קוונטים 2 – תרגול 6
חלקיקים זהים ושיטת הוריאציה

מתרגל: זמיר הלר-אלגזי

תוכן העניינים

1 חלקיקים זהים **2**

2 שיטת הוריאציה **8**

1 חלקיקים זהים

המילטוניאן של מערכת עם N חלקיקים זהים הוא סימטרי תחת החלפת חלקיקים $i \leftrightarrow j$:

$$H=\sum_{i=1}^{N}\frac{\mathbf{p}_i^2}{2m}+V\left(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2,\ldots,\mathbf{r}_N\right)\underset{i\leftrightarrow j}{\longrightarrow}H \tag{1.1}$$

האופרטור המחליף בין חלקיק i וחלקיק j מסומן ב-P_{ij}.

- עבור חלקיקים זהים $[H,P_{ij}]=0$ $\Longleftarrow$ ניוון מצבים במערכת.
- החלפה פעמיים לא משנה דבר לכן $P_{ij}^2=1$, והע"ע הם ± 1.

עבור שני חלקיקים (ללא ספין) היכולים להימצא באחד משני המצבים $|a\rangle$ או $|b\rangle$ פונקצית הגל היא סופרפוזיציה סימטרית או אנטי-סימטרית:

$$\begin{aligned}\Psi_{\pm}\left(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2\right)&=A\left[\psi_a\left(\mathbf{r}_1\right)\psi_b\left(\mathbf{r}_2\right)\pm\psi_a\left(\mathbf{r}_2\right)\psi_b\left(\mathbf{r}_1\right)\right]\\ \left|\Psi_{\pm}\right\rangle&=A\left(|a,b\rangle\pm|b,a\rangle\right)\end{aligned} \tag{1.2}$$

זאת להבדיל מחלקיקים מובחנים עבורם $|\Psi\rangle=|a\rangle\otimes|b\rangle$. כש-$\langle a|b\rangle=0$ אז $A=1/\sqrt{2}$, אבל אם יש חפיפה בין המצבים זה כבר לא נכון.

הזוגיות של Ψ תקבע לפי סוג החלקיקים **(משפט ספין-סטטיסטיקה)**:

- Ψ_+: סימטרית תחת החלפת חלקיקים – **בוזונים** (ספין שלם).
- Ψ_-: אנטי-סימטרית תחת החלפת חלקיקים – **פרמיונים** (ספין חצי-שלם).

עבור N פרמיונים (ללא אינטראקציה) המתחלקים בין $\{|a_i\rangle\}_{i=1}^{N}$ מצבים קוונטים שונים, פונקצית גל אנטי-סימטרית מתקבלת ע"י שימוש ב**דטרמיננת סלייטר** (Slater)

$$\Psi\left(\mathbf{r}_1,\ldots,\mathbf{r}_N\right)=\frac{1}{\sqrt{N!}}\begin{vmatrix}\psi_{a_1}\left(\mathbf{r}_1\right)&\cdots&\psi_{a_1}\left(\mathbf{r}_N\right)\\ \vdots&\ddots&\vdots\\ \psi_{a_N}\left(\mathbf{r}_1\right)&\cdots&\psi_{a_N}\left(\mathbf{r}_N\right)\end{vmatrix} \tag{1.3}$$

כאשר יש *ספין* בבעיה, עלינו לדאוג שפונקצית הגל *הכוללת*

$$|\Psi\rangle=|\psi\rangle\otimes|\chi\rangle \tag{1.4}$$

תהיה סימטרית או אנטי-סימטרית בהתאם לסוג החלקיק, כאשר $|\psi\rangle$ החלק המרחבי של פונקצית הגל ו-$|\chi\rangle$ במרחב הספין.

תרגיל 1

שני פרמיונים (נסמנם ב-a וב-b) בעלי ספין $\frac{1}{2}$ נמצאים בבור פוטנציאל חד-מימדי אינסופי ברוחב L.

התעלמו מספין:

א. מהי פונקצית הגל של המערכת במצב היסוד? מהי אנרגית היסוד?

ב. מהו המצב המעורר הראשון? מהי האנרגיה שלו?

כעת התחשבו בספין:

ג. מהי פונקצית הגל של המערכת במצב היסוד? מהי אנרגית היסוד?

ד. מהו המצב המעורר הראשון? מהי האנרגיה שלו?

