תרגול 12 – פתרון מבחן 2007 מועד ב':

שאלה 1-

$$\psi(r,\theta,\varphi)= f(r)\sqrt{\frac{3}{8\pi}}(\cos\theta+\sin\theta\cos\varphi)$$

א. כדי לבדוק האם פונקציה היא מצב עצמי של התנע הזויתי L2 נראה כיצד נראות הפונקציות העצמיות של אופרטור זה:

$$Y_1^0(\theta,\varphi)=\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta$$
$$Y_1^{\pm1}(\theta,\varphi)=\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta e^{\pm i\varphi}$$

ראינו כבר בכיתה כי ניתן לקבל פונקציות ממשיות בלבד מק"ל של Y:

$$Y_1^1(\theta,\varphi)+Y_1^{-1}(\theta,\varphi)=\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta\cos\varphi$$

נשתמש בכל אלו ונראה כי את פונקצית הגל שלנו ניתנת לכתיבה בצורה הבאה:

$$\psi(r,\theta,\varphi)= f(r)\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta+\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta\cos\varphi\right)$$
$$\psi(r,\theta,\varphi)= f(r)\left(\frac{1}{\sqrt{2}}Y_1^0+\frac{1}{2}Y_1^1+\frac{1}{2}Y_1^{-1}\right)$$
$$\hat{L}^2Y_l^m=\hbar^2 l(l+1)Y_l^m$$
$$\Rightarrow \hat{L}^2\psi(r,\theta,\varphi)= f(r)\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\hat{L}^2Y_1^0+\frac{1}{2}\hat{L}^2Y_1^1+\frac{1}{2}\hat{L}^2Y_1^{-1}\right)$$
$$\hat{L}^2\psi(r,\theta,\varphi)= f(r)\left(\frac{1}{\sqrt{2}}2\hbar^2Y_1^0+\frac{1}{2}2\hbar^2Y_1^1+\frac{1}{2}2\hbar^2Y_1^{-1}\right)$$
$$\hat{L}^2\psi(r,\theta,\varphi)=2\hbar^2 f(r)\left(\frac{1}{\sqrt{2}}Y_1^0+\frac{1}{2}Y_1^1+\frac{1}{2}Y_1^{-1}\right)$$
$$\hat{L}^2\psi(r,\theta,\varphi)=2\hbar^2\psi(r,\theta,\varphi)$$

ומכאן ש-ψ פונקציה עצמית של L2 עם ע"ע $2\hbar^2$

ב. נבצע את אותו התהליך עבור Lz:

$$\hat{L}_z Y_l^m = \hbar m Y_l^m$$

$$\Rightarrow \hat{L}_z \psi(r,\theta,\varphi) = f(r)\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\hat{L}_z Y_1^0 + \frac{1}{2}\hat{L}_z Y_1^1 + \frac{1}{2}\hat{L}_z Y_1^{-1}\right)$$

$$\hat{L}_z \psi(r,\theta,\varphi) = f(r)\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\hbar 0 Y_1^0 + \frac{1}{2}\hbar Y_1^1 - \frac{1}{2}\hbar Y_1^{-1}\right)$$

$$\hat{L}_z \psi(r,\theta,\varphi) = \frac{1}{2}\hbar f(r)\left(Y_1^1 - Y_1^{-1}\right)$$

לא קיבלנו חזרה את ψ ומכאן ש- ψ אינה פונקציה עצמית של Lz . הפונקציות העצמיות של Lz

הן Y_l^m . והרי שכבר כתבנו את פונקצית הגל שלנו המונחים אלו:

$$\psi(r,\theta,\varphi) = f(r)\left(\frac{1}{\sqrt{2}}Y_1^0 + \frac{1}{2}Y_1^1 + \frac{1}{2}Y_1^{-1}\right)$$

ג.

