

כימיה קוונטית תש"ע - פתרון תרגיל 1

1. נתונים שני אופרטורים $\hat{A}$ ו- $\hat{B}$, בעלי מערכת בסיס שלמה של פונקציות עצמיות משותפות $\{\phi_i\}$. עבור כל i מתקיים:

$$\begin{aligned}\hat{A}\phi_i &= a_i\phi_i \\ \hat{B}\phi_i &= b_i\phi_i\end{aligned}$$

עלינו להוכיח כי $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{0}$, כלומר עלינו להראות כי עבור פונקציה כלשהי f מתקיים:

$$(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})f = \hat{0}f = 0$$

כל פונקציה f ניתנת לפריסה ע"י מערכת בסיס שלמה (בהנחה ש- f עונה על תנאי השפה ו"מתנהגת יפה"):

$$f = \sum_i c_i \phi_i$$

נוכל לרשום:

$$\begin{aligned}(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})f &= (\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})\sum_i c_i \phi_i = \sum_i c_i (\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})\phi_i = \sum_i c_i [\hat{A}(\hat{B}\phi_i) - \hat{B}(\hat{A}\phi_i)] = \\ &= \sum_i c_i [\hat{A}(b_i\phi_i) - \hat{B}(a_i\phi_i)] = \sum_i c_i [b_i(\hat{A}\phi_i) - a_i(\hat{B}\phi_i)] = \sum_i c_i [b_i a_i \phi_i - a_i b_i \phi_i] = \sum_i c_i [(b_i a_i - a_i b_i)\phi_i] = 0\end{aligned}$$

$\Downarrow$

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{0}$$

2. נתונה פונקציית גל בזמן t :

$$\Psi = 6^{-1/2}(2p_1) + 2^{-1/2}i(2p_0) - 3^{-1/2}(3d_1) = \frac{1}{\sqrt{6}}\psi_{211} + \frac{i}{\sqrt{2}}\psi_{210} - \frac{1}{\sqrt{3}}\psi_{321}$$

בהפעלת אופרטור $\hat{L}_z$ על פונקצית גל ψ_{nlm} , נקבל: $\hat{L}_z\psi_{nlm} = m\hbar\psi_{nlm}$
ועל-כן:

$$\hat{L}_z\psi_{211} = \hbar\psi_{211} \quad ; \quad \hat{L}_z\psi_{210} = 0 \quad ; \quad \hat{L}_z\psi_{321} = \hbar\psi_{321}$$

לכן, הערכים העצמיים האפשריים הינם 0 ו- $\hbar$.

$$P(\hbar) = \left| \frac{1}{\sqrt{6}} \right|^2 + \left| -\frac{1}{\sqrt{3}} \right|^2 = \frac{1}{6} + \frac{1}{3} = 0.5$$

הסיכוי לקבל את הערך העצמי $\hbar$ ניתן ע"י:

הסיכוי לקבל את הערך העצמי 0 הינו:

$$P(0) = \left| \frac{i}{\sqrt{2}} \right|^2 = \left(\frac{i}{\sqrt{2}} \right)^* \left(\frac{i}{\sqrt{2}} \right) = \left(\frac{-i}{\sqrt{2}} \right) \left(\frac{i}{\sqrt{2}} \right) = 0.5 = 1 - P(\hbar)$$

בהפעלת אופרטור $\hat{L}^2$ על פונקצית גל ψ_{nlm} , נקבל: $\hat{L}^2 \psi_{nlm} = \hbar^2 l(l+1) \psi_{nlm}$

$$\hat{L}^2 \psi_{211} = 2\hbar^2 \psi_{211} \quad ; \quad \hat{L}^2 \psi_{210} = 2\hbar^2 \psi_{210} \quad ; \quad \hat{L}^2 \psi_{321} = 6\hbar^2 \psi_{321} \quad \text{ולכן:}$$

והערכים העצמיים האפשריים הינם: $2\hbar^2$ ו- $6\hbar^2$.

$$P(6\hbar^2) = \left| -\frac{1}{\sqrt{3}} \right|^2 = \frac{1}{3} \quad \text{הסיכוי לקבל את הערך העצמי } 6\hbar^2 \text{ ניתן ע"י:}$$

הסיכוי לקבל את הערך העצמי $2\hbar^2$ הינו:

$$P(2\hbar^2) = \left| \frac{1}{\sqrt{6}} \right|^2 + \left| \frac{i}{\sqrt{2}} \right|^2 = \frac{1}{6} + \left(\frac{i}{\sqrt{2}} \right)^* \left(\frac{i}{\sqrt{2}} \right) = \frac{1}{6} + \left(\frac{-i}{\sqrt{2}} \right) \left(\frac{i}{\sqrt{2}} \right) = \frac{1}{6} + \frac{1}{2} = \frac{2}{3} = 1 - P(6\hbar^2)$$

בהפעלת אופרטור $\hat{H}$ על פונקצית גל ψ_{nlm} , נקבל: $\hat{H} \psi_{nlm} = E_n \psi_{nlm}$

$$E_n = -\frac{2\pi^2 m e^4}{n^2 \hbar^2} \quad \text{כאשר:}$$

$$\hat{H} \psi_{211} = E_2 \psi_{211} \quad ; \quad \hat{H} \psi_{210} = E_2 \psi_{210} \quad ; \quad \hat{H} \psi_{321} = E_3 \psi_{321} \quad \text{ולכן:}$$

$$E_3 = -\frac{2\pi^2 m e^4}{9\hbar^2} \quad \text{ו-} \quad E_2 = -\frac{\pi^2 m e^4}{2\hbar^2} \quad \text{הערכים העצמיים האפשריים הינם:}$$

$$P(E_3) = \left| -\frac{1}{\sqrt{3}} \right|^2 = \frac{1}{3} \quad \text{הסיכוי לקבל את הערך העצמי } E_3 \text{ ניתן ע"י:}$$

