-r}\,\mathrm{d}r = 6 - \frac{16}{e}$$

$$\int\limits_0^1 r^4 e^{-r}\,\mathrm{d}r = 24 - \frac{65}{e}$$

Ezek alapján az integrál, azaz a keresett valószínűség értéke:

$$P = 1 - \frac{21}{8e} \approx 0,034$$

M 13.35.

$$\hat{W} = a\frac{1}{r^2}$$

$$E_0^{(0)} = -\frac{1}{2} \qquad \text{(atomi egységekben)}$$

$$\Delta E_0^{(1)} = \langle \Psi_0^{(0)}|\hat{W}\Psi_0^{(0)}\rangle = \langle \Psi_{100}|a\frac{1}{r^2}\Psi_{100}\rangle =$$

$$= \frac{a}{\pi}\int\limits_0^\infty \int\limits_0^\pi \int\limits_0^{2\pi} e^{-r}\frac{1}{r^2}e^{-r} r^2 \sin\vartheta\,\mathrm{d}r\,\mathrm{d}\vartheta\,\mathrm{d}\varphi =$$

$$= \frac{a}{\pi}\int\limits_0^\infty e^{-2r}\,\mathrm{d}r \int\limits_0^\pi \sin\vartheta\,\mathrm{d}\vartheta \int\limits_0^{2\pi}\mathrm{d}\varphi =$$

$$= \frac{a}{\pi}\left[-\frac{1}{2}e^{-2r}\right]_0^\infty \cdot 4\pi = 2a$$

a megadott értékeit behelyettesítve:

$a = 0{,}001$ $\Delta E_0^{(1)} = 0{,}002 \ll E_0^{(0)}$ elfogadható becslés

$a = 1$ $\Delta E_0^{(1)} = 2 = -4E_0^{(0)}$ irreális érték

III. FÜGGELÉK

1. Néhány gyakrabban előforduló pontcsoport karaktertáblája

C_s	E	σ_h		
A'	1	1	x, y, R_z	x^2, y^2, z^2, xy
A''	1	-1	z, R_x, R_y	yz, xz

C_2	E	C_2		
A	1	1	z, R_z	x^2, y^2, z^2, xy
B	1	-1	x, y, R_x, R_y	yz, xz

D_2	E	$C_2(z)$	$C_2(y)$	$C_2(x)$		
A	1	1	1	1		x^2, y^2, z^2
B_1	1	1	-1	-1	z, R_z	xy
B_2	1	-1	1	-1	y, R_y	xz
B_3	1	-1	-1	1	x, R_x	yz

C_{2v}	E	C_2	$\sigma_v(xz)$	$\sigma'_v(yz)$		
A_1	1	1	1	1	z	x^2, y^2, z^2
A_2	1	1	-1	-1	R_z	xy
B_1	1	-1	1	-1	x, R_y	xz
B_2	1	-1	-1	1	y, R_x	yz

C_{3v}	E	$\{C_3, C_3^2\}$	$\{\sigma_{v1}, \sigma_{v2}, \sigma_{v3}\}$		
A_1	1	1	1	z	$x^2 + y^2, z^2$
A_2	1	1	-1	R_z	
E	2	-1	0	$(x, y), (R_x, R_y)$	$(x^2 - y^2, xy), (xz, yz)$

C_{4v}	E	$\{C_4,C_4^3\}$	C_2	$\{\sigma_{v1},\sigma_{v2}\}$	$\{\sigma_{d1},\sigma_{d2}\}$		
A_1	1	1	1	1	1	z	x^2+y^2, z^2
A_2	1	1	1	-1	-1	R_z	
B_1	1	-1	1	1	-1		x^2-y^2
B_2	1	-1	1	-1	1		xy
E	2	0	-2	0	0	$(x,y)(R_x,R_y)$	(xz,yz)

