1.) Najprej zapišemo lastni funkciji za enodimenzionalni harmonski oscilator za osnovno in prvo vzbujeno stanje.

$$\left|0\right\rangle_x = \left(\frac{m\varpi}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-m\varpi x^2/2\hbar}$$

$$\left|1\right\rangle_x = \sqrt{2}\left(\frac{m\varpi}{\pi\hbar}\right)^{1/4}\left(\frac{m\varpi}{\hbar}\right)^{1/2} x e^{-m\varpi x^2/2\hbar}$$

Za dvodimenzionalni harmonski oscilator dobimo lastne funkcije tako, da zmnožimo lastne funkcije v posameznih smereh. Osnovno stanja so stanja z najmanjšo energijo, prva vzbujena stanja pa so tista stanja, ki imajo tisto energija, ki je prva na lestvici za osnovnim stanjem. Tako dobimo lastno funkcijo za osnovno stanje:

$$\left|00\right\rangle = \left|0\right\rangle_x \left|0\right\rangle_y = \left(\frac{m\varpi}{\pi\hbar}\right)^{1/2} e^{-m\varpi x^2/2\hbar} e^{-m\varpi y^2/2\hbar}$$

V tem stanju ima oscilator energijo E = ħ ω.

Prvi popravek energije oscilatorja zaradi dodatnega potenciala potem izračunamo kot:

$$E_0^1 = \left\langle 00\right| V \left|00\right\rangle$$

$$E_0^1 = \frac{1}{2}a\left(\frac{m\varpi}{\pi\hbar}\right)\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-m\varpi x^2/\hbar} e^{-m\varpi y^2/\hbar} xy(x^2+y^2)dxdy =$$

$$= \frac{1}{2}a\left(\frac{m\varpi}{\pi\hbar}\right)\int_{-\infty}^{\infty} dy e^{-m\varpi y^2/\hbar}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-m\varpi x^2/\hbar}(x^3y + xy^3)dx = 0$$

Ko integriramo po x predpostavimo, da je y konstanta. Eksponentni del je sod, saj v njem nastopa x^2, v ostalem delu pa nastopajo lihe potence x, torej je njun produkt liha funkcija, in če jo integriramo od - neskončno do neskončno dobimo 0. Torej je prvi popravek energije osnovnega stanja enak 0.

Poglejmo si pa sedaj prvo vzbujeno stanje. Predstavljata ga lastni valovni funkciji

$$|01\rangle = |0\rangle_x |1\rangle_y = \sqrt{2}\left(\frac{m\varpi}{\pi\hbar}\right)^{1/2}\left(\frac{m\varpi}{\hbar}\right)^{1/2} y e^{-m\varpi x^2/2\hbar} e^{-m\varpi y^2/2\hbar}$$

$$|10\rangle = |1\rangle_x |0\rangle_y = \sqrt{2}\left(\frac{m\varpi}{\pi\hbar}\right)^{1/2}\left(\frac{m\varpi}{\hbar}\right)^{1/2} x e^{-m\varpi x^2/2\hbar} e^{-m\varpi y^2/2\hbar}$$

V teh dveh stanjih ima oscilator energijo E = 2 ħ ω. Če pa bi vzeli stanje 11>, bi imel oscilator energijo E = 3 ħ ω, kar nam pokaže, da je to že višje vzbujeno stanje.

Radi bi izračunali matriko

$$\begin{vmatrix} V_{11} & V_{12} \\ V_{21} & V_{22} \end{vmatrix}$$

Matrični elementi so definirani kot

$$V_{11} = \langle 10|V|10\rangle \qquad V_{12} = \langle 10|V|01\rangle$$

$$V_{21} = \langle 01|V|10\rangle \qquad V_{22} = \langle 01|V|01\rangle$$

Lastne vrednosti te matrike nam predstavljajo popravke energij oscilatorja, lastni vektorji pa nam predstavljajo nove lastne funkcije (celotne funkcije in ne samo popravke). Pri računanju bom uporabil okrajšavo

$$K = \sqrt{2}\left(\frac{m\varpi}{\pi\hbar}\right)^{1/2}\left(\frac{m\varpi}{\hbar}\right)^{1/2}$$

