13/6/2007

כימיה פיזיקלית 2 – פתרון תרגיל מספר 8

1. א. האנרגיה בקרוב ה-0 היא אנרגית חלקיק בקופסא חד מימדית $E_n^{(0)} = \dfrac{\pi^2\hbar^2 n^2}{2ml^2}$

ב. התיקון הראשון לאנרגיה מתקבל ע"י

$$E_n^{(1)} = \left\langle \psi_n^{(0)} \middle| \hat{H}' \middle| \psi_n^{(0)} \right\rangle = \int_{l/4}^{3l/4} \sqrt{\frac{2}{l}} \sin\left(\frac{n\pi x}{l}\right) \frac{\hbar^2}{ml^2} \sqrt{\frac{2}{l}} \sin\left(\frac{n\pi x}{l}\right) dx$$

$$= \frac{2\hbar^2}{ml^3} \int_{l/4}^{3l/4} \sin^2\left(\frac{n\pi x}{l}\right) dx = \frac{2\hbar^2}{ml^3} \left[\frac{x}{2} - \frac{l\sin(2n\pi x/l)}{4n\pi}\right]_{l/4}^{3l/4} = \frac{2\hbar^2}{ml^3} l \left[\frac{1}{4} + \frac{\sin(n\pi/2) - \sin(3n\pi/2)}{4n\pi}\right]$$

$$= \frac{2\hbar^2}{ml^2} \left[\frac{1}{4} - \frac{(-1)^n \sin(n\pi/2)}{2n\pi}\right]$$

ג. $$E_1^{(0)} + E_1^{(1)} = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ml^2} + \frac{2\hbar^2}{ml^2}\left[\frac{1}{4} - \frac{-1\sin(\pi/2)}{\pi}\right] = \frac{\hbar^2}{ml^2}\left[\frac{\pi^2}{2} + \frac{1}{2} + \frac{1}{\pi}\right] \approx 5.75311\frac{\hbar^2}{ml^2}$$

ו - $$E_2^{(0)} + E_2^{(1)} = \frac{\pi^2\hbar^2 4}{2ml^2} + \frac{2\hbar^2}{ml^2}\left[\frac{1}{4} - \frac{\sin(2\pi/2)}{2\pi}\right] = \frac{\hbar^2}{ml^2}\left(2\pi^2 + \tfrac{1}{2}\right) \approx 20.23921\frac{\hbar^2}{ml^2}$$

כלומר קיבלנו אנרגיות קרובות מאוד לאנרגיות האמיתיות.

ד. התיקון הראשון לפונקצית הגל מתקבל ע"י

$$\psi_n^{(1)} = \sum_{m\neq n} \frac{\left\langle \psi_m^{(0)} \middle| \hat{H}' \middle| \psi_n^{(0)} \right\rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \psi_m^{(0)} = \sum_{m\neq n} \frac{\frac{\hbar^2}{ml^2}\frac{2}{l}\int_{l/4}^{3l/4} \sin(n\pi x/l)\sin(m\pi x/l)dx}{\frac{\pi^2\hbar^2}{2ml^2}(n^2-m^2)} \sqrt{2/l}\sin(m\pi x/l) =$$

$$= \sum_{m\neq n} \frac{4}{\pi^2 l(n^2-m^2)} \sqrt{\frac{2}{l}} \left[\int_{l/4}^{3l/4} \sin(n\pi x/l)\sin(m\pi x/l)dx\right] \sin(m\pi x/l)$$

2. א. התיקון הראשון לאנרגיה הוא

$$E_m^{(1)} = \left\langle \psi_m^{(0)} \middle| \hat{H}' \middle| \psi_m^{(0)} \right\rangle = \int_0^{2\pi} \psi_m^{(0)*} \hat{H}' \psi_m^{(0)} d\varphi = \int_0^{\pi} \sqrt{\tfrac{1}{2\pi}} e^{-im\varphi} V \sqrt{\tfrac{1}{2\pi}} e^{im\varphi} d\varphi = \frac{V}{2\pi}\pi = V/2$$

בלי תלות ברמת האנרגיה.

