

כימיה קוונטית תשס"ט – תרגיל מספר 6

(להגשה ב-10.12.09)

1. ההצגה המטריציונית של אופרטורי הספין מתבססת על מטריצות פאולי הדו-ממדיות:

$$\hat{S}_i = \frac{1}{2} \hbar \sigma_i \quad ; \quad \sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad ; \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad ; \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

א. הוכיחו, על פי ההצגה המטריציונית, כי האופרטורים מקיימים את יחסי החילוף של אופרטורי תנע זוויתי:

$$[\hat{S}_x, \hat{S}_y] = i\hbar \hat{S}_z \quad ; \quad [\hat{S}_y, \hat{S}_z] = i\hbar \hat{S}_x \quad ; \quad [\hat{S}_z, \hat{S}_x] = i\hbar \hat{S}_y \quad ; \quad [\hat{S}^2, \hat{S}_z] = 0$$

ב. הוכיחו כי המצבים העצמיים המשותפים של $\hat{S}_z$ ושל $\hat{S}^2$ ניתנים בהצגה זו ע"י הוקטורים

$$|\chi_{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}}\rangle \equiv |\alpha\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad ; \quad |\chi_{\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}}\rangle \equiv |\beta\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

ג. אופרטורי היצירה וההריסה מוגדרים ע"י $\hat{S}^\pm \equiv \hat{S}_x \pm i\hat{S}_y$. הוכיחו כי מתקיימים הקשרים הבאים:

$$\hat{S}^+|\alpha\rangle = 0 \quad ; \quad \hat{S}^+|\beta\rangle = \hbar|\alpha\rangle \quad ; \quad \hat{S}^-|\alpha\rangle = \hbar|\beta\rangle \quad ; \quad \hat{S}^-|\beta\rangle = 0$$

2. אופרטור תנע"ז מוכלל מוגדר ע"י $\vec{\hat{J}} = \vec{\hat{L}} + \vec{\hat{S}}$ כאשר $\vec{\hat{L}}$ הינו אופרטור התנע"ז המרחבי ו- $\vec{\hat{S}}$ אופרטור התנע"ז של הספין. מתוך יחסי החילוף הידועים של האופרטורים $\vec{\hat{L}}$ ו- $\vec{\hat{S}}$ הוכיחו כי $\vec{\hat{J}}$ מקיים את יחסי החילוף המתאימים לאופרטור תנע"ז:

$$[\hat{J}_x, \hat{J}_y] = i\hbar \hat{J}_z \quad ; \quad [\hat{J}_y, \hat{J}_z] = i\hbar \hat{J}_x \quad ; \quad [\hat{J}_z, \hat{J}_x] = i\hbar \hat{J}_y \quad ; \quad [\hat{J}^2, \hat{J}_z] = 0$$

3. ההמילטוניאן של אטום דמוי-מימן בנוכחות אינטראקציות ספין-מסילה ניתן בקואורדינאטות פולאריות על-ידי הביטוי:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{2\mu r^2} \hat{L}^2 - \frac{Ze^2}{r} + \frac{Ze^2}{2\mu^2 c^2 r^3} \vec{\hat{L}} \cdot \vec{\hat{S}}$$

הוכיחו כי הערכים העצמיים של האופרטורים $\hat{L}^2, \hat{S}^2, \hat{J}^2, \hat{J}_z$ הינם מספרים קוונטיים טובים.

4. כיצד מתפצלת הרמה 3d של אטום המימן בהשפעת צימוד ספין מסילה? בטא פונקציה אחת מכל אחת מהרמות שהתקבלו בעזרת האורביטלים 3d.

5. פונקצית גל של חלקיק בעל ספין $1/2$ נתונה ע"י הספינור

$$\Psi = \begin{pmatrix} \Psi_+ \\ \Psi_- \end{pmatrix} ; \quad \begin{cases} \Psi_+(\vec{r}) = R(r)[Y_{00}(\theta, \varphi) - \frac{1}{2}Y_{10}(\theta, \varphi)] \\ \Psi_-(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{3}}R(r)[Y_{11}(\theta, \varphi) + Y_{10}(\theta, \varphi)] \end{cases}$$

- א. איזה תנאי צריכה $R(r)$ לקיים כדי ש Ψ תהיה מנורמלת?
 ב. אילו ערכים יתקבלו במדידת S_z , ובאילו הסתברויות?
 ג. אילו ערכים יתקבלו במדידת L_z , ובאילו הסתברויות?