האוניברסיטה העברית בירושלים
THE HEBREW UNIVERSITY OF JERUSALEM

קוונטים 2, 77605 - תרגיל נומרי

24.11.2021

עבור כיול סימטרי, ההמילטוניאן של אטום מימן בשדה מגנטי, בהתעלם מהספין של האלקטרון, נתון על-ידי

$$H=\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m_e}+\frac{1}{2}\omega L_z+\frac{1}{8}m_e\omega^2(x^2+y^2)-\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

כאשר $\omega=eB_0/m_e$. על-ידי מעבר למשתנים חסרי יחידות ניתן לרשום

$$\left[-\frac{1}{2}\nabla^2+\frac{1}{2}\gamma L_z+\frac{\gamma^2}{8}r^2\sin^2\theta-\frac{1}{r}\right]\Psi=\epsilon\Psi$$

כדי לחשב את רמות האנרגיה של הבעיה נשתמש בבסיס דומה (אך לא זהה) לאטום המימן

$$\Psi=\sum_{n,l}c_{nl}R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta,\phi)$$

כאשר

$$R_{nl}(r)=\sqrt{\left(\frac{2}{a_0}\right)^3\frac{(n-l-1)!}{(n+l+1)!}}\rho^l L_{n-l-1}^{2l+2}(\rho)e^{-\rho/2}\qquad \rho=2r/a_0$$

ו- L_n^k הם פולינומי Laguerre. נשים לב כי m הוא מספר קוונטי טוב אך במקרה של $\gamma\neq 0$ l אינו מספר קוונטי טוב. כדי לפשט את החישובים שלנו נניח כי $m=0$ ונבחר $a_0=1$. את מקדמי הפיתוח c_{nl} נמצא על-ידי פיתרון נומרי של בעיית הערך העצמי

$$\sum_{n'l'}H_{nl,n'l'}c_{n'l'}=E\,c_{nl}$$

כאשר $H_{nl,n'l'}$ הם אלמנטי המטריצה של ההמילטוניאן אותם נכתוב כסכום של שלשה איברים: אנרגיה קינטית T, אינטראקציה קולומבית C ותרומה מגנטית B. לשם נוחות נרשום

$$H_{nl,n'l'}=T_{nl,n'l'}+C_{nl,n'l'}+\frac{\gamma^2}{8}B_{nl,n'l'}$$

את אלמנטי המטריצה נחשב על-ידי שילוב של עבודה אנליטית ונומרית. את החלק הזויתי נחשב באופן אנליטי ואת האינטגרלים הרדיאליים באופן נומרי בשיטה הנקראת Gauss quadrature. בשיטה זו אנו מקרבים את אינטגרל על תחום סופי על-ידי העתקה לתחום $[-1,1]$ וחישוב הסכום

$$\int_{-1}^{1}dx\,f(x)=\sum_{i=1}^{N}w_i f(x_i)$$

כאשר הנקודות הן האפסים של פולינום לג'נדר מדרגה N. והמשקלות מחושבים כך שאינטגרל עבור כל מונום x^n מדרגה $n<N$ יהיה מדויק. באופן זה ניתן להבטיח שהאינטגרל יהיה מדויק עבור כל פולינום מדרגה $n<2N-1$. עבור אינטגרל מהסוג

$$\int_0^{\infty}dx e^{-x}f(x)=\sum_{i=1}^{N}w_i f(x_i)$$

ניתן להשתמש באופן דומה בפולינומי Laguerre. נציין כי חבילות אינטגרציה בשיטה זו נמצאות ב- python וב- Matlab.

מטלות

1. השתמשו באינטגרציה בשיטת Gauss quadrature גאוסית כדי להראות כי

$$\int r^2 dr R_{nl}(r) R_{ml}(r) = \delta_{mn}$$

בדקו התכנסות של האינטגרל עם מספר נקודות החישוב.

2. חשבו את הפונקצייה dR_{nl}/dr על-ידי הקשר

$$\frac{dL_n^k(x)}{dx} = -L_{n-1}^{k+1}(x)$$

השתמשו בתוצאה זו וכתבו שגרה המעריכה את האנרגיה הקינטית על-ידי חישוב נומרי של האינטגרל

$$T_{nl,n'l'} = \delta_{l,l'} \left[\frac{1}{2} \int r^2 dr \frac{dR_{nl}}{dr} \frac{dR_{n'l}}{dr} + \frac{l(l+1)}{2} \int dr R_{nl}(r) R_{n'l}(r) \right]$$

3. כתבו שגרה המעריכה באופן נומרי את אלמנטי המטריצה של הפוטנציאל החשמלי

$$C_{nl,n'l'} = -\delta_{l,l'} \int r^2 dr R_{nl}(r) \frac{1}{r} R_{ml}(r)$$

4. עבור $l = 0$ השתמשו ב- $N = 20$ פונקציות בסיס וחשבו ההמילטוניאן H. לכסנו את המטריצה שקבלתם ורשמו את האנרגיות. השוו לספקטרום הידוע של המימן.

כעת נחשב את השפעת השדה המגנטי על מצבי $m = 0$. לשם כך נרשום את אלמנט המטריצה

$$\begin{aligned} B_{nl,n'l'} &= \int r^2 dr d\Omega \, R_{nl}(r) Y_{l0}^*(\theta,\phi) \, r^2 \sin^2\theta R_{n'l'}(r) Y_{l'0}(\theta,\phi) \\ &= I_{l'l} W_{nl,n'l'} \end{aligned}$$

כאשר

$$W_{nl,n'l'} = \int dr R_{nl}(r) \, r^4 R_{n'l'}(r)$$

$$I_{l'l} = \langle l0 | \sin^2\theta | l'0 \rangle = 2\pi \int \sin\theta d\theta Y_{l0}^*(\theta,0) \, \sin^2\theta Y_{l'0}(\theta,0)$$

5. כדי לחשב את האינטגרל הזויתי, ניזכר כי

$$Y_{l0} = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} P_l(\cos\theta)$$

כעת הציבו $x = \cos\theta$, השתמשו ביחס

$$(2l+1) x P_l = (l+1) P_{l+1} + l P_{l-1}$$

וביחס האורתוגונליות

$$\int dx P_l(x) P_{l'}(x) = \delta_{l'l} \frac{2}{2l+1}$$

וקבלו נוסחא אנליטית עבור $I_{l'l}$.

6. כתבו שגרה המחשבת את $W_{nl,n'l'}$ באופן נומרי, את $I_{l'l}$ באופן אנליטי ומחזירה את אלמנט המטריצה $B_{nl,n'l'}$.

7. כדי לשמור את ההמילטוניאן כמטריצה דו-ממדית $H_{i,i'}$ ולא 4 ממדית $H_{nl,n'l'}$ יש ליצור מיפוי $i \to n,l$. לשם כך רשמו את כל ערכי n,l האפשריים עבור $n \le n_{max} = 12$.

8. עבור עוצמת שדה מגנטי בתחום $0 \le \gamma \le 2$ חשבו וציירו את השתנות 3 רמות האנרגיה התחתונות בספקטרום של אטום המימן עם γ עבור $n_{max} = 12$. עבור γ השתמשו בכ-20 נקודות.

9. השוו את התוצאות עם פיתוח של תורת הפרעות מסדר ראשון.

10. עבור $\gamma = 2$ ציירו את התכנסות 3 רמות האנרגיה התחתונות כפונקצייה של n בתחום $1 \le n \le n_{max}$.