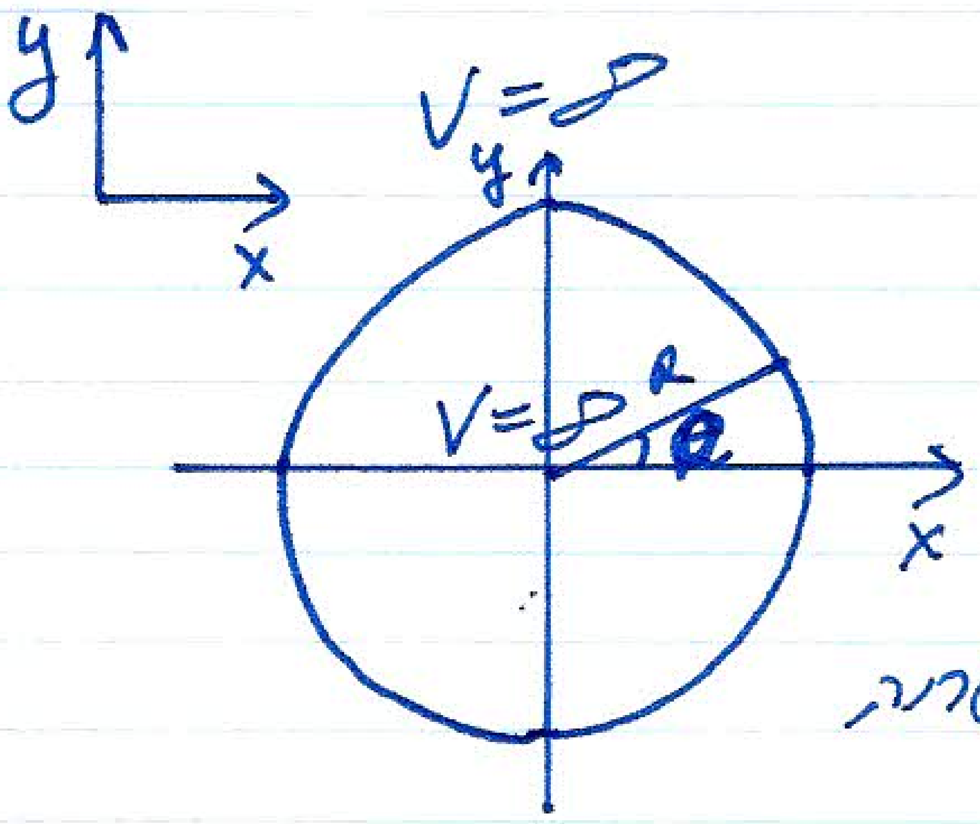


חלקיק בטבעת

המודל הזה יכול ללמד אותנו עקרונות חשובים עבור מערכות ארומטיות כמו בנזן כדוגמת הסימטריה של הפתרון והתנהגות רמות האנרגיה.

~~[illegible]~~

בנוסף, נלמד על מעבר מהצגה קרטזית של ההמילטוניאן להצגתו בקואורדינטות ~~[illegible]~~ פולריות.

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial y^2}$$

מצורת ~~[illegible]~~ ההמילטוניאן נוכל להשתמש בהפרדת משתנים ולרשום $\Psi(x,y) = \Psi_x(x)\Psi_y(y)$. אך אנו ניתקל בבעיה כשנרצה להשתמש בתנאי השפה שכן תנאי שפה אלו נדרשים כי רק כאשר $x^2+y^2=R^2$ פונקציות הגל שונות מ-0. כלומר תנאי השפה עצמן מערבבים את x ואת y והן בלתי פריקים. לכן עדיף לעבור למערכת פולרית:

בבעיה יש רק דרגת חופש אחת. תנאי השפה מקשרים בין x לבין y לכן מורידים את שני דרגות החופש במערכת.

$$\begin{cases} x = r\cos\theta \\ y = r\sin\theta \end{cases} \qquad \begin{cases} r = \sqrt{x^2+y^2} \\ \theta = \arctg\left(\frac{y}{x}\right) \end{cases}$$

ועכשיו פונקציית הגל תהיה תלויה ב-r וב-θ $\Psi(r,\theta)$ ותנאי השפה יהיו בפשטות - רק כאשר $r=R$ הפונקציה לא מתאפסת ועבור $0<r<R$ ו- $r>R$ הפונקציה מתאפסת. מכאן שהפונקציה לא תהיה תלויה ב-r כמשתנה אלא כפרמטר R והתלות היחידה שתיוותר תהיה ב-θ:

$$\Psi = \Psi(\theta)$$

בכדי לעבור מההמילטוניאן הקרטזי להמילטוניאן הפולארי אנו משתמשים בכלל השרשרת.