C_{2h}	E	C_2	i	σ_h		
A_g	1	1	1	1	R_z	x^2,y^2,z^2,xy
B_g	1	-1	1	-1	R_x,R_y	xz,yz
A_u	1	1	-1	-1	z	
B_u	1	-1	-1	1	x,y	

D_{2h}	E	$C_2(z)$	$C_2(y)$	$C_2(x)$	i	$\sigma(xy)$	$\sigma(xz)$	$\sigma(yz)$		
A_g	1	1	1	1	1	1	1	1		x^2, y^2, z^2
B_{1g}	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	R_z	xy
B_{2g}	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	R_y	xz
B_{3g}	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	R_x	yz
A_u	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1		
B_{1u}	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	z	
B_{2u}	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	y	
B_{3u}	1	-1	-1	1	-1	1	1	-1	x	

D_{3h}	E	$2C_3$	$3C_2$	σ_h	$2S_3$	$3\sigma_v$		
A_1'	1	1	1	1	1	1		$x^2+y^2,\ z^2$
A_2'	1	1	-1	1	1	-1	R_z	
E'	2	-1	0	2	-1	0	(x,y)	(x^2-y^2,xy)
A_1''	1	1	1	-1	-1	-1		
A_2''	1	1	-1	-1	-1	1	z	
E''	2	-1	0	-2	1	0	(R_x,R_y)	(xz,yz)

D_{2d}	E	$2S_4$	C_2	$2C_2'$	$2\sigma_d$		
A_1	1	1	1	1	1		$x^2+y^2,\ z^2$
A_2	1	1	1	-1	-1	R_z	
B_1	1	-1	1	1	-1		x^2-y^2
B_2	1	-1	1	-1	1	z	xy
E	2	0	-2	0	0	$(x,y),\ (R_x,R_y)$	(xz,yz)

D_{3d}	E	$2C_3$	$3C_2$	i	$2S_6$	$3\sigma_d$		
A_{1g}	1	1	1	1	1	1		$x^2+y^2,\ z^2$
A_{2g}	1	1	-1	1	1	-1	R_z	
E_g	2	-1	0	2	-1	0	(R_x,R_y)	$(x^2-y^2,xy),\ (xz,yz)$
A_{1u}	1	1	1	-1	-1	-1		
A_{2u}	1	1	-1	-1	-1	1	z	
E_u	2	-1	0	-2	1	0	(x,y)	

S_2	E	i		
A_g	1	1	$R_x,\ R_y,\ R_z$	$x^2,\ y^2,\ xy,\ xz,\ yz$
A_u	1	-1	$x,\ y,\ z$	

$C_{\infty h}$	E	$2C_\infty^\varphi$	$\dots$	$\infty\sigma_v$		
$A_1 \equiv \Sigma^+$	1	1	$\dots$	1	z	$x^2+y^2,\ z^2$
$A_2 \equiv \Sigma^-$	1	1	$\dots$	-1	R_z	
$E_1 = \Pi$	2	$2\cos\varphi$	$\dots$	0	$(x,y),\ (R_x,R_y)$	(xz,yz)
$E_2 \equiv \Delta$	2	$2\cos 2\varphi$	$\dots$	0		(x^2-y^2,xy)
$E_3 \equiv \Phi$	2	$2\cos 3\varphi$	$\dots$	0		
$\dots$	$\dots$	$\dots$	$\dots$	$\dots$		

