7/3/2007

כימיה פיזיקלית 2 – פתרון תרגיל מספר 2

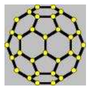
1. אורכי גל דה ברולי מחושבים לפי הנוסחה $\lambda = \dfrac{h}{p}$, כאשר h הוא קבוע פלנק והתנע $p = mv$.

א. $$\lambda = \frac{6.626\cdot10^{-34}\,\mathrm{J\cdot sec}}{10^{-3}\,\mathrm{Kg}\ 300\,\mathrm{m/sec}} = 2.21\cdot10^{-33}\,\mathrm{m}$$

ב. $$\lambda = \frac{6.626\cdot10^{-34}\,\mathrm{J\cdot sec}}{10^{-9}\,\mathrm{Kg}\ 10^{-6}\,\mathrm{m/sec}} = 6.626\cdot10^{-19}\,\mathrm{m}$$

ג. משקל מולקולת C_{60} הוא: $M_{C_{60}} = 60M_{^{12}C} = 60\cdot12\cdot1.66\cdot10^{-27}\,\mathrm{Kg} = 1.2\cdot10^{-24}\,\mathrm{Kg}$

לפי הקשר $\frac{1}{2}mv^2 = \frac{3}{2}K_B T$ מקבלים $p = mv = \sqrt{3K_B T m}$



$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{3K_B T m M_{C_{60}}}} = \frac{6.626\cdot10^{-34}\,\mathrm{J\cdot sec}}{\sqrt{3\cdot1.38\cdot10^{-23}\,\mathrm{J/K}\ 1000\mathrm{K}\cdot1.2\cdot10^{-24}\,\mathrm{Kg}}} = 2.98\cdot10^{-12}\,\mathrm{m}$$

ד. $$\lambda = \frac{6.626\cdot10^{-34}\,\mathrm{J\cdot sec}}{9.11\cdot10^{-31}\,\mathrm{Kg}\ 10^{8}\,\mathrm{m/sec}} = 7.27\cdot10^{-12}\,\mathrm{m}$$

ה. בדומה ל ג.

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{3K_B T m M_{H_2}}} = \frac{6.626\cdot10^{-34}\,\mathrm{J\cdot sec}}{\sqrt{3\cdot1.38\cdot10^{-23}\,\mathrm{J/K}\ 20\mathrm{K}\cdot3.35\cdot10^{-27}\,\mathrm{Kg}}} = 3.98\cdot10^{-10}\,\mathrm{m}$$

ו. $\lambda_{\text{radio}} \sim 1\mathrm{m} - 10^{5}\,\mathrm{m}$, $\lambda_{\text{X-ray}} \sim 10^{-16}\,\mathrm{m} - 10^{-11}\,\mathrm{m}$. אורכי גל אלו נמצאים בקצוות הספקטרום האלקטרומגנטי.

2. א. $$\hat{D}\Psi = \left(\frac{d}{dx} + x\right)\Psi = \lambda\Psi \quad\Rightarrow\quad \frac{d\Psi}{dx} + x\Psi - \lambda\Psi = 0$$

נפתור את המשוואה ע״י הכפלה בגורם אינטגרציה $e^{\int(x-\lambda)dx} = e^{x^2/2-\lambda x}$

$$\frac{d\Psi}{dx}e^{x^2/2-\lambda x} + \left(x-\lambda\right)e^{x^2/2-\lambda x}\Psi = \frac{d}{dx}\left(\Psi e^{x^2/2-\lambda x}\right) = 0$$

כלומר $\Psi e^{x^2/2-\lambda x} = C \Rightarrow \Psi = Ce^{-x^2/2+\lambda x}$

ב. נפעיל את $\hat{D}^2$ על פונקציה כלשהי F

$$\hat{D}^2F = \left(\frac{d}{dx}+x\right)\left(\frac{d}{dx}+x\right)F = \left(\frac{d}{dx}+x\right)\left(\frac{dF}{dx}+xF\right) = \frac{d^2F}{dx^2} + x\frac{dF}{dx} + \frac{d}{dx}\left(xF\right) + x^2F$$

$$= \frac{d^2F}{dx^2} + x\frac{dF}{dx} + x\frac{dF}{dx} + F + x^2F = \left(\frac{d^2}{dx^2} + 2x\frac{d}{dx} + 1 + x^2\right)F$$