הסיכוי לקבל את הערך העצמי E_2 הינו:

$$P(E_2) = \left| \frac{1}{\sqrt{6}} \right|^2 + \left| \frac{i}{\sqrt{2}} \right|^2 = \frac{1}{6} + \left(\frac{i}{\sqrt{2}} \right)^* \left(\frac{i}{\sqrt{2}} \right) = \frac{1}{6} + \left(\frac{-i}{\sqrt{2}} \right) \left(\frac{i}{\sqrt{2}} \right) = \frac{1}{6} + \frac{1}{2} = \frac{2}{3} = 1 - P(E_3)$$

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2M} + V(\hat{x}) \quad \text{3. נתון:}$$

א. נחשב את יחס החילוף הנדרש:

$$[\hat{x}, \hat{H}] = \left[\hat{x}, \frac{\hat{p}^2}{2M} + V(\hat{x}) \right] = \left[\hat{x}, \frac{\hat{p}^2}{2M} \right] + [\hat{x}, V(\hat{x})]$$

$$[\hat{x}, V(\hat{x})] = 0 \quad \text{כיוון ש-} V(\hat{x}) \text{ הינו פונקציה פשוטה של } \hat{x}, \text{ יחס החילוף הבא מתאפס}$$

$$[\hat{x}, \hat{H}] = \left[\hat{x}, \frac{\hat{p}^2}{2M} \right] \quad \text{ועל-כן מתקיים:}$$

$$\text{נשתמש בזהות: } [\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] = [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C} + \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}] \quad \text{ונקבל:}$$

$$[\hat{x}, \hat{H}] = \left[\hat{x}, \frac{\hat{p}^2}{2M} \right] = \left[\hat{x}, \hat{p} \frac{\hat{p}}{2M} \right] = [\hat{x}, \hat{p}] \frac{\hat{p}}{2M} + \frac{\hat{p}}{2M} [\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar \frac{\hat{p}}{2M} + \frac{\hat{p}}{2M} i\hbar = \frac{i\hbar \hat{p}}{M}$$

ב. נשתמש בתוצאה שנתקבלה בסעיף א' $[\hat{x}, \hat{H}] = \frac{M}{i\hbar} \hat{p}$:

$$\langle \varphi_m | \hat{p} | \varphi_n \rangle = \frac{M}{i\hbar} \langle \varphi_m | [\hat{x}, \hat{H}] | \varphi_n \rangle = \frac{M}{i\hbar} \langle \varphi_m | \hat{x} \hat{H} - \hat{H} \hat{x} | \varphi_n \rangle = \frac{M}{i\hbar} [\langle \varphi_m | \hat{x} \hat{H} | \varphi_n \rangle - \langle \varphi_m | \hat{H} \hat{x} | \varphi_n \rangle]$$

כיוון שהפונקציות $|\varphi_n\rangle$ עצמיות להמילטוניאן $\hat{H}|\varphi_n\rangle = E_n|\varphi_n\rangle$ נקבל כי :

$$\langle \varphi_m | \hat{p} | \varphi_n \rangle = \frac{M}{i\hbar} [\langle \varphi_m | \hat{x} \hat{H} | \varphi_n \rangle - \langle \varphi_m | \hat{H} \hat{x} | \varphi_n \rangle] = \frac{M}{i\hbar} [\langle \varphi_m | \hat{x} E_n | \varphi_n \rangle - \langle \varphi_m | E_m \hat{x} | \varphi_n \rangle] = \frac{M}{i\hbar} (E_n - E_m) \langle \varphi_m | \hat{x} | \varphi_n \rangle$$

על-כן הוכחנו את הזהות שנדרשה וקיבלנו כי : $\alpha_{nm} = \frac{M}{i\hbar} (E_n - E_m)$

ג. אנו נדרשים לחשב את האינטגרל הבא : $\frac{\hbar^2}{M^2} \langle \varphi_n | \hat{p}^2 | \varphi_n \rangle = \frac{\hbar^2}{M^2} \langle \varphi_n | \hat{p} \hat{p} | \varphi_n \rangle$

נשתמש בפריסה של אופרטור היחידה בבסיס הפונקציות העצמיות של ההמילטוניאן :

$$\hat{1} = \sum_m |\varphi_m\rangle \langle \varphi_m|$$

ונקבל כי :

$$\frac{\hbar^2}{M^2} \langle \varphi_n | \hat{p} \hat{p} | \varphi_n \rangle = \frac{\hbar^2}{M^2} \langle \varphi_n | \hat{p} \hat{1} \hat{p} | \varphi_n \rangle = \frac{\hbar^2}{M^2} \langle \varphi_n | \hat{p} \left(\sum_m |\varphi_m\rangle \langle \varphi_m| \right) \hat{p} | \varphi_n \rangle = \frac{\hbar^2}{M^2} \sum_m \langle \varphi_n | \hat{p} | \varphi_m \rangle \langle \varphi_m | \hat{p} | \varphi_n \rangle$$

נשתמש בביטוי שקיבלנו בסעיף ב' לפיו : $\langle \varphi_m | \hat{p} | \varphi_n \rangle = \frac{M}{i\hbar} (E_n - E_m) \langle \varphi_m | \hat{x} | \varphi_n \rangle$

ונקבל כי :

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

ולכן הוכחנו את הזהות הנדרשת :

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