$$\left\langle \psi \mid \hat{L}^2 \mid \psi \right\rangle = \left\langle \psi \mid 2\hbar^2 \psi \right\rangle = 2\hbar^2 \left\langle \psi \mid \psi \right\rangle = 2\hbar^2$$

ד.

$$\left\langle \psi \mid \hat{L}_z \mid \psi \right\rangle = \left\langle f(r) \mid f(r) \right\rangle \left\langle \frac{1}{\sqrt{2}}Y_1^0 + \frac{1}{2}Y_1^1 + \frac{1}{2}Y_1^{-1} \mid \frac{1}{2}\hbar Y_1^1 - \frac{1}{2}\hbar Y_1^{-1} \right\rangle =$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}}\frac{1}{2}\hbar\left\langle Y_1^0 \mid Y_1^1 \right\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}\frac{1}{2}\hbar\left\langle Y_1^0 \mid Y_1^{-1} \right\rangle + \frac{1}{4}\hbar^2\left\langle Y_1^1 \mid Y_1^1 \right\rangle -$$

$$- \frac{1}{4}\hbar^2\left\langle Y_1^1 \mid Y_1^{-1} \right\rangle + \frac{1}{4}\hbar^2\left\langle Y_1^{-1} \mid Y_1^1 \right\rangle - \frac{1}{4}\hbar^2\left\langle Y_1^{-1} \mid Y_1^{-1} \right\rangle$$

$$= \frac{1}{4}\hbar^2 - \frac{1}{4}\hbar^2 = 0$$

$$\Leftrightarrow \left\langle \psi \mid \hat{L}_z \mid \psi \right\rangle = \sum \left|c_l^m\right|^2 \hbar m = \frac{1}{2}0 + \frac{1}{4}\hbar^2 - \frac{1}{4}\hbar^2 = 0$$

ה. I. ההסתברות לקבל במדידה $\hat{L}^2 = 0$ שווה ל-0 שכן המצב שלנו כבר עצמי לאופרטור התנע

הזויתי וערך התצפית הוא $2\hbar^2$.

II. ההסתברות לקבל במדידה $\hat{L}_z = 0$ שווה ערך לקבל את המצב Y_l^0 וההסתברות לכך היא

המקדם של Y_1^0 בריבוע: $P\left(\hat{L}_z = 0\right) = \left\langle Y_l^0 \mid \psi \right\rangle = \left|c_l^0\right|^2 = \frac{1}{2}$

III. ההסתברות לקבל במדידה $\hat{L}_z = -\hbar$ שווה ערך לקבל את המצב Y_l^{-1} וההסתברות לכך היא המקדם של Y_1^0 בריבוע: $P(\hat{L}_z = -\hbar) = \langle Y_l^{-1} | \psi \rangle = |c_l^{-1}|^2 = \frac{1}{4}$

שאלה 2-

$$\psi(x) = \left(\frac{30}{a^5}\right) \; x(a-x) \qquad 0 \le x \le a$$

א. ראינו כבר בכיתה שאנרגיות של חלקיק בקופסא אינן תלויות בבחירת הקואורדינאטות ולכן האנרגיות הן כפי שאנו מכירים:

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2ma^2}$$

ב. נחשב את ערך התצפית:

$$\langle H \rangle = \langle \psi | H | \psi \rangle = \frac{30}{a^5} \int_0^a x(a-x)\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right) x(a-x)dx$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{30}{a^5}\int_0^a x(a-x)\left(\frac{\partial}{\partial x}\right)(a-2x)dx$$

$$= \frac{\hbar^2}{m}\frac{30}{a^5}\int_0^a \left(ax - x^2\right)dx = \frac{\hbar^2}{m}\frac{30}{a^5}\left[a\frac{x^2}{2} - \frac{x^3}{3}\right]_0^a$$

$$= \frac{\hbar^2}{m}\frac{30}{a^5}\left(\frac{a^3}{2} - \frac{a^3}{3}\right) = \frac{\hbar^2}{m}\frac{30}{a^5}\frac{a^3}{6}$$

$$\langle H \rangle = \frac{\hbar^2}{m}\frac{5}{a^2}$$

$$\frac{\langle H \rangle}{E_0} = \frac{\frac{\hbar^2}{m}\frac{5}{a^2}}{\frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}} = \frac{10}{\pi^2} \sim 1.013$$

