24/5/2006

כימיה פיזיקלית 2 – תרגיל מספר 9
תורת ההפרעות

1. חלקיק בקופסא (34 נק׳)

עבור חלקיק בפוטנציאל החד-מימדי הבא:

$$V(x)=\begin{cases} 0 & 0<x\le l/4,\quad 3l/4\le x<l \\ \hbar^2/(ml^2) & l/4<x<3l/4 \\ \infty & \text{elsewhere} \end{cases}$$

התייחסו אל המערכת כעל חלקיק מופרע בקופסא.

א. מהי האנרגיה בקירוב ה-0, $E_n^{(0)}$?

ב. מהו התיקון הראשון לאנרגיה $E_n^{(1)}$?

ג. עבור מצב היסוד והמצב במעורר הראשון, השוו את האנרגיה הכוללת שקיבלתם $E_n^{(0)}+E_n^{(1)}$, לאנרגיה ה״אמיתית״ של המערכת: $E_1=5.750345\hbar^2/(ml^2)$ ו $E_2=20.23604\hbar^2/(ml^2)$

ד. מהו התיקון הראשון לפונקצית הגל $\psi_n^{(1)}$? (השאירו את תשובתכם בצורת אינטגרל)

2. אטום הליום (33 נק׳)

ההמילטוניאן של אטום ההליום הינו: $\hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_1^2-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_2^2-\frac{Ze^2}{r_1}-\frac{Ze^2}{r_2}+\frac{Ze^2}{r_{12}}$

א. הסבירו מהו כל איבר בהמילטוניאן.

נניח ואנו מפרקים את המילטוניאן ההליום (בצורה שונה ממה שמקובל) להמילטוניאן בלתי מופרע

$$\hat{H}^0=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_1^2-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_2^2-\frac{(Z-5/16)e^2}{r_1}-\frac{(Z-5/16)e^2}{r_2}$$

ולהפרעה $\hat{H}'=-\frac{5e^2}{16r_1}-\frac{5e^2}{16r_2}+\frac{e^2}{r_{12}}$

ב. הסבירו למה אנלוגי המילטוניאן שכזה (באופן רעיוני).

ג. מהן הפונקציות העצמיות הבלתי מופרעות במקרה זה?

ד. מהי האנרגיה הבלתי מופרעת של מצב היסוד $E_1^{(0)}$? ומהו התיקון הראשון לאנרגיה זו $E_1^{(1)}$?

העזרו בערך התצפית $\langle\psi_{1s}(1)\psi_{1s}(2)|\frac{1}{r_{12}}|\psi_{1s}(1)\psi_{1s}(2)\rangle=\frac{5z}{8a_0}$.

3. אוסילטור אנהרמוני (33 נק׳)

עבור אוסילטור אנהרמוני חד מימדי בעל המילטוניאן $\hat{H}=-\frac{\hbar^2\partial^2}{2m\partial x^2}+\frac{kx^2}{2}+cx^3$

התייחסו להפרעה כאל $\hat{H}'=cx^3$.

א. מהו $E_n^{(1)}$?

אמיר חלבה – אורנשטיין 405, טלפון: 03-6408902.
e-mail: ehaleva@post.tau.ac.il

ב. מהו $E_n^{(2)}$?

ג. אילו מצבים בלתי מופרעים ($\psi_n^{(0)}$) תורמים לתיקון בפונקצית הגל $\psi_n^{(1)}$?

בתשובתכם היעזרו במכפלה הסקלארית עבור פונקציות עצמיות של אוסילטור הרמוני:

$$\left\langle \psi_m^{(0)} \middle| x^3 \middle| \psi_n^{(0)} \right\rangle = \sqrt{\frac{(n+1)(n+2)(n+3)}{8\alpha^3}}\delta_{m,n+3} + 3\left(\frac{n+1}{2\alpha}\right)^{3/2}\delta_{m,n+1} + 3\left(\frac{n}{2\alpha}\right)^{3/2}\delta_{m,n-1} + \sqrt{\frac{n(n-1)(n-2)}{8\alpha^3}}\delta_{m,n-3}$$

נוסחאות כלליות

האנרגיה של ההמילטוניאן הבלתי מופרע (הקרוב ה-0): $\hat{H}^0\psi_n^{(0)} = E_n^{(0)}\psi_n^{(0)}$

התיקון הראשון לאנרגיה: $E_n^{(1)} = \left\langle \psi_n^{(0)} \middle| \hat{H}' \middle| \psi_n^{(0)} \right\rangle$

התיקון הראשון לפונקצית הגל: $\psi_n^{(1)} = \sum_{m\neq n} \frac{\left\langle \psi_m^{(0)} \middle| \hat{H}' \middle| \psi_n^{(0)} \right\rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}\psi_m^{(0)}$

התיקון השני לאנרגיה: $E_n^{(2)} = \sum_{m\neq n} \frac{\left| \left\langle \psi_m^{(0)} \middle| \hat{H}' \middle| \psi_n^{(0)} \right\rangle \right|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}$

<u>**כימיה פיזיקלית 2 - תרגיל כיתה מספר 9**</u>

1. עבור אוסילטור אנהרמוני חד מימדי בעל המילטוניאן $\hat{H} = -\frac{\hbar^2\partial^2}{2m\partial x^2} + \frac{kx^2}{2} + cx^3 + dx^4$

נתייחס להפרעה כ $\hat{H}' = cx^3 + dx^4$.

א. מהם הפונקציות הבלתי מופרעות? (הפונקציות העצמיות של אוסילטור הרמוני)

ב. מהו הקירוב האפס לאנרגיה? ($E_n^{(0)} = \hbar\omega(n+\frac{1}{2})$)

ג. מהו התיקון הראשון לאנרגיה של מצב היסוד $E_0^{(1)}$? ($E_0^{(1)} = 3d/(4\alpha^2)$)

2. עבור חלקיק בקופסא חד מימדית (ברוחב a) עם הפרעה $\hat{H}' = -\varepsilon\sin(\pi x/a)$

א. מהו התיקון הראשון לאנרגיה $E_n^{(1)}$?

ב. מהו התיקון הראשון לפונקצית הגל של מצב היסוד $\psi_1^{(1)}$?

ג. מהו התיקון השני לאנרגיה של מצב היסוד $E_1^{(2)}$?

אמיר חלבה – אורנשטיין 405, טלפון: 03-6408902.
e-mail: ehaleva@post.tau.ac.il