תזכורת של דיפרנציאל שלם: $df = \frac{\partial f}{\partial r}dr + \frac{\partial f}{\partial \theta}d\theta \Rightarrow \frac{\partial f}{\partial x} = \frac{\partial f}{\partial r}\frac{\partial r}{\partial x} + \frac{\partial f}{\partial \theta}\frac{\partial \theta}{\partial x}$

עבור הנגזרות הראשונות נקבל:

$$\begin{cases} \frac{\partial f}{\partial x} = \frac{\partial r}{\partial x}\frac{\partial f}{\partial r} + \frac{\partial \theta}{\partial x}\frac{\partial f}{\partial \theta} = \cos\theta\frac{\partial f}{\partial r} - \frac{\sin\theta}{r}\frac{\partial f}{\partial \theta} \\ \frac{\partial f}{\partial y} = \frac{\partial r}{\partial y}\frac{\partial f}{\partial r} + \frac{\partial \theta}{\partial y}\frac{\partial f}{\partial \theta} = \sin\theta\frac{\partial f}{\partial r} + \frac{\cos\theta}{r}\frac{\partial f}{\partial \theta} \end{cases}$$

$$\begin{cases} \dfrac{\partial f}{\partial x} = \cos\theta \dfrac{\partial f}{\partial r} - \dfrac{\sin\theta}{r} \dfrac{\partial f}{\partial \theta} \\[2ex] \dfrac{\partial f}{\partial y} = \sin\theta \dfrac{\partial f}{\partial r} + \dfrac{\cos\theta}{r} \dfrac{\partial f}{\partial \theta} \end{cases}$$

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} = \frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial f}{\partial x}\right) = \frac{\partial r}{\partial x}\frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{\partial f}{\partial x}\right) + \frac{\partial \theta}{\partial x}\frac{\partial}{\partial \theta}\left(\frac{\partial f}{\partial x}\right) = \cos\theta \frac{\partial}{\partial r}\left[\cos\theta \frac{\partial f}{\partial r} - \frac{\sin\theta}{r}\frac{\partial f}{\partial \theta}\right] -$$

$$- \frac{\sin\theta}{r}\frac{\partial}{\partial \theta}\left[\cos\theta\frac{\partial f}{\partial r} - \frac{\sin\theta}{r}\frac{\partial f}{\partial \theta}\right] =$$

$$= \cos\theta\left[\cos\theta\frac{\partial^2 f}{\partial r^2} - \sin\theta\left(-\frac{1}{r^2}\frac{\partial f}{\partial \theta} + \frac{1}{r}\frac{\partial^2 f}{\partial r \partial \theta}\right)\right] - \frac{\sin\theta}{r}\left[-\sin\theta\frac{\partial f}{\partial r} + \cos\theta\frac{\partial^2 f}{\partial \theta \partial r} - \right.$$

$$\left. - \frac{1}{r}\left(\cos\theta\frac{\partial f}{\partial \theta} + \sin\theta\frac{\partial^2 f}{\partial \theta^2}\right)\right] =$$

$$= \cos^2\theta\frac{\partial^2 f}{\partial r^2} + \frac{\sin\theta\cos\theta}{r^2}\frac{\partial f}{\partial \theta} - \frac{\sin\theta\cos\theta}{r}\frac{\partial^2 f}{\partial r\partial \theta} + \frac{\sin^2\theta}{r}\frac{\partial f}{\partial r} - \frac{\sin\theta\cos\theta}{r}\frac{\partial^2 f}{\partial \theta\partial r}$$

$$+ \frac{\cos\theta\sin\theta}{r^2}\frac{\partial f}{\partial \theta} + \frac{\sin^2\theta}{r^2}\frac{\partial^2 f}{\partial \theta^2} =$$

