

כימיה פיזיקלית 2 – תרגיל מספר 4

חלקיק בקופסא רב ממדית

1. האם יתכן שבקופסא תלת מימדית בעלת אורכי צלעות שונים ($a \neq b \neq c$) יהיה ניוון לרמות האנרגיה? אם לא, הסבירו מדוע. אם כן, תנו דוגמא.

2. פונקצית הגל של חלקיק בקופסא דו מימדית סימטרית $\varphi(x, y)$ יכולה להרשם כקומבינציה

לינארית של הפונקציות העצמיות $\Psi_{n_x, n_y}(x, y) = \frac{2}{a} \sin\left(\frac{n_x \pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{n_y \pi y}{a}\right)$, כלומר

$$\varphi(x, y) = \sum_{n_x=1, n_y=1}^{\infty, \infty} C_{n_x, n_y} \Psi_{n_x, n_y}(x, y)$$

(המנורמלות) הבאות.

א. $\varphi(x, y) = \frac{2}{a} \sin\left(\frac{3\pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{4\pi y}{a}\right)$

ב. $\varphi(x, y) = \frac{2}{a} \left[\frac{2}{3} \sin\left(\frac{5\pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{2\pi y}{a}\right) + \frac{\sqrt{5}}{3} \sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{5\pi y}{a}\right) \right]$

ג. $\varphi(x, y) = \frac{4}{\sqrt{5}a} \sin\left(\frac{3\pi x}{a}\right) \sin^2\left(\frac{\pi y}{a}\right)$

(בסעיף ג היעזרו באינטגרל $\int_0^a \sin\left(\frac{j\pi x}{a}\right) \sin^2\left(\frac{\pi x}{a}\right) dx = \frac{2a(\cos(j\pi) - 1)}{j(j^2 - 4)\pi}$ עבור j שלם)

3. מהם ערכי התצפית של האנרגיה עבור פונקציות הגל משאלה 2?

4. האם הפונקציה $\varphi(x, y) = \sin\left(\frac{3\pi x}{a}\right)$ יכולה להיות פונקצית גל של חלקיק בקופסא דו מימדית?

אם כן, נרמלו אותה ומצאו את המקדמים C_{n_x, n_y} . אם לא הסבירו מדוע?

כימיה פיזיקלית 2 – תרגיל כיתה מספר 4

1. פונקצית גל טהורה של חלקיק בקופסא ריבועית דו-ממדית הנה :

$$\Psi(x, y) = \begin{cases} \frac{2}{a} \sin\left(\frac{n_x \pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{n_y \pi y}{a}\right) & 0 \leq x, y \leq a \\ 0 & \text{אחר} \end{cases}$$

א. חשבו את הממוצעים $\langle x \rangle$, $\langle y \rangle$ ו- $\langle xy \rangle$. השוו את התוצאה המתקבלת עבור $\langle xy \rangle$ לתוצאת המכפלה $\langle x \rangle \langle y \rangle$, הסבירו.

ב. דרגת הניוון של ערך עצמי של אופרטור הנה מספר פונקציות הגל העצמיות הבלתי תלויות המתאימות לערך העצמי הנתון. מצאו את דרגת הניוון של רמות האנרגיה הבאות עבור חלקיק בקופסא דו-ממדית :

$$E = \frac{h^2}{4ma^2} \text{ (i)} \quad E = \frac{5}{8} \frac{h^2}{ma^2} \text{ (ii)} \quad E = \frac{h^2}{ma^2} \text{ (ii)}$$

ג. חשבו את דרגת הניוון של שלושת רמות האנרגיה הראשונות של חלקיק בקופסא ריבועית תלת-ממדית.

2. חלקיק בקופסא קוביתית תלת מימדית נמצא במצב מעורב המתואר ע"י פונקצית הגל

$$\phi(x, y, z) = \frac{1}{3} \Psi_{1,1,2}(x, y, z) + \frac{2}{3} \Psi_{1,2,2}(x, y, z) + C \Psi_{1,2,3}(x, y, z)$$

כאשר הפונקציות Ψ הינם הפונקציות העצמיות להמילטוניאן.

א. מהו ערכו של C כך שפונקצית הגל תהיה מנורמלת.

ב. מהו ערך התצפית של האנרגיה במצב זה?

ג. מה ההסתברות שבמידה ימדד ערך שכזה?

ד. האם הפונקציה הבאה עצמית להמילטוניאן? אם כן מהו הערך העצמי שלה?

$$\phi(x, y, z) = \frac{1}{3} \Psi_{3,2,1}(x, y, z) + \frac{2}{3} \Psi_{3,1,2}(x, y, z) + \frac{2}{3} \Psi_{1,3,2}(x, y, z)$$

מתוך מבחן מועד א' בשנת 2000

שאלה 3

מולקולת מימן נמצאת בקופסה שכל צלעותיה 1 ס"מ. האנרגיה הקינטית של המולקולה היא האנרגיה התרמית בטמפרטורה 300K.

א. האנרגיה של חלקיק בקופסה תלת ממדית מבוטאת בעזרת המספרים הקוונטיים n_x, n_y, n_z .

ניתן להגדיר מספר קוונטי אפקטיבי $n = \sqrt{n_x^2 + n_y^2 + n_z^2}$. מחו ערכו של n עבור המולקולה?

ב. כמה אנרגיה יש להוסיף למולקולה כדי להגדיל את n ביחידה? מה היחס בין תוספת האנרגיה לבין האנרגיה הקינטית כולח? האם ניתן לתאר את תנועת המולקולה בצורה קלאסית?

ג. מהי האנרגיה של רמת היסוד של המולקולה בקופסה?