ג. כדי לראות את התפלגות המדידות עלינו לראות מאיזו ק"ל של הפונקציות העצמיות של חלקיק בקופסא מורכבת הפונקציה שלנו:

$$c_n = \left\langle \psi_n(x) | \psi(x) \right\rangle$$

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right)$$

$$\Rightarrow c_n = \sqrt{\frac{2}{a}} \sqrt{\frac{30}{a^5}} \int_0^a \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) x(a-x)\,dx$$

$$c_n = \sqrt{\frac{60}{a^6}} \left[a\int_0^a x\sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right)dx - \int_0^a x^2 \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right)dx \right]$$

$$c_n = \frac{2\sqrt{15}}{a^3} \left[a\frac{\sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right)}{\left(\frac{n\pi}{a}\right)^2} - a\frac{x\cos\left(\frac{n\pi x}{a}\right)}{\left(\frac{n\pi}{a}\right)} - \frac{2x\sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right)}{\left(\frac{n\pi}{a}\right)^2} + \frac{\left(\left(\frac{n\pi}{a}\right)^2 x^2 - 2\right)\cos\left(\frac{n\pi x}{a}\right)}{\left(\frac{n\pi}{a}\right)^3} \right]_0^a$$

$$c_n = \frac{2\sqrt{15}}{a^3} \left[-a\left(\frac{a}{n\pi}\right) a\cos(n\pi) + \left(\frac{a}{n\pi}\right)^3 \left(\left(\frac{n\pi}{a}\right)^2 a^2 - 2\right)\cos(n\pi) + 2\left(\frac{a}{n\pi}\right)^3 \right]$$

$$c_n = \frac{2\sqrt{15}}{a^3} \left[-\frac{a^3}{n\pi}(-1)^n + \frac{a^3}{(n\pi)^3}\left[(n\pi)^2 - 2\right](-1)^n + 2\frac{a^3}{(n\pi)^3} \right]$$

$$c_n = 2\sqrt{15} \left[-\frac{(-1)^n}{n\pi} + \frac{(-1)^n}{(n\pi)^3} - \frac{2(-1)^n}{(n\pi)^3} + \frac{2}{(n\pi)^3} \right]$$

$$c_n = 2\sqrt{15}\,\frac{2}{(n\pi)^3}\left[1 - (-1)^n\right]$$

$$c_n = \frac{8\sqrt{15}}{(n\pi)^3} \qquad n \in odd$$

ההסתברות למדוד כל אחד מערכי האנרגיה היא $|c_n|^2$ ולכן:

$$|c_n|^2 = \frac{64\cdot 15}{(n\pi)^6} = \frac{960}{(n\pi)^6} \qquad n \in odd$$

ד.

$$\left|c_1\right|^2 = \frac{960}{(\pi)^6} \sim 0.998$$

כלומר בסיכוי כמעט 1 נמדוד את אנרגיית מצב היסוד, ולכן קיבלנו שערך התצפית כמעט זהה ביחס לרמת היסוד.