א. ההמילטוניאן של המערכת הוא

$$H=\frac{p_a^2}{2m}+\frac{p_b^2}{2m}+\begin{cases}0 & x_i\in[0,L]\\ \infty & \text{otherwise}\end{cases} \tag{1.5}$$

הפתרונות החד-חלקיקיים של בור פוטנציאל אינסופי הם

$$\psi_n\left(x\right)=\sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right),\qquad E_n=\frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}n^2\qquad\left(n=1,2,\ldots\right) \tag{1.6}$$

אנחנו רוצים לאכלס כמה שיותר חלקיקים ברמות האנרגיה הכי נמוכות, אבל עקרון האיסור של פאולי אוסר על שני פרמיונים לאכלס אותו מצב קוונטי $|1\rangle\otimes|1\rangle$. לכן במצב היסוד חלקיק אחד ב-$n=1$ והשני ב-$n=2$ ופונקצית הגל היא

$$\boxed{\Psi_{\text{GS}}\left(x_a,x_b\right)=\frac{1}{\sqrt{2}}\left[\psi_1\left(x_a\right)\psi_2\left(x_b\right)-\psi_1\left(x_b\right)\psi_2\left(x_a\right)\right]} \tag{1.7}$$

כי $\langle 1|2\rangle=0$, והאנרגיה של מצב היסוד היא

$$\boxed{E_{\text{GS}}=E_1+E_2=\frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}1^2+\frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}2^2=\frac{5\pi^2\hbar^2}{2mL^2}} \tag{1.8}$$

ב. במצב המעורר הראשון נדחוף חלקיק אחד ל-$n=3$ ונשאיר את השני ב-$n=1$:

$$\boxed{\begin{aligned}\Psi_{\text{E}}\left(x_a,x_b\right)&=\frac{1}{\sqrt{2}}\left[\psi_1\left(x_a\right)\psi_3\left(x_b\right)-\psi_1\left(x_b\right)\psi_3\left(x_a\right)\right]\\ E_{\text{E}}=E_1+E_3&=\frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}1^2+\frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}3^2=5\frac{\pi^2\hbar^2}{mL^2}\end{aligned}} \tag{1.9}$$

ג. נסמן $|n_a\rangle\otimes|n_b\rangle\equiv|n_a,n_b\rangle$. הפעם שני החלקיקים יכולים לאכלס את מצב היסוד בלי להפר את עקרון האיסור של פאולי, הוא

$$|\psi\rangle=|1,1\rangle \tag{1.10}$$

זה כמובן סימטרי תחת החלפת חלקיקים, ולכן מצב הספין של החלקיקים חייב להיות אנטי-סימטרי:

$$|\chi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle\right) \tag{1.11}$$

זה בדיוק מצב הסינגלט $|S=0, M=0\rangle$. מצב היסוד הרב-חלקיקי הוא לכן

$$\boxed{|\Psi_{\mathrm{GS}}\rangle = |\psi\rangle \otimes |\chi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|1,1\rangle \otimes \left(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle\right) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|1,1;\uparrow\downarrow\rangle - |1,1;\downarrow\uparrow\rangle\right)} \tag{1.12}$$

והאנרגיה היא

$$\boxed{E_{\mathrm{GS}} = 2E_1 = 2\frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}1^2 = \frac{\pi^2\hbar^2}{mL^2}} \tag{1.13}$$

ד. במצב המעורר הראשון אחד החלקיקים ב-$n=1$ ואילו השני ב-$n=2$. האנרגיה היא

$$\boxed{E_{\mathrm{E}} = E_1 + E_2 = \frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}1^2 + \frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}2^2 = \frac{5\pi^2\hbar^2}{2mL^2}} \tag{1.14}$$

אפשר ליצור קומבינציות של $|1\rangle$ ו-$|2\rangle$ שהן סימטריות ואנטי-סימטריות במרחב, רק צריך לבחור את הזוגיות של מצב הספין בהתאם:

$$|\psi_+\rangle \otimes |\chi_-\rangle \qquad \text{or} \qquad |\psi_-\rangle \otimes |\chi_+\rangle \tag{1.15}$$

אנחנו כבר יודעים ש-$|\chi_-\rangle$ זה מצב הסינגלט, ולכן זה

$$\left|\Psi^1_{\mathrm{E}}\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|1,2\rangle + |2,1\rangle\right) \otimes |S=0, M=0\rangle \tag{1.16}$$

ואנחנו יודעים ש-$|\chi_+\rangle$ יכול להיות כל אחד משלושת מצבי הטריפלט $|S=1, M\rangle$:

$$|S=1,M\rangle = \begin{cases} |1,1\rangle = |\uparrow\uparrow\rangle \\ |1,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle\right) \\ |1,-1\rangle = |\downarrow\downarrow\rangle \end{cases} \tag{1.17}$$

ולכן זה

$$\left|\Psi^2_{E}\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|1,2\rangle - |2,1\rangle\right) \otimes |S=1, M\rangle \tag{1.18}$$

למצב המעורר הראשון ניוון 4, שנובע מהסימטריה להחלפת החלקיקים בבעיה.

