

כימיה קוונטית תשי"ע - פתרון תרגיל 2

1. נמצא תחילה את הערכים העצמיים. לשם כך עלינו לפתור את המשוואה:

$$\det |\hat{L}_y - \lambda I| = 0$$

כלומר:

$$\det \begin{vmatrix} -\lambda & \frac{h}{i\sqrt{2}} & 0 \\ \frac{-h}{i\sqrt{2}} & -\lambda & \frac{h}{i\sqrt{2}} \\ 0 & \frac{-h}{i\sqrt{2}} & -\lambda \end{vmatrix} = 0$$

$\Downarrow$

$$-\lambda^3 - (-\lambda)\left(-\frac{h}{i\sqrt{2}}\right)\left(\frac{h}{i\sqrt{2}}\right) - (-\lambda)\left(-\frac{h}{i\sqrt{2}}\right)\left(\frac{h}{i\sqrt{2}}\right) = -\lambda^3 + \frac{\lambda h^2}{2} = \lambda(\lambda^2 - h^2) = 0$$

קיבלנו שלושה ערכים עצמיים אפשריים:

$$\lambda_1 = 0$$

$$\lambda_2 = h$$

$$\lambda_3 = -h$$

כעת נמצא את הוקטורים העצמיים. נציב את הערכים העצמיים שמצאנו במשוואה:

$$\sum_{j=1}^3 ((L_y)_{ij} - \lambda_{ij}) C_j = 0$$

עבור λ_1 :

$$\begin{cases} \frac{h}{i\sqrt{2}} C_2^{(1)} = 0 \Rightarrow C_2^{(1)} = 0 \\ -\frac{h}{i\sqrt{2}} C_1^{(1)} + \frac{h}{i\sqrt{2}} C_3^{(1)} = 0 \Rightarrow C_1^{(1)} = C_3^{(1)} \\ -\frac{h}{i\sqrt{2}} C_2^{(1)} = 0 \end{cases}$$

ממשוואות אלו ומתוך תנאי הנרמול נקבל את ערכי האלמנטים של C:

$$\sum_i |C_i^{(k)}|^2 = 1 \Rightarrow |C_1^{(1)}|^2 + |C_3^{(1)}|^2 = 2|C_1^{(1)}|^2 = 1$$

$$C_1^{(1)} = C_3^{(1)} = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

$$C^{(1)} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}$$

הפתרון עבור שני הערכים העצמיים הנוספים מתבצע באופן דומה:
עבור λ_2 :

$$\begin{cases} -hC_1^{(2)} + \frac{h}{i\sqrt{2}}C_2^{(2)} = 0 & C_2^{(2)} = i\sqrt{2}C_1^{(2)} \quad \square \\ -\frac{h}{i\sqrt{2}}C_1^{(2)} - hC_2^{(2)} + \frac{h}{i\sqrt{2}}C_3^{(2)} = 0 & C_1^{(2)} = -C_3^{(2)} \\ -\frac{h}{i\sqrt{2}}C_2^{(2)} - hC_3^{(2)} = 0 & C_2^{(2)} = -i\sqrt{2}C_3^{(2)} \quad \square \end{cases}$$

ומתוך תנאי הנרמול:

$$|C_1^{(2)}|^2 + |C_2^{(2)}|^2 + |C_3^{(2)}|^2 = |C_1^{(2)}|^2 + 2|C_1^{(2)}|^2 + |C_1^{(2)}|^2 = 4|C_1^{(2)}|^2 = 1$$

$$C_1^{(2)} = \frac{1}{2}$$

$$C^{(2)} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ \frac{-1}{i\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{2} \end{pmatrix}$$

עבור λ_3 :

$$\begin{cases} hC_1^{(3)} + \frac{h}{i\sqrt{2}}C_2^{(3)} = 0 & C_2^{(3)} = -i\sqrt{2}C_1^{(3)} \quad \square \\ -\frac{h}{i\sqrt{2}}C_1^{(3)} + hC_2^{(3)} + \frac{h}{i\sqrt{2}}C_3^{(3)} = 0 & C_1^{(3)} = -C_3^{(3)} \\ -\frac{h}{i\sqrt{2}}C_2^{(3)} + hC_3^{(3)} = 0 & C_2^{(3)} = i\sqrt{2}C_3^{(3)} \quad \square \end{cases}$$

ומתוך תנאי הנרמול:

$$|C_1^{(3)}|^2 + |C_2^{(3)}|^2 + |C_3^{(3)}|^2 = |C_1^{(3)}|^2 + 2|C_1^{(3)}|^2 + |C_1^{(3)}|^2 = 4|C_1^{(3)}|^2 = 1$$

$$C_1^{(3)} = \frac{1}{2}$$

$$C^{(3)} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ \frac{1}{i\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{2} \end{pmatrix}$$

