13/6/2007

<u>כימיה פיזיקלית 2 – תרגיל מספר 8</u>
תורת ההפרעות ושיטת הוריאציה

1. חלקיק בקופסא

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. חלקיק בטבעת

לחלקיק חופשי בטבעת הוסיפו את ההפרעה $\hat{H}'=V$ בתחום $0<\varphi<\pi$.

א. מהם התיקונים הראשונים לאנרגיה $E_n^{(1)}$?

ב. מהו התיקון לפונקצית גל כללית $\psi_n^{(1)}$?

ג. מהו $E_n^{(2)}$?

ד. אילו מצבים בלתי מופרעים ($\psi_n^{(0)}$) תורמים לתיקון בפונקצית הגל $\psi_7^{(1)}$?

3. אוסילטור אנהרמוני

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 $E_n^{(1)}$?

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:

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

4. תיקון לאטום המימן.

בהנחה כי בגרעין אטום המימן המטען לא מרוכז כולו בנקודה אלא בכדור שרדיוסו $r_0=10^{-13}$cm. מה יהיה התיקון הראשון לאנרגית מצב היסוד (יחסית לאנרגיית היסוד)? להזכירכם, הפוטנציאל הפועל על האלקטרון בתוך הגרעין הוא $V=-eQ/r$ כאשר Q היא כמות המטען בכדור שרדיוסו r.

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

(בפתרון האינטגרל הניחו כי $e^{-r/a}\sim 1$ עבור $r<<a$.)

5. השתמשו בפונקצית הוריאציה $\phi(x)=C/(a^2+x^2)$ ע"מ למצוא חסם עליון לאנרגיה של אוסילטור הרמוני חד מימדי. נרמלו את ϕ תחילה מצאו את האנרגיה ואת ערכה המינימלי כפונקציה של a. מה אחוז השגיאה באנרגיה מהערך של מצב היסוד האמיתי.

(העזרו באינטגרלים הבאים:

$$\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dx}{\left(a^2+x^2\right)^2}=\frac{\pi}{2a^3}\qquad \int_{-\infty}^{\infty}\frac{dx}{\left(a^2+x^2\right)^3}=\frac{3\pi}{8a^5}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty}\frac{x^2dx}{\left(a^2+x^2\right)^2}=\frac{\pi}{2a}\qquad \int_{-\infty}^{\infty}\frac{x^2dx}{\left(a^2+x^2\right)^4}=\frac{\pi}{16a^5}$$

)

6. א. השתמשו בפונקצית הוריאציה $\phi(r)=Ce^{-\lambda r}$ וחשבו מפורשות את האנרגיה הוריאציונית של אטום המימן. (זכרו לנרמל את ϕ תחילה.) מהו ערכה המינימלי (כפונקציה של λ)? השוו לאנרגית מצב היסוד של אטום המימן והסבירו את תשובתכם.

ב. על סמך תשובתכם ב-א. איזה אנרגיה היינו מקבלים אילו היינו משתמשים בפונקצית הוריאציה $\phi(r)=(1-\lambda r)e^{-\lambda r}$?

ג. האם האנרגיה של פונקצית הוריאציה $\phi(r)=e^{-\lambda r^2}$ קטנה או גדולה מזו של סעיף א. ? הסבירו.

7. חלקיק נמצא בקופסא כדורית בעלת רדיוס b כלומר V=0 עבור r<0 ואינסוף בכל מקום אחר.

השתמשו בפונקציה $\phi(r)=b-r$ ע"מ להעריך את האנרגיה של רמת הייסוד. עד כמה היא רחוקה מרמת היסוד האמיתית $h^2/8mb^2$.

להזכירכם מכפלה סקלארית במרחב כדורי היא האינטגרל $\langle\phi\,|\,\phi\rangle=\iiint\phi^*\phi r^2dr\sin\theta d\theta d\varphi$

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

כימיה פיזיקלית 2 - תרגיל כיתה מספר 8

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 $E_1^{(2)}$?

3. השתמש בפונקציית וריאציה מהצורה $\phi(r) = Ce^{-\lambda r}$ על מנת לקרב את אנרגיית מצב הייסוד של אוסצילטור הרמוני תלת ממדי ($\sqrt{3}h\upsilon$).

א. מהו ערך אנרגיית מצב הייסוד שהיה מתקבל אילו היינו בוחרים פונקציית וריאציה מהצורה $\phi(r) = Ce^{-\lambda r^2}$?

נוסחאות כלליות (בתורת ההפרעות)

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

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