ב. ראשית נחשב את האינטגרל

$$\left\langle \psi_m^{(0)} \middle| \hat{H}' \middle| \psi_n^{(0)} \right\rangle = \int_0^{\pi} \sqrt{\tfrac{1}{2\pi}} e^{-im\varphi} V \sqrt{\tfrac{1}{2\pi}} e^{in\varphi} d\varphi = \frac{V}{2\pi}\int_0^{\pi} e^{-i(n-m)\varphi} d\varphi = \frac{V}{2\pi}\left[\frac{e^{-i(n-m)\varphi}}{-i(n-m)}\right]_0^{\pi} =$$

$$\frac{V}{2\pi}\left[\frac{e^{-i(n-m)\pi} - 1}{i(m-n)}\right] = \begin{cases} \dfrac{V}{\pi}\dfrac{i}{(m-n)} & n-m = \text{odd} \\ 0 & n-m = \text{even} \end{cases}$$

התיקון לפונקצית הגל ה n הוא

$$\psi_n^{(1)} = \sum_{m\neq n} \frac{\left\langle \psi_m^{(0)} \middle| \hat{H}' \middle| \psi_n^{(0)} \right\rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \psi_m^{(0)} = \sum_{\substack{m\neq n \\ n-m=\text{odd}}} \frac{\frac{V}{\pi}\frac{i}{m-n}}{\frac{\hbar^2}{2I}(n^2-m^2)} \psi_m^{(0)} = \frac{2VI}{\pi\hbar^2} \sum_{\substack{m\neq n \\ n-m=\text{odd}}} \frac{i\psi_m^{(0)}}{(n^2-m^2)(m-n)}$$

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

ג. התיקון השני לאנרגיה הוא

$$E_n^{(2)}=\sum_{m\neq n}\frac{\left|\left\langle\psi_m^{(0)}\left|\hat{H}'\right|\psi_n^{(0)}\right\rangle\right|^2}{E_n^{(0)}-E_m^{(0)}}=\frac{V^2}{\pi^2}\sum_{\substack{m\neq n\\ n-m=\text{odd}}}\frac{\frac{1}{(m-n)^2}}{\frac{\hbar^2}{2I}(n^2-m^2)}=\frac{2IV^2}{\hbar^2\pi^2}\sum_{\substack{m\neq n\\ n-m=\text{odd}}}\frac{1}{(n^2-m^2)(m-n)^2}$$

ד. המצבים שתורמים לתיקון בפונקצית הגל $\psi_7^{(1)}$ הינם המצבים הזוגיים בלבד (בעלי מספר קוונטי m זוגי).

3. א. נבצע את האינטגרל $E_n^{(1)}=\left\langle\psi_n^{(0)}\left|\hat{H}'\right|\psi_n^{(0)}\right\rangle=\int_{-\infty}^{\infty}\left|\psi_n^{(0)}\right|^2 cx^3dx=0$. מכיוון שפונקציות הבסיס סימטריות (עבור n זוגי) או אנטי סימטריות (עבור n אי זוגי) ריבועם הוא תמיד סימטרי והאינטגרל עצמו הוא על פונקציה אנטי סימטרית).

ב. נציב בנוסחה

$$E_n^{(2)}=\sum_{m\neq n}\frac{\left|\left\langle\psi_m^{(0)}\left|\hat{H}'\right|\psi_n^{(0)}\right\rangle\right|^2}{E_n^{(0)}-E_m^{(0)}}=\sum_{m\neq n}\frac{c^2\left|\left\langle\psi_m^{(0)}\left|x^3\right|\psi_n^{(0)}\right\rangle\right|^2}{\hbar\omega(n+1/2)-\hbar\omega(m+1/2)}$$

$$=\sum_{m\neq n}\frac{c^2}{\hbar\omega(n-m)}\left[\frac{(n+1)(n+2)(n+3)}{8\alpha^3}\delta_{m,n+3}+9\left(\frac{n+1}{2\alpha}\right)^3\delta_{m,n+1}+9\left(\frac{n}{2\alpha}\right)^3\delta_{m,n-1}+\frac{n(n-1)(n-2)}{8\alpha^3}\delta_{m,n-3}\right]$$

$$=\frac{c^2}{8\alpha^3\hbar\omega}\left[\frac{(n+1)(n+2)(n+3)}{-3}+9\frac{(n+1)^3}{-1}+9\frac{n^3}{1}+\frac{n(n-1)(n-2)}{3}\right]$$

$$=\frac{c^2}{8\alpha^3\hbar\omega}\left[-\frac{n^3+6n^2+11n+6}{3}-9\frac{n^3+3n^2+3n+1}{1}+9\frac{n^3}{1}+\frac{n^3-3n^2+2n}{3}\right]$$

$$=\frac{c^2}{8\alpha^3\hbar\omega}\left[-\frac{9n^2+9n+6}{3}-9(3n^2+3n+1)\right]=\frac{-c^2(30n^2+30n+11)}{8\alpha^3\hbar\omega}$$