תרגיל 2

נתונים זוג חלקיקים חופשיים זהים בעלי מסה m הנעים במימד אחד. חלקיק אחד ממוקם סביב $x=a$ ופונקצית הגל שלו היא

$$\psi_+(x)=\left(\frac{\beta}{\pi}\right)^{1/4}e^{-\frac{\beta}{2}(x-a)^2} \tag{1.19}$$

וחלקיק אחר ממוקם סביב $x=-a$ ופונקצית הגל שלו היא

$$\psi_-(x)=\left(\frac{\beta}{\pi}\right)^{1/4}e^{-\frac{\beta}{2}(x+a)^2} \tag{1.20}$$

א. מהו התנאי על β כך שנוכל לומר שהחלקיקים מופרדים במרחב?

ב. חשבו פעם אחת עבור פרמיונים ופעם אחת עבור בוזונים:

(1) מהי פונקצית הגל הרב-חלקיקית של המערכת?

(2) חשבו את האנרגיה של המערכת $E(a)$, ואת הכוח האפקטיבי $F=-\frac{\partial E}{\partial a}$ הפועל בין שני החלקיקים. האם החלקיקים נמשכים או נדחים זה מזה?

א. החלקיקים מופרדים במרחב אם החפיפה בין פונקציות הגל שלהן קטנה. זה קורה אם החלקיקים מאוד רחוקים זה מזה $(a\to\infty)$ או שהגאוסיאן מאוד צר $(\Delta x\to 0)$. נזהה:

$$|\psi_\pm|^2\sim e^{-\beta(x\pm a)^2}\sim e^{(x-\mu)^2/2\Delta x^2}\implies \Delta x=\frac{1}{\sqrt{2\beta}} \tag{1.21}$$

אם הגאוסיאן צר אז $\Delta x\ll a$ ולכן $\beta a^2\gg 1$.

ב. פונקצית הגל הרב-חלקיקית היא

$$\begin{aligned}\Psi_\pm(x_1,x_2)&=A\left[\psi_+(x_1)\psi_-(x_2)\pm\psi_+(x_2)\psi_-(x_1)\right]\\ |\Psi_\pm\rangle&=A\left(|+,-\rangle\pm|-,+\rangle\right)\end{aligned} \tag{1.22}$$

סימן ה-$(+)$ הוא עבור בוזונים וסימן ה-$(-)$ הוא עבור פרמיונים. נותר לנו רק למצוא את A מדרישת הנרמול:

$$\begin{aligned}1=\langle\Psi|\Psi\rangle&=A^2\left(\langle+,-|\pm\langle-,+|\right)\left(|+,-\rangle\pm|-,+\rangle\right)\\&=A^2\left(\langle+,-|+,-\rangle+\langle-,+|-,+\rangle\pm\langle+,-|-,+\rangle\pm\langle-,+|+,-\rangle\right)\\&=A^2\left(2\langle+|+\rangle\langle-|-\rangle\pm2\langle+|-\rangle\langle-|-\rangle\right)\\&=2A^2\left(1\pm|I|^2\right)\end{aligned} \tag{1.23}$$

כאשר $\langle+|-\rangle\equiv I$ החפיפה בין פונקציות הגל. במקרה הזה $I=I^*$ כי פונקציות הגל ממשיות. נחשב:

$$\begin{aligned}I=\langle+|-\rangle&=\int_{-\infty}^{\infty}\psi_+^*(x)\psi_-(x)\,\mathrm{d}x=\sqrt{\frac{\beta}{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-\frac{\beta}{2}(x-a)^2}e^{-\frac{\beta}{2}(x+a)^2}\,\mathrm{d}x\\&=e^{-\beta a^2}\sqrt{\frac{\beta}{\pi}}\underbrace{\int_{-\infty}^{\infty}e^{-\beta x^2}\,\mathrm{d}x}_{\sqrt{\pi/\beta}}=e^{-\beta a^2}\end{aligned} \tag{1.24}$$

אכן כאשר $\beta a^2 \gg 1$ אז $I \to 0$. לכן

$$A = \frac{1}{\sqrt{2\left(1 \pm I^2\right)}} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(1 \pm e^{-2\beta a^2}\right)^{-1/2} \tag{1.25}$$