כלומר $\hat{D}^2 = \left(\dfrac{d^2}{dx^2} + 2x\dfrac{d}{dx} + 1 + x^2\right)$

3. א. $$[\hat{A},\hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = -(\hat{B}\hat{A} - \hat{A}\hat{B}) = -[\hat{B},\hat{A}]$$

ב. $$[\hat{A},\hat{B}\hat{C}] = \hat{A}\hat{B}\hat{C} - \hat{B}\hat{C}\hat{A} = \hat{A}\hat{B}\hat{C} - \hat{B}\hat{A}\hat{C} + \hat{B}\hat{A}\hat{C} - \hat{B}\hat{C}\hat{A} = [\hat{A},\hat{B}]\hat{C} + \hat{B}[\hat{A},\hat{C}]$$

אמיר חלבה – אורנשטיין 405, טלפון: 03-6408902.
e-mail: ehaleva@post.tau.ac.il

7/3/2007

ג. $[\hat{A},\hat{B}+\hat{C}]=\hat{A}(\hat{B}+\hat{C})-(\hat{B}+\hat{C})\hat{A}=\hat{A}\hat{B}+\hat{A}\hat{C}-\hat{B}\hat{A}-\hat{C}\hat{A}=[\hat{A},\hat{B}]+[\hat{A},\hat{C}]$

ד. $\left(\hat{A}+\hat{B}\right)\left(\hat{A}-\hat{B}\right)=\hat{A}^2-\hat{A}\hat{B}+\hat{B}\hat{A}-\hat{B}^2=\hat{A}^2-\hat{B}^2-[\hat{A},\hat{B}]$

תוצאה זו שווה ל $\hat{A}^2-\hat{B}^2$ רק עבור $[\hat{A},\hat{B}]=0$ כלומר רק עבור $\hat{A}$ ו $\hat{B}$ חילופיים.

ה. $\left[\frac{d}{dx}+x,x\right]=\left[\frac{d}{dx},x\right]+\left[x,x\right]=1+0=1$

ואפשר גם בדרך הארוכה

$$[\hat{D},\hat{x}]f=\left\{\left(\frac{d}{dx}+x\right)x-x\left(\frac{d}{dx}+x\right)\right\}f=\frac{d}{dx}(xf)+x^2f-x\frac{df}{dx}-x^2f=f+x\frac{df}{dx}-x\frac{df}{dx}=f\Rightarrow[\hat{D},\hat{x}]=1$$

4.א. ברור מראש שממוצע של גאוסיין מסביב ל x_0 ייתן x_0. נראה זאת באינטגרל

$$\left\langle\hat{x}\right\rangle=\int\Psi^*(x)\hat{x}\Psi(x)dx=\frac{1}{\sqrt{\pi\sigma}}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma}}xe^{-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma}}dx=\frac{1}{\sqrt{\pi\sigma}}\int_{-\infty}^{\infty}xe^{-\frac{(x-x_0)^2}{\sigma}}dx=$$

$$\frac{1}{\sqrt{\pi\sigma}}\int_{-\infty}^{\infty}(x'+x_0)e^{-\frac{x'^2}{\sigma}}dx'=0+\frac{x_0}{\sqrt{\pi\sigma}}\sqrt{\pi\sigma}=x_0$$

כאשר האינטגרל על המחובר הראשון מתאפס מכיוון שזוהי פונקציה אנטי סימטרית.

$$\left\langle\hat{p}\right\rangle=\frac{1}{\sqrt{\pi\sigma}}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma}}(-i\hbar\tfrac{d}{dx})e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma}}dx=\frac{-i\hbar}{\sqrt{\pi\sigma}}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma}}\left[\tfrac{-(x-x_0)}{\sigma}\right]e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma}}dx=\frac{i\hbar}{\sigma\sqrt{\pi\sigma}}\int_{-\infty}^{\infty}x'e^{-\frac{x'^2}{\sigma}}dx=0$$