ג. התיקון הראשון לפונקצית הגל ה n-ית ניתן ע"י $\psi_n^{(1)}=\sum_{m\neq n}\frac{\left\langle\psi_m^{(0)}\left|\hat{H}'\right|\psi_n^{(0)}\right\rangle}{E_n^{(0)}-E_m^{(0)}}\psi_m^{(0)}$. ואילו תוצאת האינטגרל $\left\langle\psi_m^{(0)}\left|x^3\right|\psi_n^{(0)}\right\rangle$ הינה אוסף פונקציות דלתא ושונה מ-0 רק כאשר $m=n-3,\ m=n-1,\ m=n+1,\ m=n+3$. כלומר התיקון הראשון לפונקצית הגל ה n-ית הינו סכום של ארבע פונקציות גל בלבד $\psi_n^{(1)}=C_{n-3}\psi_{n-3}^{(0)}+C_{n-1}\psi_{n-1}^{(0)}+C_{n+1}\psi_{n+1}^{(0)}+C_{n+3}\psi_{n+3}^{(0)}$.

4. תיקון לאטום המימן.

ההמילטוניאן שאנו מחפשים הוא $\hat{H}=\hat{T}-\frac{eQ}{r}=\left[\hat{T}-\frac{e^2}{r}\right]+\left[\frac{e^2}{r}-\frac{eQ}{r}\right]=H^0+H'$

הפוטנציאל הפועל על האלקטרון בתוך הגרעין הוא $V=-eQ/r$ כאשר Q היא כמות המטען בכדור שרדיוסו r כלומר היא פונקציה של r (המרחק ממרכז הכדור). כמובן שמחוץ לכדור הפוטנציאל

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

יהיה כרגיל $V=-e^2/r$. ההפרעה להמילטוניאן היא אם כך

$$\hat{H}'=\frac{e^2}{r}-\frac{eQ}{r}=\frac{e^2}{r}-\frac{eV\rho}{r}=\frac{e^2}{r}-\frac{e\frac{4\pi}{3}r^3\left(e/\frac{4\pi r_0^3}{3}\right)}{r}=\frac{e^2}{r}-\frac{e^2r^2}{r_0^3}$$ בתחום $r<r_0$. (V מסמן את

נפחו של כדור ברדיוס r ו ρ את צפיפות המטען של הגרעין.)

והתיקון הראשון לאנרגיה הוא

$$E_{100}^{(1)}=\left\langle\psi_{100}^{(0)}\middle|\hat{H}'\middle|\psi_{100}^{(0)}\right\rangle=\left\langle R_{10}Y_0^0\middle|\frac{e^2}{r}-\frac{e^2r^2}{r_0^3}\middle|R_{10}Y_0^0\right\rangle=\left\langle R_{10}\middle|\frac{e^2}{r}-\frac{e^2r^2}{r_0^3}\middle|R_{10}\right\rangle\left\langle Y_0^0\middle|Y_0^0\right\rangle=\int_0^{r_0}R_{10}^*\left(\frac{e^2}{r}-\frac{e^2r^2}{r_0^3}\right)R_{10}r^2dr$$

$$=\int_0^{r_0}\left(\frac{2}{a^{3/2}}e^{-r/a}\right)^2\left(\frac{e^2}{r}-\frac{e^2r^2}{r_0^3}\right)r^2dr=\frac{4e^2}{a^3}\left(\int_0^{r_0}e^{-2r/a}rdr-\frac{1}{r_0^3}\int_0^{r_0}e^{-2r/a}r^4dr\right)\approx\frac{4e^2}{a^3}\left(\int_0^{r_0}rdr-\frac{1}{r_0^3}\int_0^{r_0}r^4dr\right)$$

$$=\frac{4e^2}{a^3}\left(\frac{r_0^2}{2}-\frac{1}{r_0^3}\frac{r_0^5}{5}\right)=\frac{6e^2r_0^2}{5a^3}=\frac{-e^2}{2a}\left(\frac{-12r_0^2}{5a^2}\right)=\frac{-12r_0^2}{5a^2}E_{100}\Bigg|_{a\approx0.52\,\text{Å},r=0.00001\,\text{Å}}\approx-8.9\cdot10^{-10}E_{100}\approx1.2\cdot10^{-8}\text{eV}$$

זהו כמובן תיקון קטן מאוד.