Pa izračunajmo matrične elemente

$$V_{11} = K^2 \frac{1}{2} a \int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-m\varpi x^2/\hbar} e^{-m\varpi y^2/\hbar} x^2 xy(x^2+y^2)dxdy$$

$$= K^2 \frac{1}{2} a \int_{-\infty}^{\infty} dy\ e^{-m\varpi y^2/\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-m\varpi x^2/}\ (x^5 y + x^3 y^3)dx = 0$$

Da je ta integral enak nič ugotovimo s podobnim sklepanjem o lihosti funkcij, kot pri integralu za prvi popravek energije osnovnega stanja. Za člen V_{22} pa ravno tako ugotovimo, da namesto x^2 nastopa y^2, in dobimo zopet lihe funkcije in je integral zopet enak 0.

Lastne funkcije so realne, prav tako potencial, torej vrstni red množenja ni pomemben in sta člene V_{12} in V_{21} enaka.

$$V_{12} = K^2 \frac{1}{2} a \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-m\varpi x^2/\hbar} e^{-m\varpi y^2/\hbar} xyxy(x^2 + y^2) dxdy =$$

$$= K^2 \frac{1}{2} a \int_{-\infty}^{\infty} dy \; e^{-m\varpi y^2/\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-m\varpi x^2/\hbar} (x^4 y^2 + x^2 y^4) dx$$

Sedaj pa imamo znotraj integrala sodo funkcijo, torej ga lahko prevedemo na dvakrat integral od nič do neskončno in pa upoštevamo

$$\int_0^{\infty} x^n e^{-ax^2} dx = \frac{\Gamma(\frac{n+1}{2})}{2a^{(\frac{n+1}{2})}}$$

in tako dobimo

$$= K^2 \frac{1}{2} a \int_{-\infty}^{\infty} e^{-m\varpi y^2/\hbar} 2 \left(\frac{\Gamma(\frac{5}{2})}{2(\frac{m\varpi}{\hbar})^{5/2}} y^2 + \frac{\Gamma(\frac{3}{2})}{2(\frac{m\varpi}{\hbar})^{3/2}} y^4 \right) dy$$

in če podobno kot prej za x pointegriramo sedaj po y dobimo

$$= K^2 \frac{1}{2} a 2 \left(\frac{\Gamma(\frac{5}{2})}{(\frac{m\varpi}{\hbar})^{5/2}} \frac{\Gamma(\frac{3}{2})}{2(\frac{m\varpi}{\hbar})^{3/2}} + \frac{\Gamma(\frac{3}{2})}{(\frac{m\varpi}{\hbar})^{3/2}} \frac{\Gamma(\frac{5}{2})}{2(\frac{m\varpi}{\hbar})^{5/2}} \right) =$$

$$= 2 \left(\frac{m\varpi}{\pi\hbar} \right) \left(\frac{m\varpi}{\hbar} \right) \frac{1}{2} a \left(\frac{m\varpi}{\hbar} \right)^{-4} 2\Gamma(\tfrac{5}{2})\Gamma(\tfrac{3}{2})$$

Sedaj pa upoštevamo lastnosti gama funkcije

$$\Gamma(x+1) = x\Gamma(x) \qquad \Gamma(\frac{1}{2}) = \sqrt{\pi}$$

in dobimo

$$V_{12} = V_{21} = \frac{3}{4} \frac{\hbar^2}{m^2 \varpi^2} a = V$$

Če sedaj zapišemo matriko, dobimo

$$\begin{vmatrix} 0 & V \\ V & 0 \end{vmatrix}$$

Lastne vrednosti dobimo če izračunamo njeno determinanto

$$\begin{vmatrix} -E & V \\ V & -E \end{vmatrix}$$

Dobimo $E^2 - V^2 = 0$, iz česar sledi $E = \pm V$.