2. נדרש למצוא את אי הודאות ΔL_z אם פונקצית הגל של אטום המימן היא:

$$2p_z$$

אי הודאות מוגדרת כ-

$$\Delta L_z = \sqrt{\langle (L_z - \langle L_z \rangle)^2 \rangle}$$

$$2p_z = 2p_0 = |210\rangle \text{ ידוע כי -}$$

$$L_z |nlm\rangle = m\hbar |nlm\rangle$$

$$\Downarrow$$

$$L_z |210\rangle = 0 \Rightarrow \langle L_z \rangle = 0 \quad (\langle L_z \rangle = \sum_i p_i L_{zi}),$$

$$\langle (L_z)^2 \rangle = 0$$

$$\Delta L_z = 0$$

בסופו של דבר מקבלים:

$$2p_x = \frac{2p_1 + 2p_{-1}}{\sqrt{2}} \quad \text{ב.}$$

$$L_z |211\rangle = \hbar, \quad L_z |21-1\rangle = -\hbar$$

$$\Downarrow$$

$$\langle L_z \rangle = 0, \quad \langle (L_z)^2 \rangle = \hbar^2$$

החישוב מבוצע באופן דומה:

$$\square L_z = \sqrt{\hbar^2} = \hbar$$

$$H = H^{(0)} + H^{(1)}$$

$$H^{(0)} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2$$

$$H^{(1)} = \frac{a}{2} m \omega^2 x^2 \quad a \ll 1$$

א. האנרגיה המדויקת:
מתוך פתרון של אוסצילטור הרמוני:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} (1+a) m \omega^2 x^2 = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m \Omega^2 x^2$$

$$\Omega^2 \equiv \omega^2 (1+a)$$

$$E_n^{\text{Exact}} = \hbar \Omega \left(n + \frac{1}{2} \right) = \hbar \omega \sqrt{1+a} \left(n + \frac{1}{2} \right)$$

ב. התיקון ההפרעתי לאנרגיה E_n עד סדר שני:

$$E'_n = E_n^{(0)} + E_n^{(1)} + E_n^{(2)}$$

$$E_n^{(0)} = \hbar \omega \left(n + \frac{1}{2} \right)$$

$$E_n^{(1)} = \langle \psi_n^{(0)} | H^{(1)} | \psi_n^{(0)} \rangle = \frac{a}{2} m \omega^2 \langle \psi_n^{(0)} | x^2 | \psi_n^{(0)} \rangle$$

$$\langle \psi_n^{(0)} | x^2 | \psi_k^{(0)} \rangle = \left(n + \frac{1}{2} \right) \frac{\hbar}{m \omega} \quad n = k$$

$\Downarrow$

$$E_n^{(1)} = \frac{a}{2} m \omega^2 \left(n + \frac{1}{2} \right) \frac{\hbar}{m \omega} = \frac{a}{2} \hbar \omega \left(n + \frac{1}{2} \right)$$

$$E_n^{(2)} = \sum_k \frac{\left| \langle \psi_k^{(0)} | H^{(1)} | \psi_n^{(0)} \rangle \right|^2}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} = \sum_k \frac{\frac{a^2}{4} m^2 \omega^4 \left| \langle \psi_k^{(0)} | x^2 | \psi_n^{(0)} \rangle \right|^2}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}$$

$$\langle \psi_n^{(0)} | x^2 | \psi_k^{(0)} \rangle = \begin{cases} (n + \frac{1}{2}) \frac{\hbar}{m\omega} & n = k \\ \frac{1}{2} \sqrt{(n+1)(n+2)} \frac{\hbar}{m\omega} & k = n+2 \\ \frac{1}{2} \sqrt{n(n-1)} \frac{\hbar}{m\omega} & k = n-2 \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}$$

↓

$$E_n^{(2)} = \frac{a^2}{4} m^2 \omega^4 \left\{ \frac{\left| \langle \psi_{n-2}^{(0)} | H^{(1)} | \psi_n^{(0)} \rangle \right|^2}{E_n^{(0)} - E_{n-2}^{(0)}} + \frac{\left| \langle \psi_{n+2}^{(0)} | H^{(1)} | \psi_n^{(0)} \rangle \right|^2}{E_n^{(0)} - E_{n+2}^{(0)}} \right\} =$$

$$= \frac{a^2}{4} m^2 \omega^4 \left\{ \frac{\frac{1}{4} n(n-1) \left(\frac{\hbar}{m\omega} \right)^2}{2\hbar\omega} + \frac{\frac{1}{4} (n+1)(n+2) \left(\frac{\hbar}{m\omega} \right)^2}{-2\hbar\omega} \right\} =$$

$$= \frac{a^2}{32} \hbar\omega \{ n(n-1) - (n+1)(n+2) \} = -\frac{a^2}{8} \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right)$$

$$E'_n = E_n^{(0)} + E_n^{(1)} + E_n^{(2)} = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) + \frac{a}{2} \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) - \frac{a^2}{8} \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \left(1 + \frac{a}{2} - \frac{a^2}{8} \right)$$

אם נפתח את הביטוי המדויק של האנרגיה שקיבלנו בסעיף א' בטור טיילור:

$$E_n \cong \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \left(1 + \frac{a}{2} - \frac{a^2}{8} + \frac{a^3}{16} + \dots \right)$$

כאשר נזניח את כל האיברים עם $n > 2$, נקבל את הביטוי עד הסדר השני בהפרעה (שקיבלנו בסעיף ב').