$$= \cos^2\theta\frac{\partial^2 f}{\partial r^2} + 2\frac{\sin\theta\cos\theta}{r^2}\frac{\partial f}{\partial \theta} - 2\frac{\sin\theta\cos\theta}{r}\frac{\partial^2 f}{\partial r\partial \theta} + \frac{\sin^2\theta}{r}\frac{\partial f}{\partial r} + \frac{\sin^2\theta}{r^2}\frac{\partial^2 f}{\partial \theta^2}$$

$$\frac{\partial^2 f}{\partial y^2} = \frac{\partial}{\partial y}\left(\frac{\partial f}{\partial y}\right) = \frac{\partial r}{\partial y}\frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{\partial f}{\partial y}\right) + \frac{\partial \theta}{\partial y}\frac{\partial}{\partial \theta}\left(\frac{\partial f}{\partial y}\right) = \sin\theta\frac{\partial}{\partial r}\left[\sin\theta\frac{\partial f}{\partial r} + \frac{\cos\theta}{r}\frac{\partial f}{\partial \theta}\right] +$$

$$+ \frac{\cos\theta}{r}\frac{\partial}{\partial \theta}\left[\sin\theta\frac{\partial f}{\partial r} + \frac{\cos\theta}{r}\frac{\partial f}{\partial \theta}\right] =$$

$$= \sin\theta\left[\sin\theta\frac{\partial^2 f}{\partial r^2} + \cos\theta\left(-\frac{1}{r^2}\frac{\partial f}{\partial \theta} + \frac{1}{r}\frac{\partial^2 f}{\partial r\partial \theta}\right)\right] + \frac{\cos\theta}{r}\left[\cos\theta\frac{\partial f}{\partial r} + \sin\theta\frac{\partial^2 f}{\partial \theta\partial r} + \right.$$

$$\left. + \frac{1}{r}\left(-\sin\theta\frac{\partial f}{\partial \theta} + \cos\theta\frac{\partial^2 f}{\partial \theta^2}\right)\right] =$$

$$= \sin^2\theta\frac{\partial^2 f}{\partial r^2} - \frac{\sin\theta\cos\theta}{r^2}\frac{\partial f}{\partial \theta} + \frac{\sin\theta\cos\theta}{r}\frac{\partial^2 f}{\partial r\partial \theta} + \frac{\cos^2\theta}{r}\frac{\partial f}{\partial r} + \frac{\sin\theta\cos\theta}{r}\frac{\partial^2 f}{\partial \theta\partial r} -$$

$$- \frac{\sin\theta\cos\theta}{r^2}\frac{\partial f}{\partial \theta} + \frac{\cos^2\theta}{r^2}\frac{\partial^2 f}{\partial \theta^2} =$$

$$= \sin^2\theta\frac{\partial^2 f}{\partial r^2} - 2\frac{\sin\theta\cos\theta}{r^2}\frac{\partial f}{\partial \theta} + 2\frac{\sin\theta\cos\theta}{r}\frac{\partial^2 f}{\partial r\partial \theta} + \frac{\cos^2\theta}{r}\frac{\partial f}{\partial r} + \frac{\cos^2\theta}{r^2}\frac{\partial^2 f}{\partial \theta^2}$$

וכשמחברים את שני המחוברים:

$$\boxed{\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} = \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}r\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial \theta^2}}$$

$$r=(x^2+y^2)^{1/2};$$

$$\begin{cases}\frac{\partial r}{\partial x}=\frac{1}{2}(x^2+y^2)^{-1/2}\cdot 2x=\frac{x}{r}=\frac{r\cos\theta}{r}=\cos\theta\\[2ex] \frac{\partial r}{\partial y}=\frac{1}{2}(x^2+y^2)^{-1/2}\cdot 2y=\frac{y}{r}=\frac{r\sin\theta}{r}=\sin\theta\end{cases}$$

$$\theta=\operatorname{arctg}(y/x)$$

$$\begin{cases}\frac{\partial\theta}{\partial x}=\frac{1}{1+(y/x)^2}\cdot\left(-\frac{y}{x^2}\right)=-\frac{y}{x^2+y^2}=-\frac{r\sin\theta}{r^2}=-\frac{\sin\theta}{r}\\[2ex] \frac{\partial\theta}{\partial y}=\frac{1}{1+(y/x)^2}\,\frac{1}{x}=\frac{x}{x^2+y^2}=\frac{r\cos\theta}{r^2}=\frac{\cos\theta}{r}\end{cases}$$