אם הפונקציות אורתוגונליות אין חפיפה ו-$A = 1/\sqrt{2}$ כצפוי. בסה"כ קיבלנו

$$\boxed{\Psi_{\pm}\left(x_1, x_2\right) = \frac{1}{\sqrt{2\left(1 \pm e^{-2\beta a^2}\right)}}\left[\psi_{+}\left(x_1\right)\psi_{-}\left(x_2\right) \pm \psi_{+}\left(x_2\right)\psi_{-}\left(x_1\right)\right]} \tag{1.26}$$

נעבור לחישוב האנרגיה; ההמילטוניאן של שני החלקיקים הוא

$$H = \frac{p_1^2}{2m} + \frac{p_2^2}{2m} \tag{1.27}$$

אז האנרגיה הכוללת היא

$$\begin{aligned}
E_{\pm} =\ & \langle\Psi_{\pm}|H|\Psi_{\pm}\rangle = A^2\left(\langle +,-| \pm \langle -,+|\right)\left[\frac{p_1^2}{2m} + \frac{p_2^2}{2m}\right]\left(|+,-\rangle \pm |-,+\rangle\right) \\
=\ & \frac{A^2}{2m}\left[\ \langle +,-|p_1^2|+,-\rangle + \langle -,+|p_1^2|-,+\rangle \pm \langle +,-|p_1^2|-,+\rangle \pm \langle -,+|p_1^2|+,-\rangle\right. \\
& \left. + \langle +,-|p_2^2|+,-\rangle + \langle -,+|p_2^2|-,+\rangle \pm \langle +,-|p_2^2|-,+\rangle \pm \langle -,+|p_2^2|+,-\rangle\right] \\
=\ & \frac{A^2}{2m}\left[\ \langle +|p_1^2|+\rangle\langle -|-\rangle + \langle -|p_1^2|-\rangle\langle +|+\rangle \pm \langle +|p_1^2|-\rangle\langle -|+\rangle \pm \langle -|p_1^2|+\rangle\langle +|-\rangle\right. \\
& \left. + \langle -|p_2^2|-\rangle\langle +|+\rangle + \langle +|p_2^2|+\rangle\langle -|-\rangle \pm \langle -|p_2^2|+\rangle\langle +|-\rangle \pm \langle +|p_2^2|-\rangle\langle -|+\rangle\right] \\
=\ & A^2\left[4\mathcal{E}_k \pm 4I\Gamma\right]
\end{aligned} \tag{1.28}$$

כאשר $\mathcal{E}_k$ זו האנרגיה הקינטית של פונקצית הגל $\psi_{\pm}$, שכדי לחשב אותה נזכר שגאוסיינים משרים את א"ש הייזנברג $\Delta x \Delta p = \hbar/2$:

$$\mathcal{E}_k \equiv \frac{\langle \pm|p^2|\pm\rangle}{2m} = \frac{\Delta p^2}{2m} = \frac{1}{2m}\cdot\frac{\hbar^2}{4\Delta x^2} = \frac{\hbar^2\beta}{4m} \tag{1.29}$$

כי $\langle p\rangle = 0$ כש-$\psi_{\pm}$ ממשי. האיבר הנוסף שאנחנו מקבלים הוא מהחפיפה:

$$\begin{aligned}
\Gamma \equiv \frac{\langle \pm|p^2|\mp\rangle}{2m} &= -\frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\infty}^{\infty}\psi_{\pm}^{*}(x)\,\psi_{\mp}''(x)\,\mathrm{d}x = \frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\infty}^{\infty}\psi_{\pm}^{*\prime}(x)\,\psi_{\mp}'(x)\,\mathrm{d}x \\
&= \frac{\hbar^2\beta}{4m}\left(1 - 2\beta a^2\right)e^{-\beta a^2}
\end{aligned} \tag{1.30}$$

בסה"כ קיבלנו:

$$\boxed{E_{\pm} = \frac{\hbar^2\beta}{2m}\cdot\frac{1 \pm e^{-2\beta a^2}\left(1 - 2\beta a^2\right)}{1 \pm e^{-2\beta a^2}}} \tag{1.31}$$

הכוח האפקטיבי עבור פרמיונים הוא

$$F_{-} = -\frac{\partial E_{-}}{\partial a} = \frac{2\hbar^2\beta^2 a}{m}\cdot\frac{e^{-2\beta a^2} + 2\beta a^2 - 1}{\left(1 - e^{-2\beta a^2}\right)^2}e^{-2\beta a^2} \tag{1.32}$$

