

כימיה קוונטית תשי"ע - פתרון תרגיל 3

1.

א. אם נסתכל על V_1 לבדו, נוכל לראות כי הוא מתאר חלקיק חופשי בקופסא דו מימדית. אנחנו יכולים להפריד בין המשתנים x ו- y , כך ש-

$$\hat{H} = H(x) + H(y)$$

$$\psi = \psi(x) \cdot \psi(y)$$

$$E = E(x) + E(y)$$

אנחנו יודעים את הפתרון לבעיית חלקיק בקופסא חד-מימדית:

$$\psi(x) = \left(\frac{2}{a}\right)^{\frac{1}{2}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \quad E_n = \frac{n^2 \hbar^2 \pi^2}{2ma^2}$$

עבור מקרה דו מימדי, פונקצית הגל והאנרגיה תהיינה:

$$\psi(x, y) = \psi(x)\psi(y) = \left(\frac{2}{a}\right) \sin\left(\frac{n_x \pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{n_y \pi y}{a}\right)$$

$$E_{n_x, n_y} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} (n_x^2 + n_y^2)$$

פונקצית הגל של מצב היסוד ($n_x = n_y = 1$) ללא הפרעה:

$$\psi_g(x, y) = \psi_{11} = \left(\frac{2}{a}\right) \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{\pi y}{a}\right)$$

התיקון לאנרגיה מסדר ראשון:

$$\begin{aligned} E_g^{(1)} &= \langle \psi_{11} | V_2 | \psi_{11} \rangle = \int \psi_{11}^* V_2 \psi_{11} d\tau = \int_0^{\frac{a}{2}} dx \int_0^{\frac{a}{2}} dy \left(\frac{4\lambda}{a^2} \sin^2\left(\frac{\pi x}{a}\right) \sin^2\left(\frac{\pi y}{a}\right) \right) = \\ &= \left(\int_0^{\frac{a}{2}} \sin^2(bx) dx \right) \left(\int_0^{\frac{a}{2}} \sin^2(by) dy \right) = \frac{\lambda}{4} \end{aligned}$$

ב. במצב המעורר הראשון ($(n_x = 1, n_y = 2)$ או $(n_x = 2, n_y = 1)$) קיים ניוון, ז"א יש

לנו שתי פונקציות המתאימות לאותה אנרגיה עצמית:

$$\psi_{12} = \left(\frac{2}{a}\right) \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{2\pi y}{a}\right)$$

$$\psi_{21} = \left(\frac{2}{a}\right) \sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{\pi y}{a}\right)$$

$$E_{21} = E_{12} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} (n_x^2 + n_y^2) = \frac{5\hbar^2 \pi^2}{2ma^2}$$

לכן בכדי למצוא את האנרגיות והפונקציות עלינו לפתור את המשוואה הסקולרית:

$$\det \left(\left\langle \psi_m^{(0)} \right| V_2 \left| \psi_i^{(0)} \right\rangle - E_n^{(1)} \delta_{mi} \right) = 0$$

$$\begin{vmatrix} H_{11} - E'_{1,2} & H_{12} \\ H_{21} & H_{22} - E'_{1,2} \end{vmatrix} = 0$$

נחשב את האינטגרלים:

$$H_{11} = \langle \psi_{12} | V_2 | \psi_{12} \rangle \quad ; \quad H_{22} = \langle \psi_{21} | V_2 | \psi_{21} \rangle$$

$$H_{12} = \langle \psi_{12} | V_2 | \psi_{21} \rangle \quad ; \quad H_{21} = \langle \psi_{21} | V_2 | \psi_{12} \rangle$$

$$H_{11} = H_{22} = \int_0^{\frac{a}{2}} dx \int_0^{\frac{a}{2}} dy \left(\frac{4\lambda}{a^2} \sin^2 \left(\frac{2\pi x}{a} \right) \sin^2 \left(\frac{\pi y}{a} \right) \right) = \frac{\lambda}{4}$$

$$H_{12} = H_{21} = \frac{4\lambda}{a^2} \int_0^{\frac{a}{2}} \sin \left(\frac{\pi x}{a} \right) \sin \left(\frac{2\pi x}{a} \right) dx \int_0^{\frac{a}{2}} \sin \left(\frac{\pi y}{a} \right) \sin \left(\frac{2\pi y}{a} \right) dy = \frac{16\lambda}{9\pi^2}$$

כדי שהדטרמיננטה תתאפס, על $E'_{1,2}$ להיות:

$$E'_{1,2} = \frac{\lambda}{4} \pm \frac{16\lambda}{9\pi^2}$$

כדי למצוא את פונקציות הגל עבור $\lambda \rightarrow 0$, נשתמש באנרגיה שקיבלנו.