$D_{\infty h}$	E	$2C_\infty^\varphi$	$\dots$	$\infty\sigma_v$	i	$2S_\infty^\varphi$	$\dots$	∞C_2		
Σ_g^+	1	1	$\dots$	1	1	1	$\dots$	1		$x^2+y^2,\ z^2$
Σ_g^-	1	1	$\dots$	-1	1	1	$\dots$	-1	R_z	
Π_g	2	$2\cos\varphi$	$\dots$	0	2	$-2\cos\varphi$	$\dots$	0	(R_x,R_y)	(xz,yz)
Δ_g	2	$2\cos 2\varphi$	$\dots$	0	2	$2\cos 2\varphi$	$\dots$	0		(x^2-y^2,xy)
$\dots$	$\dots$	$\dots$	$\dots$	$\dots$	$\dots$	$\dots$	$\dots$	$\dots$		
Σ_u^+	1	1	$\dots$	1	-1	-1	$\dots$	-1	z	
Σ_u^-	1	1	$\dots$	-1	-1	-1	$\dots$	1		
Π_u	2	$2\cos\varphi$	$\dots$	0	-2	$2\cos\varphi$	$\dots$	0	(x,y)	
Δ_u	2	$2\cos 2\varphi$	$\dots$	0	-2	$-2\cos 2\varphi$	$\dots$	0		
$\dots$	$\dots$	$\dots$	$\dots$	$\dots$	$\dots$	$\dots$	$\dots$	$\dots$		

2. A hidrogén atom sajátfüggvényei[3]

3

$1s$	$\psi_{100} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-r}$
$2s$	$\psi_{200} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}}(2-r)e^{-r/2}$
$2p_0$	$\psi_{210} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} r e^{-r/2}\cos(\theta)$
$2p_{\pm1}$	$\psi_{21\pm1} = \frac{1}{8\sqrt{\pi}} r e^{-r/2}\sin(\theta)e^{\pm i\phi}$
$3s$	$\psi_{300} = \frac{2}{81\sqrt{3\pi}}(27-18r+2r^2)e^{-r/3}$
$3p_0$	$\psi_{310} = \frac{\sqrt{2}}{81\sqrt{\pi}} r(6-r)e^{-r/3}\cos(\theta)$
$3p_{\pm1}$	$\psi_{31\pm1} = \frac{1}{81\sqrt{\pi}} r(6-r)e^{-r/3}\sin(\theta)e^{\pm i\phi}$
$3d_0$	$\psi_{320} = \frac{1}{81\sqrt{6\pi}} r^2 e^{-r/3}(3\cos^2(\theta)-1)$
$3d_{\pm1}$	$\psi_{32\pm1} = \frac{1}{81\sqrt{\pi}} r^2 e^{-r/3}\sin(\theta)\cos(\theta)e^{\pm i\phi}$
$3d_{\pm2}$	$\psi_{32\pm2} = \frac{1}{162\sqrt{\pi}} r^2 e^{-r/3}\sin^2(\theta)e^{\pm 2i\phi}$

[3] Ezekben a képletekben atomi távolságegységeket használunk: 1 a.u. = 1 bohr = 0.5291772 Å.

3. Lexikai minimum kémiai matematikából

1. Analízis blokk

A)

Kronecker- delta
ordo
skalárfüggvény, vektorfüggvény
konfigurációs tér
dimenzió
metszet
kritikus pont
nyeregpont
szabadsági fok
derivált
differenciál-operátor
kommutátor
Jacobi determináns
teljes derivált, teljes differenciál
láncszabály
gradiens
divergencia
rotáció
nabla operátor
Laplace operátor
szélsőérték
mellékfeltétel
Lagrange-multiplikátor
Newton-Raphson módszer
Hess-mátrix
normálkoordináta
funkcionál
variáció
Euler-Lagrange egyenletek
Ritz módszer
lineáris variációs feladat
ívhossz integrál
vonalintegrál
kettős, hármas, stb. integrál
szukcesszív integrálás
felületi integrálok
Descartes koordináták
polárkoordináták
gömbi koordináták
ferdevonalú koordináták
átfedési mátrix
forgásmátrix
unitér mátrix
Euler összefüggés
trigonometrikus alak, komplex számé
komplex függvény
Cauchy-Riemann egyenletek
analitikus függvény
pólus
Cauchy-féle integrál formula