5. תחילה ננרמל את ϕ:

$$\langle\phi|\phi\rangle=\int_{-\infty}^{\infty}\phi(x)^*\phi(x)dx=\int_{-\infty}^{\infty}\frac{C^2}{\left(a^2+x^2\right)^2}dx=\frac{C^2\pi}{2a^3}=1\quad\Rightarrow\quad C=\sqrt{2a^3/\pi}$$

ואז נבצע את האינטגרל

$$\left\langle\phi\middle|\hat{H}\middle|\phi\right\rangle=\int_{-\infty}^{\infty}\phi(x)^*\left(\frac{-\hbar^2\partial^2}{2m\partial x^2}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2\right)\phi(x)dx=\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\sqrt{2a^3/\pi}}{a^2+x^2}\left(\frac{-\hbar^2\partial^2}{2m\partial x^2}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2\right)\frac{\sqrt{2a^3/\pi}}{a^2+x^2}dx$$

$$=\frac{m\omega^2}{2}\frac{2a^3}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{x^2dx}{\left(a^2+x^2\right)^2}-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{2a^3}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dx}{a^2+x^2}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\frac{1}{a^2+x^2}=\frac{m\omega^2a^3}{\pi}\frac{\pi}{2a}+\frac{2a^3\hbar^2}{2\pi m}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dx}{a^2+x^2}\frac{\partial}{\partial x}\frac{2x}{\left(a^2+x^2\right)^2}$$

$$=\frac{m\omega^2a^2}{2}+\frac{a^3\hbar^2}{\pi m}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dx}{a^2+x^2}\left[\frac{2}{\left(a^2+x^2\right)^2}-\frac{8x^2}{\left(a^2+x^2\right)^3}\right]=\frac{m\omega^2a^2}{2}+\frac{a^3\hbar^2}{\pi m}\int_{-\infty}^{\infty}\left[\frac{2}{\left(a^2+x^2\right)^3}-\frac{8x^2}{\left(a^2+x^2\right)^4}\right]dx$$

$$=\frac{m\omega^2a^2}{2}+\frac{a^3\hbar^2}{\pi m}\left(\frac{3\pi}{4a^5}-\frac{\pi}{2a^5}\right)=\frac{m\omega^2a^2}{2}+\frac{\hbar^2}{4ma^2}$$

ונגזור את התוצאה לפי a ע״מ למצוא לה מינימום:

$$\frac{\partial}{\partial a}\left(\frac{m\omega^2a^2}{2}+\frac{\hbar^2}{4ma^2}\right)=m\omega^2a-\frac{\hbar^2}{2ma^3}=0\quad\Rightarrow\quad a=\sqrt[4]{\frac{\hbar^2}{2m^2\omega^2}}$$

נציב בחזרה באנרגיה ונקבל $\frac{\omega\hbar}{2\sqrt{2}}+\frac{\hbar\omega\sqrt{2}}{4}=\omega\hbar/\sqrt{2}$.

וביחס לערך העצמי של מצב היסוד ($\hbar\omega/2$) קיבלנו פקטור של $\sqrt{2}\approx1.41$, כלומר שגיאה של **~41%**.

6. **א.** ננרמל את ϕ

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

$$\langle\phi\,|\,\phi\rangle=\int\phi(r,\theta,\varphi)^*\phi(r,\theta,\varphi)r^2\sin\theta drd\theta d\varphi=\int_0^\infty\int_0^\pi\int_0^{2\pi}C^2r^2e^{-2\lambda r}\sin\theta drd\theta d\varphi$$

$$=4\pi C^2\int_0^\infty r^2e^{-2\lambda r}dr=\frac{4\pi C^2}{4\lambda^3}=\frac{\pi C^2}{\lambda^3}=1\quad\Rightarrow\quad C=\sqrt{\lambda^3/\pi}$$

ונמצא את האנרגיה

$$\left\langle\phi\left|\hat{H}\right|\phi\right\rangle=\int r^2dr\sin\theta d\theta d\varphi\phi(r)^*\left(\frac{-\hbar^2\nabla^2}{2m}-\frac{e^2}{r}\right)\phi(r)$$

$$=C^2\int_0^\infty\int_0^\pi\int_0^{2\pi}r^2dr\sin\theta d\theta d\varphi e^{-\lambda r}\left[\frac{-\hbar^2\partial}{2mr^2\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)+\frac{\hat{L}^2}{2mr^2}-\frac{e^2}{r}\right]e^{-\lambda r}$$