Če sedaj izračunamo še lastne vektorje

(E = -V)

$$\begin{vmatrix} V & V \\ V & V \end{vmatrix} \begin{vmatrix} C_1 \\ C_2 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 0 \\ 0 \end{vmatrix}$$

$C_1 = - C_2 = C$

Če pogledamo kaj nam to pomeni s stališča valovne funkcije

$$\psi\rangle = C_1|10\rangle + C_2|01\rangle = C|10\rangle - C|01\rangle$$

Da bi določili C moramo valovno funkcijo normalizirati

$$\langle\psi|\psi\rangle = 1 = C^2\langle 10|10\rangle - C^2\langle 01|10\rangle + C^2\langle 01|01\rangle - C^2\langle 10|01\rangle$$

Upoštevamo, lastne funkcije ortogonalne in normirane in dobimo

$2C^2 = 1$ iz česar sledi $C = \frac{1}{\sqrt{2}}$. Za lastno funkcijo dobimo potem rešitev

$$\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|10\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}|01\rangle$$

Za energijo E = V pa podobnem postopku dobimo

$$\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|10\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|01\rangle$$

2.) Za približek končnega protona moramo najprej izračunati nov potencial. Prej smo računali s potencialom za točkast naboj, sedaj pa bomo računali s potencialom za po prostornini enakomerno nabito kroglo. Če zapišemo zakon o pretoku, dobimo

$$4\pi r^2 \varepsilon_o E = \frac{e_0 r^3}{r'^3}$$

$$E = \frac{e_0 r}{4\pi\varepsilon_o r'^3}$$

$$U(r) = -\int E ds = -\frac{e_0 r^2}{8\pi\varepsilon_o r'^3} + konst$$

Konstanto dobimo z zahtevo, da je potencial na površini krogle pri r = r' zvezen.

$$r < r' \qquad U(r) = \frac{e_0}{8\pi\varepsilon_o r'^3}(3r'^2 - r^2)$$

$$r > r' \qquad U(r) = \frac{e_0}{4\pi\varepsilon_o r}$$

Potencialno energijo lahko izračunamo sedaj kot

$$V(r) = -e_0 U(r)$$

Radialni del lastne funkcije osnovnega stanja vodikovega atoma je

$$0\rangle = 2r_B^{-3/2} e^{-r/r_B}$$

in v tem stanju ima vodikov atom energijo

$$H = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(r)$$

Mi že poznamo rešitve za točkast potencial

$$H_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m} - \frac{e_0^2}{4\pi\varepsilon_o r}$$

Sedaj pa bi radi zapisali energijo za naš novi potencial, kot energijo za stari potencial plus nek popravek zaradi novega potenciala.

$$H = H_0 + H'(r) = \frac{\hat{p}^2}{2m} - \frac{e_0^2}{4\pi\varepsilon_o r} + V(r) + \frac{e_0^2}{4\pi\varepsilon_o r}$$

in iz tega dobimo za H'

$$r < r' \qquad H'(r) = \frac{e_0^2}{4\pi\varepsilon_o}\left(-\frac{3}{2r'} + \frac{r^2}{2r'^3} + \frac{1}{r}\right)$$

$$r > r' \qquad H'(r) = 0$$

Popravek energije zapišemo kot

$$\Delta E = \langle 0|H'|0\rangle = \int_0^\infty \frac{4}{r_B^3} e^{-2r/r_B} H'\,dr = \frac{4e_0^2}{4\pi\varepsilon_o r_B^3}\int_0^{r'} e^{-2r/r_B}\left(-\frac{3}{2r'} + \frac{r^2}{2r'^3} + \frac{1}{r}\right) r^2\,dr$$

r^2 se pojavi, ker so tako normalizirani radialni deli lastnih funkcij. Upoštevamo, da je r' << r_B. Iz tega sledi, da lahko eksponentni del zanemarimo in dobimo

$$\Delta E = \frac{e_0^2}{\pi \varepsilon_o r_B^3} \int_0^{r'} (-\frac{3r^2}{2r'} + \frac{r^4}{2r'^3} + r) dr = \frac{e_0^2}{\pi \varepsilon_o r_B^3} (-\frac{r'^3}{2r'} + \frac{r'^5}{10r'^3} + \frac{r'^2}{2})$$

Za prvi popravek energije tako dobimo

$$\Delta E = \frac{1}{10} \frac{e_0^2 r'^2}{\pi \varepsilon_o r_B^3}$$