שאלה 3-

א.

$$\begin{vmatrix} \alpha-\varepsilon & \beta & 0 & \beta & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \beta & \alpha-\varepsilon & \beta & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \beta & \alpha-\varepsilon & \beta & \beta & 0 & 0 & 0 \\ \beta & 0 & \beta & \alpha-\varepsilon & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \beta & 0 & \alpha-\varepsilon & \beta & 0 & \beta \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \beta & \alpha-\varepsilon & \beta & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \beta & \alpha-\varepsilon & \beta \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \beta & \beta & \alpha-\varepsilon \end{vmatrix} = 0$$

ב.

$$\begin{vmatrix} \alpha-\varepsilon & \beta & 0 & \beta \\ \beta & \alpha-\varepsilon & \beta & 0 \\ 0 & \beta & \alpha-\varepsilon & \beta \\ \beta & 0 & \beta & \alpha-\varepsilon \end{vmatrix} = 0$$

$$\alpha-\varepsilon\begin{vmatrix} \alpha-\varepsilon & \beta & 0 \\ \beta & \alpha-\varepsilon & \beta \\ 0 & \beta & \alpha-\varepsilon \end{vmatrix} - \beta\begin{vmatrix} \beta & \beta & 0 \\ 0 & \alpha-\varepsilon & \beta \\ \beta & \beta & \alpha-\varepsilon \end{vmatrix} - \beta\begin{vmatrix} \beta & \alpha-\varepsilon & \beta \\ 0 & \beta & \alpha-\varepsilon \\ \beta & 0 & \beta \end{vmatrix} = 0$$

$$(\alpha-\varepsilon)\left[(\alpha-\varepsilon)^3 - \beta^2(\alpha-\varepsilon) - \beta^2(\alpha-\varepsilon)\right] - \beta\left[(\alpha-\varepsilon)^2\beta + \beta^3 - \beta^3\right] - \beta\left[\beta^3 + \beta(\alpha-\varepsilon)^2 - \beta^3\right] = 0$$

$$(\alpha-\varepsilon)^4 - 2\beta^2(\alpha-\varepsilon)^2 - \beta^2(\alpha-\varepsilon)^2 - \beta^2(\alpha-\varepsilon)^2 = 0$$

$$(\alpha-\varepsilon)^2\left[(\alpha-\varepsilon)^2 - 4\beta^2\right] = 0$$

$$\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = \alpha$$

$$(\alpha-\varepsilon)^2 - 4\beta^2 = (\alpha-\varepsilon-2\beta)(\alpha-\varepsilon+2\beta) = 0$$

$$\varepsilon_3 = \alpha - 2\beta \qquad \varepsilon_4 = \alpha + 2\beta$$

לקבלת האורביטל ים נציב את הע"ע שקיבלנו במשוואה הסקולרית:

$$(\alpha-\varepsilon)c_1+\beta c_2+\beta c_4=0$$
$$\beta c_1+(\alpha-\varepsilon)c_2+\beta c_3=0$$
$$\beta c_2+(\alpha-\varepsilon)c_3+\beta c_4=0$$
$$\beta c_1+\beta c_3+(\alpha-\varepsilon)c_4=0$$

<u>עבור $\varepsilon=\alpha+2\beta$:</u>

$$\begin{cases}-2\beta c_1+\beta c_2+\beta c_4=0\Rightarrow 2c_1=c_2+c_4\\ \beta c_1-2\beta c_2+\beta c_3=0\Rightarrow 2c_2=c_1+c_3\\ \beta c_2-2\beta c_3+\beta c_4=0\Rightarrow 2c_3=c_2+c_4\\ \beta c_1+\beta c_3-2\beta c_4=0\Rightarrow 2c_2=c_1+c_3\end{cases}$$
$$\Rightarrow c_1=c_3 \quad c_2=c_4$$
$$\Rightarrow c_1=c_3=c_2=c_4=c$$
$$\Rightarrow \Phi=c(\psi_1+\psi_2+\psi_3+\psi_4)$$
$$\langle\Phi\mid\Phi\rangle=1=c^2(1+1+1+1)\Rightarrow c=\frac{1}{2}$$
$$\Phi=\frac{1}{2}(\psi_1+\psi_2+\psi_3+\psi_4)$$

<u>עבור $\varepsilon=\alpha$:</u>

$$\begin{cases}\beta c_2+\beta c_4=0\Rightarrow c_2=-c_4\\ \beta c_1+\beta c_3=0\Rightarrow c_1=-c_3\\ \beta c_2+\beta c_4=0\\ \beta c_1+\beta c_3=0\end{cases}$$