$$=4\pi C^2\left[\int_0^\infty dre^{-\lambda r}\frac{\hbar^2\partial}{2m\partial r}\left(ar^2e^{-\lambda r}\right)-\int_0^\infty r^2dr\frac{e^2}{r}e^{-2\lambda r}\right]=4\pi C^2\left[\frac{\lambda\hbar^2}{2m}\int_0^\infty dre^{-\lambda r}\left(2re^{-\lambda r}-\lambda r^2e^{-\lambda r}\right)-\frac{e^2}{4\lambda^2}\right]$$

$$=4\pi\frac{\lambda^3}{\pi}\left[\frac{\lambda\hbar^2}{2m}\left(\frac{2}{4\lambda^2}-\frac{\lambda}{4\lambda^3}\right)-\frac{e^2}{4\lambda^2}\right]=4\lambda^3\left(\frac{\hbar^2}{8m\lambda}-\frac{e^2}{4\lambda^2}\right)=\frac{\hbar^2\lambda^2}{2m}-\lambda e^2$$

כעת נגזור לפי λ ע״מ למצוא את המינימום

$$\frac{\partial}{\partial\lambda}\left(\frac{\hbar^2\lambda^2}{2m}-\lambda e^2\right)=\frac{\hbar^2\lambda}{m}-e^2=0\quad\Rightarrow\quad\lambda=\frac{me^2}{\hbar^2}$$

ונציב באנרגיה ע״מ לקבל $\frac{me^4}{2\hbar^2}-\frac{me^4}{\hbar^2}=-\frac{me^4}{2\hbar^2}=E_{100}$, כלומר אנרגיה הזהה למצב היסוד של אטום המימן. זאת מכיוון שהפונקצית הוריאציה הינה זהה, עד כדי נרמול ו λ לפונקציה העצמית של מצב היסוד. לאחר נרמול ומינימיזציה, היא זהה לה לחלוטין ולכן נותנת אותו ערך עצמי.

ב. פונקצית וריאציה זו נראית כמו הפונקציה ψ_{200} העצמית להמילטוניאן ולכן תיתן מינימום ב $\lambda=\frac{me^2}{2\hbar^2}$ ואנרגיה $E_{200}=-\frac{me^4}{8\hbar^2}$.

ג. האנרגיה שתתן פונקצית הוריאציה הזו בהכרח גדולה מהאנרגיה של מצב היסוד.

7. **א.** ננרמל את ϕ

$$\langle\phi\,|\,\phi\rangle=\int\phi^*\phi r^2\sin\theta drd\theta d\varphi=\int_0^b\int_0^\pi\int_0^{2\pi}C^2(r-b)^2r^2\sin\theta drd\theta d\varphi=4\pi C^2\int_0^b(r^4-2br^3+b^2r^2)dr$$

$$=4\pi C^2\left(\tfrac{b^5}{5}-2b\tfrac{b^4}{4}+b^2\tfrac{b^3}{3}\right)=4\pi C^2\left(\tfrac{b^5}{5}-2b\tfrac{b^4}{4}+b^2\tfrac{b^3}{3}\right)=\frac{2\pi C^2b^5}{15}=1\quad\Rightarrow\quad C=\sqrt{15/2\pi b^5}$$

ונמצא את האנרגיה

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

$$\left\langle \phi \middle| \hat{H} \middle| \phi \right\rangle = \int r^2 dr \sin\theta d\theta d\varphi \phi(r)^* \left(\frac{-\hbar^2 \nabla^2}{2m} \phi(r) \right) =$$

$$= C^2 \int_0^b \int_0^\pi \int_0^{2\pi} (r-b) r^2 dr \sin\theta d\theta d\varphi \left[\frac{-\hbar^2 \partial}{2mr^2 \partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\hat{L}^2}{2mr^2} \right] (r-b) = -4\pi C^2 \int_0^b (r-b) dr \frac{\hbar^2 \partial}{2m \partial r} \left(r^2 \right)$$

$$= \frac{-4\pi\hbar^2 C^2}{m} \int_0^b (r^2 - br) dr = \frac{-4\pi\hbar^2 C^2}{m} \left[\frac{b^3}{3} - \frac{b^3}{2} \right] = \frac{2\pi\hbar^2 b^3}{3m} \frac{15}{2\pi b^5} = \frac{5\hbar^2}{mb^2} = \frac{5}{4\pi^2} \frac{h^2}{mb^2}$$

יחסית לרמת היסוד האמיתית אנו מקבלים סטייה של כאחוז $\frac{5}{4\pi^2} \frac{h^2}{mb^2} / \frac{h^2}{8mb^2} \approx 1.013$

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