2.11.10

כימיה קוונטית – תרגיל מס' 1

1. נתונות שתי מטריצות $\hat{A}$ ו- $\hat{B}$ בגודל $N\times N$. הראו כי מתקיים:

   א. $\left(\hat{A}\hat{B}\right)^{\dagger}=\hat{B}^{\dagger}\hat{A}^{\dagger}$

   ב. $tr\left(\hat{A}\hat{B}\right)=tr\left(\hat{B}\hat{A}\right)$

   ג. $\left(\hat{A}\hat{B}\right)^{-1}=\hat{B}^{-1}\hat{A}^{-1}$

   ד. אם $\hat{U}$ מטריצה אוניטרית ומתקיים $\hat{B}=\hat{U}^{\dagger}\hat{A}\hat{U}$ אזי מתקיים גם $\hat{A}=\hat{U}\hat{B}\hat{U}^{\dagger}$.

   ה. אם המכפלה של שתי מטריצות הרמיטיות $\hat{C}=\hat{A}\hat{B}$ הינה הרמיטית אזי $\hat{A}$ ו- $\hat{B}$ חלופיים.

   ו. אם $\hat{A}$ הרמיטי ו- $\hat{A}^{-1}$ קיים אזי $\hat{A}^{-1}$ הרמיטי גם כן.

2. הראו כי העיקבה של מטריצה היא אינווריאנטית תחת טרנספורמציה אוניטרית.

3. השתמשו בהגדרה שניתנה בכיתה עבור פונקצית ה- δ של דיראק:

$$\delta\left(x\right)=\lim_{\varepsilon\to 0}\delta_{\varepsilon}\left(x\right);\quad \delta_{\varepsilon}\left(x\right)=\begin{cases}\dfrac{1}{2\varepsilon} & -\varepsilon\le x\le\varepsilon\\ 0 & other\end{cases}$$

בכדי להוכיח כי מתקיים $a\left(0\right)=\int\limits_{-\infty}^{\infty}dxa\left(x\right)\delta\left(x\right)$

4. נתון ההמילטוניאן הבא (ביחידות אטומיות): $\hat{H}=-\frac{1}{2}\frac{d^2}{dx^2}-\delta\left(x\right)$ השתמשו בפונקצית וריאציה מהצורה $\left|\tilde{\phi}\right\rangle=Ne^{-\alpha x^2}$ בכדי להראות כי $-\frac{1}{\sqrt{2\cdot\pi}}$ הינו חסם עליון לאנרגית מצב היסוד (הערך המדוייק הוא 0.5-).

השתמשו באינטגרל
$$\int\limits_{-\infty}^{\infty}dxx^{2m}e^{-\alpha x^2}=\frac{\left(2m\right)!\sqrt{\pi}}{m!2^{2m}\alpha^{m+1/2}}$$

5. משוואת שרדינגר עבור אטום המימן בשדה חשמלי אחיד $\vec{F}=\left(0,0,F_Z\right)$ ביחידות אטומיות ניתנת ע"י:

$$\left[-\frac{1}{2}\nabla^2-\frac{1}{r}+Fr\cos\left(\theta\right)\right]\left|\phi\right\rangle=\left[\hat{H}_0+Fr\cos\left(\theta\right)\right]\left|\phi\right\rangle=\varepsilon\left(F\right)\left|\phi\right\rangle$$

2.11.10

השתמשו בפונקצית וריאציה מהצורה: $\left|\tilde{\phi}\right\rangle = c_1\left|1s\right\rangle + c_2\left|2p_z\right\rangle$ בכדי למצוא חסם עליון ל- $\varepsilon(F)$.

$\left|1s\right\rangle$ ו- $\left|2p_z\right\rangle$ הינן פונקציות עצמיות מנורמלות של $\hat{H}_0$:

$$\left|1s\right\rangle = \pi^{-1/2}e^{-r}; \quad \left|2p_z\right\rangle = (32\pi)^{-1/2} re^{-r/2}\cos\theta$$

בבניית ההצגה המטריציונית של $\hat{H}$ שימו לב כי

$$\hat{H}_0\left|1s\right\rangle = -\tfrac{1}{2}\left|1s\right\rangle$$
$$\hat{H}_0\left|2p_z\right\rangle = -\tfrac{1}{8}\left|2p_z\right\rangle$$

השתמשו בקירוב $(1+x)^{1/2} \approx 1+\frac{x}{2}$ בכדי לבטא את התשובה בטור חזקות לפי F:

$$E(F) = E(0) - \frac{1}{2}\alpha F^2 + \ldots$$

והראו כי הקירוב עבור דיפול הפולריזביליות α הינו $2.96a.u.$ (הערך המדויק הינו $4.5a.u.$).