מכיוון שדרושות 2 פונקציות גל שכן זהו ע"ע כפול נבחר עבור אחת ש- $c_1=c_3=0$ ועבור השניה $c_2=c_4=0$ ולכן:

$$\Phi_2=c(\psi_1-\psi_3)$$
$$\Phi_3=c(\psi_2-\psi_4)$$
$$\langle\Phi\mid\Phi\rangle=1=c^2(1+1)\Rightarrow c=\frac{1}{\sqrt{2}}$$
$$\Phi_2=\frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_1-\psi_3)$$
$$\Phi_3=\frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_2-\psi_4)$$

עבור $\varepsilon = \alpha - 2\beta$:

$$\begin{cases} 2\beta c_1 + \beta c_2 + \beta c_4 = 0 \Rightarrow 2c_1 = -(c_2 + c_4) \\ \beta c_1 + 2\beta c_2 + \beta c_3 = 0 \Rightarrow 2c_2 = -(c_1 + c_3) \\ \beta c_2 + 2\beta c_3 + \beta c_4 = 0 \Rightarrow 2c_3 = -(c_2 + c_4) \\ \beta c_1 + \beta c_3 + 2\beta c_4 = 0 \Rightarrow 2c_2 = -(c_1 + c_3) \end{cases}$$

$$\Rightarrow c_1 = c_3 \quad c_2 = c_4 = -c_1$$

$$\Rightarrow \Phi = c(\psi_1 - \psi_2 + \psi_3 - \psi_4)$$

$$\langle \Phi | \Phi \rangle = 1 = c^2(1+1+1+1) \Rightarrow c = \frac{1}{2}$$

$$\Phi = \frac{1}{2}(\psi_1 - \psi_2 + \psi_3 - \psi_4)$$

והתאור הגרפי הוא:

ג. עבור קומבינציה עם אורביטלי Φ_1:

$$c_1\Phi_{1R} + c_2\Phi_{1L}$$

$$\begin{vmatrix} \alpha + 2\beta - \varepsilon & \beta' \\ \beta' & \alpha + 2\beta - \varepsilon \end{vmatrix} = 0$$

$$(\alpha + 2\beta - \varepsilon)^2 - (\beta')^2 = 0$$

$$(\alpha + 2\beta - \varepsilon + \beta')(\alpha + 2\beta - \varepsilon - \beta') = 0$$

$$\varepsilon_1 = \alpha + 2\beta + \beta' \qquad \varepsilon_2 = \alpha + 2\beta - \beta'$$

<u>עבור קומבינציה עם אורביטלי Φ_2,Φ_3:</u>

$$c_1\Phi_{2R}+c_2\Phi_{3R}+c_3\Phi_{2L}+c_4\Phi_{3L}$$

$$\begin{vmatrix} \alpha-\varepsilon & 0 & \beta' & 0 \\ 0 & \alpha-\varepsilon & 0 & \beta' \\ \beta' & 0 & \alpha-\varepsilon & 0 \\ 0 & \beta' & 0 & \alpha-\varepsilon \end{vmatrix}=0$$

$$(\alpha-\varepsilon)\begin{vmatrix} \alpha-\varepsilon & 0 & \beta' \\ 0 & \alpha-\varepsilon & 0 \\ \beta' & 0 & \alpha-\varepsilon \end{vmatrix}+\beta'\begin{vmatrix} 0 & \alpha-\varepsilon & \beta' \\ \beta' & 0 & 0 \\ 0 & \beta' & \alpha-\varepsilon \end{vmatrix}=0$$

$$(\alpha-\varepsilon)\left[(\alpha-\varepsilon)^3-(\beta')^2(\alpha-\varepsilon)\right]+\beta'\left[(\beta')^3-\beta'(\alpha-\varepsilon)^2\right]=0$$