כעת בכדי לחשב את הלפלסיאן אנו נדרשים לחשב את הנגזרות השניות $\frac{\partial}{\partial x}\frac{\partial f}{\partial x}$ ו- $\frac{\partial}{\partial y}\frac{\partial f}{\partial y}$ הללו מורכבות. החשבון מתבצע באופן דומה (הפונקציות הללו נמצאות ב-Ira Levine) והתשובה הסופית שמתקבלת היא:

$$A17 \qquad \frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}=\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}r\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}$$

ולכן ההמילטוניאן הוא:

$$\hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}r\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}\right]$$

כעת כיוון שמתנאי הבעיה מתקיים כי $r=R=const$, אין תלות ב-r במשתנה ולכן הנגזרות לפי r נופלות ואנו נקבל את ההמילטוניאן בצורה:

$$\boxed{\hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{R^2}\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}}$$

$I=mR^2$ - מומנט ההתמד.
של החלקיק בטבעת.

$$\hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2I}\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}$$

ההמילטוניאן הנ"ל כמו ההמילטוניאן של חלקיק בקופסא רק שהמסה הוחלפה במומנט ההתמד כיוון שהבעיה היא של טבעת.

משוואת שרדינגר תהיה כעת:

$$-\frac{\hbar^2}{2I}\frac{\partial^2\Psi(\theta)}{\partial\theta^2}=E\Psi(\theta)$$

שוב קיבלנו משוואה של פונקציה שנגזרתה השניה מניבה את אותה הפונקציה עם מקדם. במקרה של חלקיק בקופסא הצענו פתרון ע"י סכום של cos ו-sin. כאן נשתמש בהצגה המרוכבת (תרגיל בית):

$$\begin{cases} \Psi(\theta)=Ae^{i\alpha\theta}=A\cos(\alpha\theta)+iA\sin(\alpha\theta) \\ \frac{d\Psi(\theta)}{\partial\theta}=i\alpha Ae^{i\alpha\theta}=i\alpha\Psi(\theta) \\ \frac{d^2\Psi(\theta)}{\partial\theta^2}=-\alpha^2 Ae^{i\alpha\theta}=-\alpha^2\Psi(\theta) \end{cases}$$

נציב במשוואת שרדינגר ונקבל:

$$-\frac{\hbar^2}{2I}(-\alpha^2)\Psi(\theta)=E\Psi(\theta) \Rightarrow \boxed{E=\frac{\hbar^2\alpha^2}{2I}}$$

קוונטיזציה של האנרגיה נובעת דרך <u>תנאי השפה</u>.

את תנאי השפה עבור r כבר לקחנו בחשבון בכך שפונקציית הגל תלויה רק ב-θ כמשתנה וב-R כפרמטר. מהו תנאי השפה עבור θ?

הפונקציה צריכה להיות <u>חד-ערכית</u> כך ש: $\Psi(\theta)=\Psi(\theta+2\pi)$

כלומר:

$$Ae^{i\alpha\theta}\overset{!}{=}Ae^{i\alpha(\theta+2\pi)}=Ae^{i\alpha\theta}e^{2\pi i\alpha}$$

$$\Rightarrow 1=\underset{\cos(2\pi\alpha)+i\sin(2\pi\alpha)}{\underset{\shortparallel}{e^{i\alpha 2\pi}}} \Rightarrow \underline{\underline{\alpha=0,\pm1,\pm2,\pm3,\ldots=m}}$$

ההבדל בין הבעיה הזו לבין חלקיק בקופסא הינו בתנאי השפה בלבד! תנאי השפה שונים מובילים לביטוי שונה לביטוי רמות האנרגיה.