$$\frac{-16\lambda c_1}{9\pi^2} + \frac{16\lambda c_2}{9\pi^2} = 0 \quad \Rightarrow \quad c_1 = c_2 \quad \text{עבור } E'_1$$

$$\frac{16\lambda c_1}{9\pi^2} + \frac{16\lambda c_2}{9\pi^2} = 0 \quad \Rightarrow \quad c_1 = -c_2 \quad \text{עבור } E'_2$$

$$E_1 \Rightarrow \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \quad ; \quad E_2 \Rightarrow \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \quad \text{מתוך נירמול:}$$

$$\begin{cases} \varphi_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_{12} + \psi_{21}) \\ \varphi_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_{12} - \psi_{21}) \end{cases}$$

$\Downarrow$

for $\lambda \rightarrow 0$

$$\begin{cases} \varphi_1 \rightarrow \frac{\sqrt{2}}{a} \left(\sin \left(\frac{2\pi x}{a} \right) \sin \left(\frac{\pi y}{a} \right) + \sin \left(\frac{\pi x}{a} \right) \sin \left(\frac{2\pi y}{a} \right) \right) \\ \varphi_2 \rightarrow \frac{\sqrt{2}}{a} \left(\sin \left(\frac{2\pi x}{a} \right) \sin \left(\frac{\pi y}{a} \right) - \sin \left(\frac{\pi x}{a} \right) \sin \left(\frac{2\pi y}{a} \right) \right) \end{cases}$$

2. ראשית נרשום את כל המצבים ברמה $n=3$:

$$l=0 \Rightarrow m=0$$

$$l=1 \Rightarrow m=0, \quad m=\pm 1$$

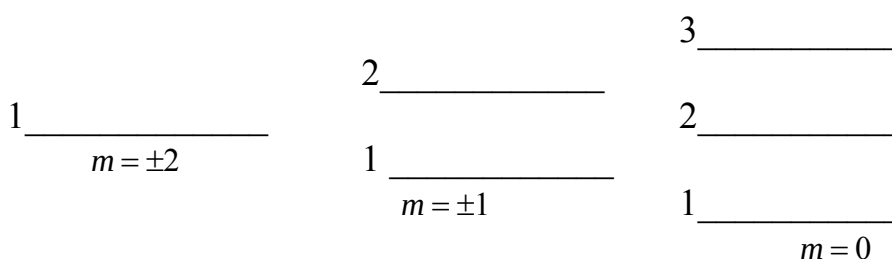
$$l=2 \Rightarrow m=0, \quad m=\pm 1, \quad m=\pm 2$$

(א). הרמות $m=\pm 2$ אינן מנוונות לפי l , ולכן אין להן תוספת אנרגיה כתוצאה מהשפעת השדה החשמלי באפקט שטרק לינארי.

(ב). לרמות $m=\pm 1$ קיים ניוון מסדר 2, ולכן הרמות האלה מתפצלות לשתי רמות חדשות.

(ג). לרמה $m=0$ קיים ניוון מסדר 3, ולכן כתוצאה מהפעלת השדה נקבל 3 רמות חדשות.

בצורה גראפית:



הערה: יתכן שעבור מקרה מסוים נקבל פחות רמות, למשל הרמה השנייה של $m=0$ יכולה להיות באותה אנרגיה כמו הרמה $m=\pm 2$ (כמו בציור).

3. $\{\psi_i\}$ הינם מצבים עצמיים של H ולכן הם מהווים בסיס שלם. נפרוס את φ ע"י $\{\psi_i\}$:

$$\varphi = \sum_{i=0}^{\infty} c_i \psi_i$$

כיוון שמקדמי הפריסה הינם:

$$c_i = \langle \varphi | \psi_i \rangle$$

ונתון כי:

$$\langle \varphi | \psi_i \rangle = 0 \quad i = 0, 1, \dots, n-1$$

$$\Downarrow$$

$$c_i = 0 \quad i = 0, 1, \dots, n-1$$

מתקבל בסוף:

$$\varphi = \sum_{i=n}^{\infty} c_i \psi_i$$

האנרגיה תהיה:

$$E(\varphi) = \frac{\langle \varphi | H | \varphi \rangle}{\langle \varphi | \varphi \rangle} = \frac{\sum_{j,i=n}^{\infty} \langle c_i \psi_i | H | c_j \psi_j \rangle}{\sum_{j,i=n}^{\infty} c_i^* c_j \langle \psi_i | \psi_j \rangle}$$

$$H\psi_i = E_i\psi_i$$

$$\Downarrow$$

$$E(\varphi) = \frac{\sum_{j,i}^{\infty} c_i^* c_j E_j \langle \psi_i | \psi_j \rangle}{\sum_{j,i}^{\infty} c_i^* c_j \langle \psi_i | \psi_j \rangle} = \frac{\sum_{j,i}^{\infty} c_i^* c_j E_j \delta_{ij}}{\sum_{j,i}^{\infty} c_i^* c_j \delta_{ij}} = \frac{\sum_{i=n}^{\infty} |c_i|^2 E_i}{\sum_{i=n}^{\infty} |c_i|^2} \geq \frac{\sum_{i=n}^{\infty} |c_i|^2 E_n}{\sum_{i=n}^{\infty} |c_i|^2} = E_n$$

כיוון ש:

$$E_i \geq E_n \quad \text{for all} \quad i \geq n$$