Taylor-sor
Laurent sor
residuum
operátor
inverz operátor
adjungált operátor
önadjungált operátor
Hermiticitás
Unitér operátor
sajátértékprobléma
spektrum
sajátvektor
degeneráció
degenerált altér
teljes tér
Euklideszi tér
Hilbert tér
norma
skalárszorzat
függvénytér
L_2 tér
felcserélhető operátorok
diszkrét spektrum
folytonos spektrum
lineáris operátor
operátor spúrja
bra vektor, ket vektor
projetor
idempotencia
egységfelbontás
spektrális felbontás
mátrixreprezentáció
közönséges differenciálegyenlet
parciális differenciálegyenlet
differenciálegyenlet rendje
homogén diffegyenlet
inhomogén diffegyenlet
lineáris diffegyenlet
kezdeti feltétel
peremfeltétel
partikuláris megoldás
általános megoldás
aszimptotika
változók szétválasztása
integráló tényező
Sommerfeld-féle polinommódszer
Dirac-delta
Parciális diffegyenlet szeparálása
konvolúció
Fourier transzformáció
Fourier sor
függvénysorok
ortogonalizációs eljárás
ortogonális polinomok
Harmonikus gömbfüggvények

B) (*)
centrális tér
nívófelület
elliptikus, parabolikus, hiperbolikus pont (felületen)
Maxwell-reláció
deriválttenzor
Poisson egyenlet
egységugrás (Heavyside) függvény
Stieltjes integrál
integráltételek (Gauss-tétel, stb.)
hengerkoordináták
elliptikus koordináták
ívelemnégyzet
metrikus tenzor
görbevonalú koordináták
komplex számgömb
szingularitás
n-ed rendű pólus
metrikus tér
normált tér
Banach tér
antihermitikus operátor
antikommutátor
normáloperátor
Green függvény
Laplace transzformáció
integráltranszformáció
integrálegyenlet

2. Csoportelmélet

A)
csoport
csoport rendje
szorzási táblázat, szorzási tábla
Abel csoport
konjugált elem
konjugált osztály
alcsoport
szimmetriacsoport
pontcsoport
szimmetriaoperátor
C_n tengely
tükrözés
inverzió
reprezentáció, ábrázolás
hű reprezentáció
triviális reprezentáció
totálszimmetrikus reprezentáció
karakter
reprezentációt kifeszítő vektor
reprezentáció bázisvektora
reprezentáció dimenziója

direkt összeg
redukálás
reducibilis reprezentáció
irreducibilis reprezentáció, irrep
irrep bázisvektora
(kis) ortogonalitási tétel
irrep projektora
karaktertábla
antiszimmetria
szimmetriakoordináták
rezgési módusok
direktszorzat (mátrixé)
direktszorzat-reprezentáció
eltűnő integrálok szabálya

B) (*)
ciklikus csoport
csoportelem rendje
transzlációs csoport
folytonos csoport
Schur lemma
nagy ortogonalitási tétel

3. A kvantummechanika matematikája

A)
hullámfüggvény, állapotfüggvény
kötött állapot
időfüggetlen Scrödinger egyenlet
koordináta operátor
impulzus operátor
kvantálás
Heisenberg-féle felcserélési törvény
impulzusmomentum operátor
energia operátor
valószínűség-sűrűség
elektronsűrűség
valószínűségi interpretáció
időfüggő Schrödinger egyenlet
állapotegyenlet
stacionárius állapot
várható érték
Ehrenfest tétel
spinoperátor
Pauli mátrixok
α spin, β spin
spinkoordináta
spinpálya, térbeli pálya
azonos részecskék
Pauli elv
operátor szórása
Heisenberg-féle határozatlansági reláció
alagút effektus
Heisenberg-féle mozgásegyenlet
mozgásállandó
a Hamilton operátor szimmetriacsoportja
irreducibilitási feltevés
variációs tétel
variációs elv
perturbáció

B) (*)
korreszpondencia elv
infinitézimális generátor
valószínűségi amplitúdó
tiszta állapot
kevert állapot
a hullámcsomag redukciója
a hullámcsomag szétfolyása