$$(\alpha-\varepsilon)^4-(\beta')^2(\alpha-\varepsilon)^2+(\beta')^4-(\beta')^2(\alpha-\varepsilon)^2=0$$

$$(\alpha-\varepsilon)^4-2(\beta')^2(\alpha-\varepsilon)^2+(\beta')^4=0$$

$$\left[(\alpha-\varepsilon)^2-(\beta')^2\right]=0$$

$$(\alpha-\beta'-\varepsilon)^2(\alpha+\beta'-\varepsilon)^2=0$$

$$\varepsilon_3=\varepsilon_4=\alpha+\beta' \qquad \varepsilon_5=\varepsilon_6=\alpha-\beta'$$

<u>עבור קומבינציה עם אורביטלי Φ_4:</u>

$$c_1\Phi_{4R}+c_2\Phi_{4L}$$

$$\begin{vmatrix} \alpha-2\beta-\varepsilon & \beta' \\ \beta' & \alpha-2\beta-\varepsilon \end{vmatrix}=0$$

$$(\alpha-2\beta-\varepsilon)^2-(\beta')^2=0$$

$$(\alpha-2\beta-\varepsilon+\beta')(\alpha+2\beta-\varepsilon-\beta')=0$$

$$\varepsilon_1=\alpha-2\beta+\beta' \qquad \varepsilon_2=\alpha-2\beta-\beta'$$

שאלה 4-

$$F(x)=\begin{cases} x & 0\le x\le L/2 \\ L-x & L/2\le x\le L \end{cases}$$

כדי לקבל את אנרגיית היסוד נשתמש בעקרון הוריאציה:

$$\varepsilon=\frac{\langle F(x)|H|F(x)\rangle}{\langle F(x)|F(x)\rangle}$$

$$\langle F(x)|F(x)\rangle=\int_0^{L/2}x^2dx+\int_{L/2}^{L}(L-x)^2\,dx$$

$$=\left.\frac{x^3}{3}\right|_0^{L/2}+\left.\frac{(L-x)^3}{-3}\right|_{L/2}^{L}$$

$$=\frac{L^3}{24}+\frac{L^3}{24}=\frac{L^3}{12}$$

$$\langle F(x)|H|F(x)\rangle=-\frac{\hbar^2}{2m}\langle F|F''\rangle=\frac{\hbar^2}{2m}\left[\int_0^{L/2}(f')^2\,dx+\int_{L/2}^{L}(f')^2\,dx\right]$$

$$=\frac{\hbar^2}{2m}\left[\int_0^{L/2}dx+\int_{L/2}^{L}dx\right]=\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{L}{2}+L-\frac{L}{2}\right]=\frac{L\hbar^2}{2m}$$

$$\Rightarrow\varepsilon=\frac{L\hbar^2}{2m}\frac{12}{L^3}=12\frac{\hbar^2}{2mL^2}$$

$$E_0=\frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}$$

$$\frac{\varepsilon-E_0}{E_0}=\frac{12\frac{\hbar^2}{2mL^2}-\frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}}{\frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}}=\frac{12-\pi^2}{\pi^2}\to 21.6\%$$

עבור הפונקציה $\psi=\sqrt{\frac{3}{L^3}}x$:

$$\langle\psi|\psi\rangle=\frac{3}{L^3}\int_0^L x^2dx=\frac{3}{L^3}\left.\frac{x^3}{3}\right|_0^L=\frac{3}{L^3}\frac{L^3}{3}=1$$

$$\langle\psi|H|\psi\rangle=\langle\psi|\psi''\rangle=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{3}{L^3}\int_0^L x\cdot 0dx=0$$

פונקציה זו לא עומדת בתנאי השפה של הבעיה ולכן אינה יכולה לשמש כפונקציית וריאציה (ב-L הפונקציה אינה מתאפסת!).