

כימיה פיזיקלית 2 – פתרון תרגיל מספר 4

1. עבור מידות מסוימות של הקופסא, יתכן ניוון ברמות האנרגיה. לדוגמא עבור $b=2a$ מתקיים התנאי

$$(a \neq b \neq c) \text{ ורמת האנרגיה } E_{2,2,n_z} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m} \left(\frac{2^2}{a^2} + \frac{2^2}{b^2} + \frac{n_z^2}{c^2} \right) = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m} \left(\frac{4}{a^2} + \frac{4}{4a^2} + \frac{n_z^2}{c^2} \right) = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m} \left(\frac{5}{a^2} + \frac{n_z^2}{c^2} \right)$$

$$\text{לרמת האנרגיה } E_{1,4,n_z} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m} \left(\frac{1^2}{a^2} + \frac{4^2}{b^2} + \frac{n_z^2}{c^2} \right) = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{a^2} + \frac{16}{4a^2} + \frac{n_z^2}{c^2} \right) = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m} \left(\frac{5}{a^2} + \frac{n_z^2}{c^2} \right)$$

(הערה: באופן כללי אם היינו מגדירים $b=Ca$ והיינו דורשים ניוון בין שני המצבים Ψ_{n_x, n_y, n_z} ו- $\Psi_{n'_x, n'_y, n'_z}$)

$$E_{n_x, n_y, n_z} = E_{n'_x, n'_y, n'_z} \text{ היה מוביל ל- } C = \sqrt{\frac{n_y'^2 - n_y^2}{n_x^2 - n_x'^2}}.$$

2. א. אין צורך לבצע אינטגרל. זוהי במפורש פונקצית הבסיס $\Psi_{3,4}(x, y)$. כלומר, זהו מצב טהור. לכן

$$C_{3,4} = 1, \text{ וכל שאר המקדמים שווים 0.}$$

ב. גם כאן אין הכרח לבצע את האינטגרציה. פונקצית הגל כתובה כבר בצורת קומבינציה שכזו. כאשר

$$C_{5,2} = 2/3, \quad C_{2,5} = \frac{\sqrt{5}}{3}.$$

ג. כל המקדמים שאינם $C_{3,j}$ מתאפסים. עבור המקדמים מהסוג $C_{3,j}$

$$\begin{aligned} C_{3,j} &= \int_0^a \int_0^a \Psi_{3,j} \varphi(x, y) dx dy = \int_0^a \int_0^a \frac{2}{a} \sin\left(\frac{3\pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{j\pi y}{a}\right) \frac{4}{\sqrt{3}a} \sin\left(\frac{3\pi x}{a}\right) \sin^2\left(\frac{\pi y}{a}\right) dx dy = \\ &= \left[\frac{2}{a} \int_0^a \sin^2\left(\frac{3\pi x}{a}\right) dx \right] \int_0^a \frac{4}{\sqrt{3}a} \sin\left(\frac{j\pi y}{a}\right) \sin^2\left(\frac{\pi y}{a}\right) dy = \frac{4}{\sqrt{3}a} \frac{2a(\cos(j\pi) - 1)}{j(j^2 - 4)\pi} = \\ &= \begin{cases} \frac{-16}{\sqrt{3}j(j^2 - 4)\pi} & j \in \text{odd} \\ 0 & j \in \text{even} \end{cases} \end{aligned}$$

$$\langle H \rangle = \langle \varphi | H | \varphi \rangle = \langle \Psi_{3,4} | H | \Psi_{3,4} \rangle = \left\langle \Psi_{3,4} \left| \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} (3^2 + 4^2) \Psi_{3,4} \right. \right\rangle =$$

$$= \frac{25\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} \langle \Psi_{3,4} | \Psi_{3,4} \rangle = \frac{25\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}$$

$$\langle H \rangle = \left\langle \frac{2}{3} \Psi_{5,2} + \frac{\sqrt{5}}{3} \Psi_{2,5} \left| H \right| \frac{2}{3} \Psi_{5,2} + \frac{\sqrt{5}}{3} \Psi_{2,5} \right\rangle = \left\langle \frac{2}{3} \Psi_{5,2} + \frac{\sqrt{5}}{3} \Psi_{2,5} \left| \frac{2}{3} H \Psi_{5,2} + \frac{\sqrt{5}}{3} H \Psi_{2,5} \right. \right\rangle =$$

$$= \left\langle \frac{2}{3} \Psi_{5,2} + \frac{\sqrt{5}}{3} \Psi_{2,5} \left| \frac{2}{3} \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} (2^2 + 5^2) \Psi_{5,2} + \frac{\sqrt{5}}{3} \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} (2^2 + 5^2) \Psi_{2,5} \right. \right\rangle =$$

$$= \frac{29\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} \left\langle \frac{2}{3} \Psi_{5,2} + \frac{\sqrt{5}}{3} \Psi_{2,5} \left| \frac{2}{3} \Psi_{5,2} + \frac{\sqrt{5}}{3} \Psi_{2,5} \right. \right\rangle = \frac{29\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} \langle \varphi | \varphi \rangle = \frac{29\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}$$

$$\langle H \rangle = \sum_{n_x, n_y} C_{n_x, n_y}^2 E_{n_x, n_y} = \left(\frac{2}{3}\right)^2 \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} (2^2 + 5^2) + \left(\frac{\sqrt{5}}{3}\right)^2 \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} (5^2 + 2^2) = \frac{29\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} \quad \text{ואפשר גם}$$

$$\begin{aligned}
 \langle H \rangle &= \sum_{n_x, n_y} C_{n_x, n_y}^2 E_{n_x, n_y} = \sum_{j=\text{odd}} C_{3,j}^2 \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} (3^2 + j^2) = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} \left(\sum_{j=\text{odd}} 9C_{3,j}^2 + \sum_{j=\text{odd}} j^2 C_{3,j}^2 \right) \\
 &= \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} \left[9 + \sum_{j=\text{odd}} j^2 \left(\frac{-16}{\sqrt{3}j(j^2-4)\pi} \right)^2 \right] = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} \left[9 + \sum_{j=\text{odd}} \frac{256}{3(j^2-4)^2 \pi^2} \right]
 \end{aligned}$$

ג.

4. לא. פונקציה זו אינה יכולה להיות פונקצית גל של חלקיק בקופסא מכיוון שהיא אינה מתאפסת ב $y=0$ וב $y=a$