המונה בשבר תמיד חיובי ולכן הכוח האפקטיבי תמיד חיובי. לכן יש דחייה אפקטיבית בין הפרמיונים.
הכוח האפקטיבי עבור בוזונים הוא

$$F_+ = -\frac{\partial E_+}{\partial a} = \frac{2\hbar^2\beta^2 a}{m} \cdot \frac{e^{-2\beta a^2} - 2\beta a^2 - 1}{\left(1 + e^{-2\beta a^2}\right)^2} e^{-2\beta a^2} \tag{1.33}$$

כאשר החלקיקים מופרדים היטב ו-$\beta a^2 \gg 1$ אז הכוח האפקטיבי שלילי ונקבל משיכה אפקטיבית. דחייה תתקבל רק עבור תחום מאוד קטן.

2 שיטת הוריאציה

זו שיטה למציאת חסם עליון על אנרגית מצב היסוד של המילטוניאן H כלשהו כאשר קשה לפתור את המערכת במדויק.

נניח של-H יש מ"ע $|\phi_n\rangle$ לא ידועים עם אנרגיות עצמיות $H|\phi_n\rangle = E_n|\phi_n\rangle$. הן פורשות את מרחב הילברט ולכן כל מצב כללי כלשהו $|\psi\rangle$ ניתן לביטוי כסופרפוזיציה של המ"ע $|\psi\rangle = \sum_n c_n|\phi_n\rangle$. אם נחשב את ערך התצפית של H עבור המצב $|\psi\rangle$ נקבל

$$E = \langle\psi|H|\psi\rangle = \sum_n |c_n|^2 E_n \geq \sum_n |c_n|^2 E_0 = E_0 \tag{2.1}$$

כלומר, לא חשוב איזה פונקצית גל ψ נבחר, תמיד יתקיים $E \geq E_0$.

כאשר אנו פותרים בעיות בשיטת הוריאציה:

1. נבחר פונקצית מבחן $\psi_k(x)$ התלויה בפרמטר חופשי k ומקיימת את תנאי השפה והסימטריות של הבעיה:
   (א) לדאוג שהפונקציה מתאפסת באינסוף או על הקירות (אם מדובר בבור פוטנציאל אינסופי).
   (ב) לדאוג להתנהגות האסימפטוטית של הפונקציה (הפונקציה פותרת את המשוואה הדיפרנציאלית האסימפטוטית).
2. ערך התצפית של האנרגיה לפי המצב $\psi_k(x)$ יהיה תמיד גדול יותר מאנרגית מצב היסוד. נחשב את האנרגיה
$$\bar{E}(k) = \frac{\langle\psi_k|H|\psi_k\rangle}{\langle\psi_k|\psi_k\rangle} \geq E_0 \tag{2.2}$$
   כאשר אנחנו לא מניחים ש-ψ_k בהכרח מנורמלת.
3. נמצא את k_0 עבורו הפונקציה $\bar{E}(k)$ מקבלת ערך מינימלי
$$\left.\frac{\partial\bar{E}}{\partial k}\right|_{k=k_0} = 0 \tag{2.3}$$
   נציב את k_0 ונקבל חסם עליון על אנרגית מצב היסוד
$$\boxed{E_0 \leq \bar{E}(k_0)} \tag{2.4}$$

תרגיל 3

חלקיק בעל מסה m נע במימד אחד תחת השפעת הפוטנציאל $V=\alpha|x|$. מצאו חסם עליון עבור האנרגיה של המצב המעורר הראשון.

כדי להעריך את האנרגיה של מצב המעורר הראשון עלינו לבחור פונקציית וריאציה שהיא *אורתוגונלית* למצב היסוד (המדויק) של המערכת. אכן, אם נניח ש-$|\psi\rangle=\sum_{n=1}c_n|\phi_n\rangle$ כלומר $\langle\phi_0|\psi\rangle=0$ אז

$$E=\langle\psi|H|\psi\rangle=\sum_{n=1}|c_n|^2E_n\geq\sum_n|c_n|^2E_1=E_1 \tag{2.5}$$

מכיוון שהפוטנציאל V זוגי אז מצב היסוד זוגי והמצב המעורר הראשון אי-זוגי. נבחר אם כן פונקציית וריאציה אי-זוגית שמובטחת להיות אורתוגונלית למצב היסוד (וכל המצבים הזוגיים). ננסה שתי פונקציות:

אפשרות 1: פונקציית וריאציה $\psi_k(x)=Axe^{-kx^2}$. המקדם A נקבע ע"י נרמול

$$1=\langle\psi_k|\psi_k\rangle=|A|^2\int_{-\infty}^{\infty}x^2e^{-2kx^2}\,\mathrm{d}x=\frac{|A|^2}{4k}\sqrt{\frac{\pi}{2k}}\implies|A|^2=4k\sqrt{\frac{2k}{\pi}} \tag{2.6}$$

נחשב את ערך התצפית של האנרגיה $\langle H\rangle=\langle T\rangle+\langle V\rangle$:

$$\begin{aligned}\langle T\rangle&=-\frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\infty}^{\infty}\psi_k^*(x)\,\psi_k''(x)\,\mathrm{d}x=\frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\infty}^{\infty}|\psi_k'(x)|^2\,\mathrm{d}x\\&=\frac{\hbar^2|A|^2}{2m}\underbrace{\int_{-\infty}^{\infty}\left(1-2kx^2\right)^2e^{-2kx^2}\,\mathrm{d}x}_{\frac{3}{4}\sqrt{\frac{\pi}{2k}}}=\frac{3\hbar^2k}{2m}\\\langle V\rangle&=|A|^2\int_{-\infty}^{\infty}\alpha|x|\,x^2e^{-2kx^2}\,\mathrm{d}x=2\cdot\alpha|A|^2\underbrace{\int_0^{\infty}x^3e^{-2kx^2}\,\mathrm{d}x}_{1/8k^2}\\&=\alpha\sqrt{\frac{2}{\pi k}}\end{aligned} \tag{2.7}$$

ולכן

$$E(k)=\frac{3\hbar^2k}{2m}+\alpha\sqrt{\frac{2}{\pi}}k^{-1/2} \tag{2.8}$$

נחפש מינימום

$$\frac{\partial E}{\partial k}=\frac{3\hbar^2}{2m}-\frac{\alpha}{\sqrt{2\pi}}k^{-3/2}=0\implies k_0=\left(3\sqrt{\frac{\pi}{2}}\frac{\hbar^2}{\alpha m}\right)^{-2/3} \tag{2.9}$$

נציב את k_0 ונקבל חסם על E_1:

$$\bar{E}_1=\frac{3\hbar^2}{2m}\left(3\sqrt{\frac{\pi}{2}}\frac{\hbar^2}{\alpha m}\right)^{-2/3}+\alpha\sqrt{\frac{2}{\pi}}\left(3\sqrt{\frac{\pi}{2}}\frac{\hbar^2}{\alpha m}\right)^{1/3}=\left(\frac{3^4}{4\pi}\right)^{1/3}\left(\frac{\hbar^2\alpha^2}{m}\right)^{1/3}\simeq1.861\left(\frac{\hbar^2\alpha^2}{m}\right)^{1/3} \tag{2.10}$$

וזה קרוב לערך המדויק $1.856\left(\hbar^2\alpha^2/m\right)^{1/3}$.

אפשרות 2: פונקצית וריאציה $\psi_k(x) = Axe^{-k|x|}$. מנרמול נקבע

$$1 = \langle \psi_k | \psi_k \rangle = |A|^2 \int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-2k|x|}\,\mathrm{d}x = 2|A|^2 \int_0^{\infty} x^2 e^{-2kx}\,\mathrm{d}x = \frac{|A|^2}{2k^3} \implies |A|^2 = 2k^3 \tag{2.11}$$

נחשב את ערך התצפית של האנרגיה $\langle H \rangle = \langle T \rangle + \langle V \rangle$:

$$\begin{aligned} \langle T \rangle &= \frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\infty}^{\infty} |\psi_k'(x)|^2\,\mathrm{d}x = \frac{\hbar^2 |A|^2}{2m}\int_{-\infty}^{\infty} (1-k|x|)^2 e^{-2k|x|}\,\mathrm{d}x \\ &= \frac{\hbar^2|A|^2}{2m} 2 \underbrace{\int_0^{\infty} (1-kx)^2 e^{-2kx}\,\mathrm{d}x}_{1/4k} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \\ \langle V \rangle &= |A|^2 \int_{-\infty}^{\infty} \alpha |x| x^2 e^{-2k|x|}\,\mathrm{d}x = \alpha |A|^2\, 2 \underbrace{\int_0^{\infty} x^3 e^{-2kx}\,\mathrm{d}x}_{3/8k^4} \\ &= \frac{3\alpha}{2k} \end{aligned} \tag{2.12}$$

ולכן

$$E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \frac{3\alpha}{2k} \tag{2.13}$$

