

כימיה קוונטית תשי"ע – תרגיל מספר 1

(להגשה ב- 05.11.09)

1. הוכיחו כי אם לשני אופרטורים יש מערכת שלמה של פונקציות עצמיות משותפות, האופרטורים חלופיים.

שימו לב: לא מספיק להוכיח חלופיות לגבי פעולה על פונקציה אחת!

רמז: כל פונקציה ניתנת לפרישה במערכת הפונקציות העצמיות.

2. פונקציית הגל של אטום מימן בזמן t נתונה ע"י:

$$\Psi = 6^{-1/2}(2p_1) + 2^{-1/2}i(2p_0) - 3^{-1/2}(3d_1)$$

אילו ערכים יכולים להתקבל במדידת $\hat{L}^2$, $\hat{L}_z$ ו- $\hat{H}$ בזמן t ? מהי ההסתברות למדידת כל אחד

מן הערכים? האם המצב הנ"ל הינו מצב עצמי של ההמילטוניאן?

3. המילטוניאן של מערכת חד-ממדית נתון ע"י: $H = \frac{1}{2M} \hat{p}^2 + V(\hat{x})$

א. השתמשו ביחס החילוף יחס החילוף $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$ ובקשר $[A, BC] = [A, B]C + B[A, C]$ בכדי למצוא את יחס החילוף $[\hat{x}, \hat{H}]$.

ב. נתון כי $|\varphi_n\rangle$ הן הפונקציות העצמיות של ההמילטוניאן, $\hat{H}|\varphi_n\rangle = E_n|\varphi_n\rangle$. השתמשו

בתוצאה שנתקבלה בסעיף א' בכדי להוכיח כי: $\langle \varphi_m | \hat{p} | \varphi_n \rangle = \alpha_{mn} \langle \varphi_m | \hat{x} | \varphi_n \rangle$, כאשר

α_{mn} מספר. מצא ביטוי עבור α_{mn} .

ג. השתמשו בתוצאות שהתקבלו עד כה בכדי להוכיח כי מתקיים:

$$\frac{\hbar^2}{M^2} \langle \varphi_n | \hat{p}^2 | \varphi_n \rangle = \sum_m (E_n - E_m)^2 |\langle \varphi_n | \hat{x} | \varphi_m \rangle|^2$$

הערה: עבור האופרטור ההרמיטי $\hat{H}$ אם מתקיים $\hat{H}|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle$, אזי גם מתקיים

$$\langle \Psi | \hat{H} = \langle \Psi | E$$