ונקבל קוונטיזציה של האנרגיה.

$$\boxed{E_m=\frac{\hbar^2m^2}{2I}\ ;\ m=0,\pm1,\pm2,\ldots}$$

פונקציות הגל כעת הינם:

$$\Psi(\theta)=Ae^{im\theta}$$

A נקבע מתנאי הנרמול:

$$1\overset{!}{=}\int_0^{2\pi}d\theta\,\Psi^*(\theta)\Psi(\theta)=\int_0^{2\pi}d\theta\,A^*e^{-im\theta}Ae^{im\theta}=|A|^2\int_0^{2\pi}d\theta=2\pi A^2$$

כאשר הנחנו ש-A ממשי ולכן:

$$A=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$$

ולכן:

$$\boxed{\Psi_m(\theta) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\theta} \quad ; \quad m=0, \pm1, \pm2, \dots}$$

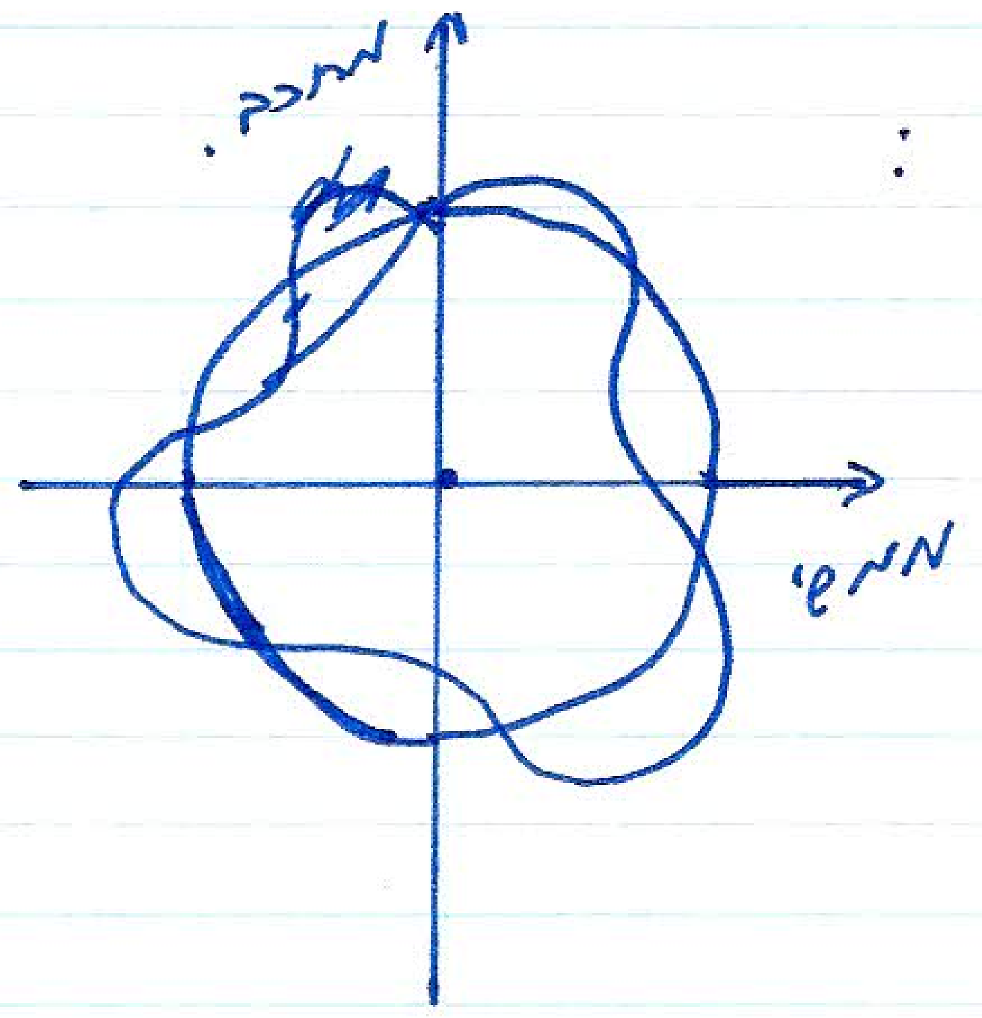
אנרגיית האפס היא: $E_{m=0} = \frac{\hbar^2}{2I}\cdot 0^2 = 0$