נחפש מינימום

$$\frac{\partial E}{\partial k} = \frac{\hbar^2 k}{m} - \frac{3\alpha}{2k^2} = 0 \implies k_0 = \left(\frac{3}{2}\frac{m\alpha}{\hbar^2}\right)^{1/3} \tag{2.14}$$

נציב את k_0 ונקבל חסם על E_1:

$$\bar{E}_1 = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{3}{2}\frac{m\alpha}{\hbar^2}\right)^{2/3} + \frac{3\alpha}{2}\left(\frac{3}{2}\frac{m\alpha}{\hbar^2}\right)^{-1/3} = \left(\frac{3}{2}\right)^{5/3}\left(\frac{\hbar^2\alpha^2}{m}\right)^{1/3} \simeq 1.966\left(\frac{\hbar^2\alpha^2}{m}\right)^{1/3} \tag{2.15}$$

זה חסם פחות טוב מהחסם הקודם שקיבלנו.

תרגיל 4

נתון ההמילטוניאן של שני פרמיונים זהים (התעלמו מספין)

$$H = \frac{p_1^2}{2m} + \frac{p_2^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x_1^2 + \frac{1}{2}m\omega^2 x_2^2 + \frac{1}{2}m\Omega^2 (x_1 - x_2)^2 \tag{2.16}$$

א. עבור $\Omega = 0$, מהו מצב היסוד של המערכת ומהי האנרגיה שלו?

ב. כעת $\Omega \neq 0$. השתמשו בשיטת הוריאציה ומצאו חסם עליון על אנרגית היסוד של המערכת.

א. אלה שני פרמיונים באוסילטורים הרמוניים זהים. מכיוון שהתבקשנו להתעלם מהספין, נבנה אם כך מצב אנטי-סימטרי תחת החלפת חלקיקים של החלק המרחבי בלבד. נסמן ב-$|n\rangle$ את המ"ע של אוסילטור הרמוני יחיד עם תדירות ω, ואת המצב הרב-חלקיקי $|n_1, n_2\rangle \equiv |n_1\rangle \otimes |n_2\rangle$. לכן פונקצית הגל הרב-חלקיקית היא

$$\boxed{|\Psi_{\text{GS}}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|1,0\rangle - |0,1\rangle\right)} \tag{2.17}$$

ואנרגיה היסוד היא

$$\boxed{E_{\text{GS}} = E_0 + E_1 = \hbar\omega\left(0 + \frac{1}{2}\right) + \hbar\omega\left(1 + \frac{1}{2}\right) = 2\hbar\omega} \tag{2.18}$$

ב. נכתוב את ההמילטוניאן כך

$$\begin{aligned} H &= \frac{p_1^2}{2m} + \frac{p_2^2}{2m} + \frac{1}{2}m\underbrace{\left(\omega^2 + \Omega^2\right)}_{\tilde{\Omega}^2} x_1^2 + \frac{1}{2}m\left(\omega^2 + \Omega^2\right) x_2^2 - m\Omega^2 x_1 x_2 \\ &= \underbrace{\left[\frac{p_1^2}{2m} + \frac{1}{2}m\tilde{\Omega}^2 x_1^2\right]}_{H_1} + \underbrace{\left[\frac{p_2^2}{2m} + \frac{1}{2}m\tilde{\Omega}^2 x_2^2\right]}_{H_2} - m\Omega^2 x_1 x_2 \\ &= H_1 + H_2 + V \end{aligned} \tag{2.19}$$

H_1 ו-H_2 הם אוסילטורים הרמוניים עם תדירות $\tilde{\Omega}$. בתור פונקצית מבחן נשתמש במ"ע של אוסילטור הרמוני עם מסה M ותדירות W

$$|n_1, n_2\rangle = |n_1\rangle \otimes |n_2\rangle \tag{2.20}$$

כך שהפרמטר של הוריאציה הוא $\alpha \equiv MW/\hbar$. נבנה פונקצית גל א"ס תחת החלפת החלקיקים:

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|1,0\rangle - |0,1\rangle\right) \tag{2.21}$$

כדי לחשב את ערך התצפית של האנרגיה, נכתוב את המיקום והתנע בעזרת אופרטורי סולם

$$\begin{cases} x_i = \sqrt{\dfrac{\hbar}{2MW}} \left(a_i^\dagger + a_i\right) = \dfrac{1}{\sqrt{2\alpha}} \left(a_i^\dagger + a_i\right) \\ p_i = i\sqrt{\dfrac{M\hbar W}{2}} \left(a_i^\dagger - a_i\right) = i\hbar\sqrt{\dfrac{\alpha}{2}} \left(a_i^\dagger - a_i\right) \end{cases} \tag{2.22}$$