גם כאן האינטגרל מתאפס מכיוון שהאינטגרנד הוא אנטי סימטרי.

$$\left\langle\hat{x}^2\right\rangle=\frac{1}{\sqrt{\pi\sigma}}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma}}x^2e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma}}dx=\frac{1}{\sqrt{\pi\sigma}}\int_{-\infty}^{\infty}x^2e^{-\frac{(x-x_0)^2}{\sigma}}dx=\frac{1}{\sqrt{\pi\sigma}}\int_{-\infty}^{\infty}(x'+x_0)^2e^{-\frac{x'^2}{\sigma}}dx'=$$

$$=\frac{1}{\sqrt{\pi\sigma}}\int_{-\infty}^{\infty}(x'^2+2x'x_0+x_0{}^2)e^{-\frac{x'^2}{\sigma}}dx'=\frac{1}{\sqrt{\pi\sigma}}\int_{-\infty}^{\infty}x'^2e^{-\frac{x'^2}{\sigma}}dx'+0+x_0{}^2\frac{\sqrt{\pi\sigma}}{\sqrt{\pi\sigma}}=$$ <u>בעזרת אינטגרציה בחלקים</u>

$$=\frac{1}{\sqrt{\pi\sigma}}\left[\tfrac{-x'\sigma}{2}e^{-\frac{x'^2}{\sigma}}\Big|_{-\infty}^{\infty}+\int_{-\infty}^{\infty}\tfrac{\sigma}{2}e^{-\frac{x'^2}{\sigma}}dx'\right]+x_0{}^2=0+\frac{\sigma}{2}+x_0{}^2$$

עבור $\left\langle\hat{p}^2\right\rangle$ נשתמש בתוצאת האינטגרל הקודם ובנורמליות של Ψ

$$\left\langle\hat{p}^2\right\rangle=\frac{1}{\sqrt{\pi\sigma}}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma}}(-\hbar^2\tfrac{d^2}{dx^2})e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma}}dx=\frac{-\hbar^2}{\sqrt{\pi\sigma}}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma}}\left[\tfrac{(x-x_0)^2}{\sigma^2}-\tfrac{1}{\sigma}\right]e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma}}dx=\frac{\hbar^2}{\sqrt{\pi\sigma}}\int_{-\infty}^{\infty}(\tfrac{1}{\sigma}-\tfrac{x'^2}{\sigma^2})e^{-\frac{x'^2}{\sigma}}dx=$$

$$\hbar^2[\frac{1}{\sigma}-\frac{1}{\sigma^2}\frac{\sigma}{2}]=\frac{\hbar^2}{2\sigma}$$

ב. $\Delta\hat{x}\equiv\sqrt{\left\langle\hat{x}^2\right\rangle-\left\langle\hat{x}\right\rangle^2}=\sqrt{\tfrac{\sigma}{2}+x_0^2-x_0^2}=\sqrt{\tfrac{\sigma}{2}}$

$\Delta\hat{p}\equiv\sqrt{\left\langle\hat{p}^2\right\rangle-\left\langle\hat{p}\right\rangle^2}=\sqrt{\tfrac{\hbar^2}{2\sigma}-0}=\tfrac{\hbar}{\sqrt{2\sigma}}$

ג.

$\Delta\hat{x}\Delta\hat{p}=\tfrac{\hbar}{2}$

כלומר עבור פונקצית גל גאוסיינית, עיקרון אי הודאות $\Delta\hat{x}\Delta\hat{p}\geq\tfrac{\hbar}{2}$, נכון תמיד, בלי תלות ברוחב הגוסיאן או במיקומו. זהו תיאור של חבילת גלים מינימאלית : $\Delta\hat{x}\Delta\hat{p}=\tfrac{\hbar}{2}$.

אמיר חלבה – אורנשטיין 405, טלפון: 03-6408902.
e-mail: ehaleva@post.tau.ac.il