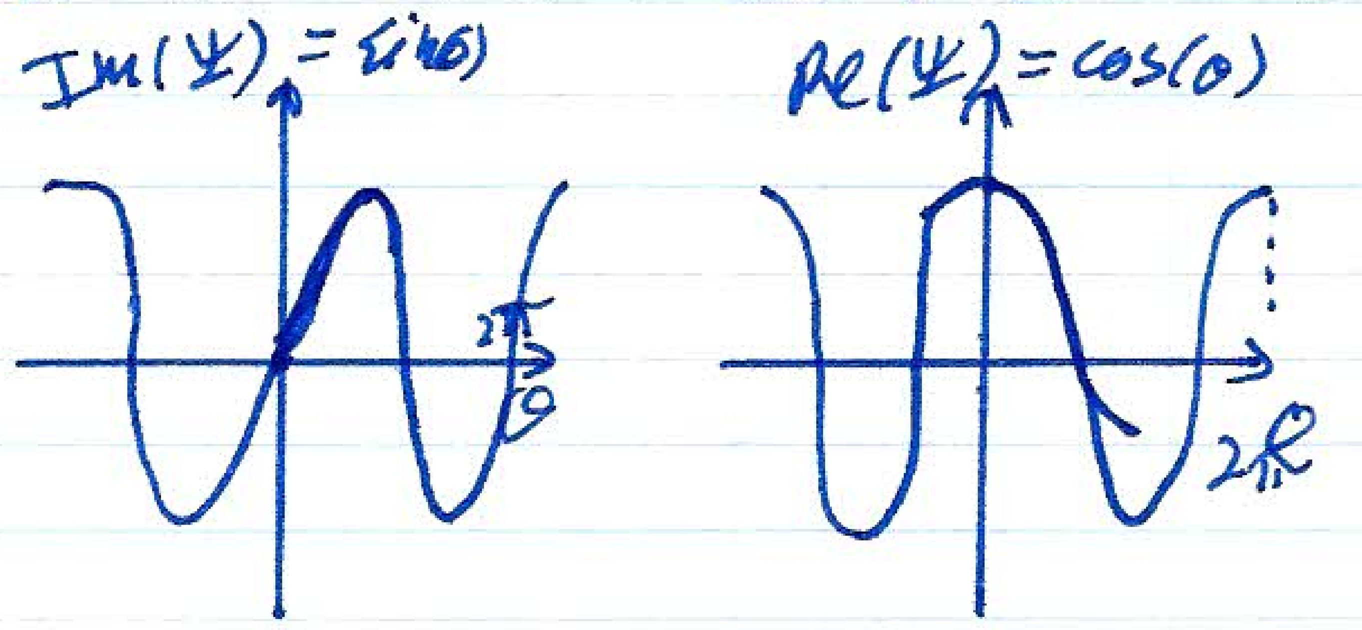
ההסתברות למצוא את החלקיק ~~במרחב~~ במרחב זווית $d\theta$ סביב הזווית θ היא:

$$\Psi_m^*(\theta)\Psi_m(\theta)d\theta = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-im\theta}\cdot\frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\theta} d\theta = \underline{\underline{\frac{d\theta}{2\pi}}}$$

ההסתברות היא קבועה בכל הזוויות ואינה תלויה בזווית לכל ערך של m.
ההסתברות למציאת החלקיק בתוך חלון של הטבעת תהיה $1/2\pi$ שכן צפיפות ההסתברות אחידה.

פונקציית הגל תראה דומה למודל של Bohr:





נציג את רמות האנרגיה:

		אנרגיה	ניוון
⋮	⋮	⋮	⋮
m=-2	m=2	$E_{2,-2} = \frac{2\hbar^2}{I}$	2
m=-1	m=1	$E_{1,-1} = \frac{\hbar^2}{2I}$	2
m=0		$E_0 = 0$	1

$\frac{3\hbar^2}{I}$, $\frac{\hbar^2}{2I}$

מבנה הרמות של מולקולות

בניגוד למודל אחרת הסימטריה.

הניוון כאן אינו **מקרי** והוא לא קשור עם המספר הקוונטי (בניגוד לבעיה הדו-ממדית ~~[illegible]~~ בה הניוון קשור עם המספר הקוונטי). כל הרמות מנוונות פעמיים פרט לרמה E_0 שהיא אינה מנוונת.

הניוון נובע מהסימטריה של הבעיה ולכן הוא אינו מקרי!

מספרים קוונטיים עם m חיובי מתארים חלקיק שמסתובב כנגד כיוון השעון (או ההסכמה) בעוד ש-m שלילי מייצג חלקיקים שמסתובבים עם כיוון השעון.