בעזרתם קל להיווכח שערכי התצפית הם

$$\langle n|p^2|n\rangle = \hbar^2\alpha\left(n+\frac{1}{2}\right), \qquad \langle n|x^2|n\rangle = \frac{1}{\alpha}\left(n+\frac{1}{2}\right) \tag{2.23}$$

ערך התצפית של האנרגיה מתחלק לשלוש תרומות,

$$\begin{aligned}\bar{E}(\alpha) =& \langle\psi|H|\psi\rangle = \langle H_1\rangle + \langle H_2\rangle + \langle V\rangle \\ =& \left[\frac{\langle p_1^2\rangle}{2m} + \frac{1}{2}m\tilde{\Omega}^2\left\langle x_1^2\right\rangle\right] + \left[\frac{\langle p_2^2\rangle}{2m} + \frac{1}{2}m\tilde{\Omega}^2\left\langle x_2^2\right\rangle\right] + \langle V\rangle\end{aligned} \tag{2.24}$$

החישוב של $\langle H_1\rangle + \langle H_2\rangle = E_0 + E_1$ דומה לזה במשוואה (1.28). נחשב את $\langle V\rangle$:

$$\begin{aligned}\langle V\rangle &= \frac{1}{2}\left(\langle 1,0| - \langle 0,1|\right)V\left(|1,0\rangle - |0,1\rangle\right) \\ &= \frac{1}{2}\left(\langle 0,1|V|0,1\rangle + \langle 1,0|V|1,0\rangle - \langle 1,0|V|0,1\rangle - \langle 0,1|V|1,1\rangle\right) \\ &= -\frac{1}{2}m\Omega^2\left(\underbrace{\langle 0,1|x_1x_2|0,1\rangle}_{0} + \underbrace{\langle 1,0|x_1x_2|1,0\rangle}_{0} - 2\,\mathrm{Re}\{\langle 1,0|x_1x_2|0,1\rangle\}\right) \\ &= m\Omega^2\,\mathrm{Re}\left\{\frac{1}{\sqrt{2\alpha}}\cdot\frac{1}{\sqrt{2\alpha}}\right\} = \frac{m\Omega^2}{2\alpha}\end{aligned} \tag{2.25}$$

כאשר שוב השתמשנו באופרטורי הסולם כדי לבצע את החישוב. מכאן

$$\begin{aligned}\bar{E}(\alpha) &= \frac{1}{2}\left[\frac{\hbar^2\alpha}{m} + m\tilde{\Omega}^2\frac{1}{\alpha}\right]\left(0+\frac{1}{2}\right) + \frac{1}{2}\left[\frac{\hbar^2\alpha}{m} + m\tilde{\Omega}^2\frac{1}{\alpha}\right]\left(1+\frac{1}{2}\right) + \frac{m\Omega^2}{2\alpha} \\ &= \frac{\hbar^2\alpha}{m} + m\tilde{\Omega}^2\frac{1}{\alpha} + \frac{m\Omega^2}{2\alpha} = \frac{\hbar^2}{m}\alpha + m\left(\omega^2 + \frac{3}{2}\Omega^2\right)\frac{1}{\alpha}\end{aligned} \tag{2.26}$$

נגזור ונמצא מינימום:

$$\frac{\partial\bar{E}}{\partial\alpha} = \frac{\hbar^2}{m} - m\left(\omega^2 + \frac{3}{2}\Omega^2\right)\frac{1}{\alpha^2} = 0 \implies \alpha_0 = \frac{m\omega}{\hbar}\sqrt{1+\frac{3}{2}\left(\frac{\Omega}{\omega}\right)^2} \tag{2.27}$$

האנרגיה המינימלית היא

$$\boxed{\bar{E}(\alpha_0) = \frac{\hbar^2}{m}\frac{m\omega}{\hbar}\sqrt{1+\frac{3}{2}\left(\frac{\Omega}{\omega}\right)^2} + \frac{m\left(\omega^2+\frac{3}{2}\Omega^2\right)}{\frac{m\omega}{\hbar}\sqrt{1+\frac{3}{2}\left(\frac{\Omega}{\omega}\right)^2}} = 2\hbar\omega\sqrt{1+\frac{3}{2}\left(\frac{\Omega}{\omega}\right)^2}} \tag{2.28}$$

שימו לב שעבור $\Omega \to 0$ נקבל את אנרגית מצב היסוד שחישבנו בסעיף הקודם $E_{\mathrm{GS}} = 2\hbar\omega$.