28/3/2007

כימיה פיזיקלית 2 – פתרון תרגיל מספר 5

1. נחשב את האינטגרלים:

$$\left\langle \Psi_1 \middle| \Psi_1 \right\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_1^{\,2}\left(x\right) dx = \sqrt{\tfrac{4\alpha^3}{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-\alpha x^2} dx = \sqrt{\tfrac{4\alpha^3}{\pi}} \left[-\tfrac{\partial}{\partial\alpha} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha x^2} dx \right] = \sqrt{\tfrac{4\alpha^3}{\pi}} \left[-\tfrac{\partial}{\partial\alpha} \sqrt{\tfrac{\pi}{\alpha}} \right]$$

$$= \sqrt{\tfrac{4\alpha^3}{\pi}} \sqrt{\tfrac{\pi}{4\alpha^3}} = 1$$

$$\left\langle \Psi_2 \middle| \Psi_2 \right\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_2^{\,2}\left(x\right) dx = \sqrt{\tfrac{\alpha}{4\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} (2\alpha x^2 - 1)^2 e^{-\alpha x^2} dx = \sqrt{\tfrac{\alpha}{4\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} (4\alpha^2 x^4 - 4\alpha x^2 + 1) e^{-\alpha x^2} dx =$$

$$= \sqrt{\tfrac{\alpha}{4\pi}} \left(3\sqrt{\tfrac{\pi}{\alpha}} - 2\sqrt{\tfrac{\pi}{\alpha}} + \sqrt{\tfrac{\pi}{\alpha}} \right) = 1$$

$$\left\langle \Psi_1 \middle| \Psi_2 \right\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_1\left(x\right) \Psi_2\left(x\right) dx = \left(\tfrac{4\alpha}{\pi}\right)^{1/4} \left(\tfrac{\alpha}{4\pi}\right)^{1/4} \int_{-\infty}^{\infty} x(2\alpha x^2 - 1) e^{-\alpha x^2} dx = 0$$

האינטגרל האחרון הוא אנטי סימטרי ולכן מתאפס.

2. נחשב את $\left\langle T \right\rangle$

$$\left\langle T \right\rangle = \left\langle \Psi_0 \middle| T \middle| \Psi_0 \right\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_0\left(x\right) \frac{-\hbar^2 \partial^2}{2m \partial x^2} \Psi_0\left(x\right) dx = \frac{-\hbar^2}{2m} \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha x^2/2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} e^{-\alpha x^2/2} dx =$$

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha x^2/2} \left(x^2\alpha^2 - \alpha \right) e^{-\alpha x^2/2} dx = \frac{-\hbar^2}{2m} \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}} \left(\frac{\sqrt{\alpha\pi}}{2} - \sqrt{\alpha\pi} \right) = \frac{\hbar^2 \alpha}{4m} = \frac{\hbar\omega}{4}$$

ובדרך זהה נחשב את $\left\langle V \right\rangle$

$$\left\langle V \right\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_0\left(x\right) \tfrac{1}{2} m\omega^2 x^2 \Psi_0\left(x\right) dx = \frac{m\omega^2}{2} \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-\alpha x^2} dx = \frac{m\omega^2}{2} \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}} \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha^3}} = \frac{m\omega^2}{4\alpha} = \frac{\hbar\omega}{4}$$

שימו לב לכך שקיבלנו $\left\langle V \right\rangle = \left\langle T \right\rangle = \left\langle H \right\rangle / 2$

3. ההסתברות למצוא את החלקיק במיקום x הינה $P_0(x) = \left| \Psi_0\left(x\right)^2 \right| = \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}} e^{-\alpha x^2}$

$$\tfrac{\partial}{\partial x} P_0(x) = \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}} (-2\alpha x) e^{-\alpha x^2} = 0 \quad \Rightarrow \quad x_{\max} = 0$$

$$\left\langle x \right\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_0\left(x\right) x \Psi_0\left(x\right) dx = \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} x e^{-\alpha x^2} dx = 0$$

$$\left\langle x^2 \right\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_0\left(x\right) x^2 \Psi_0\left(x\right) dx = \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-\alpha x^2} dx = \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}} \sqrt{\frac{\pi}{4\alpha^3}} = \frac{1}{2\alpha}$$

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

4. א. נכפיל את הפונקציה בקבוע נרמול C. תנאי הנרמול הוא אם כך $C^2+4C^2+4C^2=1$ ← $C=1/3$

והפונקציה המנורמלת ניתנת ע"י $\Phi(x)=\frac{1}{3}\Psi_0(x)+\frac{2}{3}\Psi_2(x)+\frac{2}{3}\Psi_3(x)$

ב. הסיכוי להמצא במצב היסוד הוא $C_0^2=1/9$.

הסיכוי להמצא במצב המעורר הראשון הוא $C_1^2=0$.

ג. $\left\langle H\right\rangle=\sum_{n=0}^{\infty}E_nC_n^2=E_0C_0^2+E_2C_2^2+E_3C_3^2=\frac{1}{2}\hbar\omega\frac{1}{9}+\frac{5}{2}\hbar\omega\frac{4}{9}+\frac{7}{2}\hbar\omega\frac{4}{9}=\frac{49}{18}\hbar\omega$

ד. עבור הקומבינציה הנ"ל רק E_3 גדול מ $\left\langle H\right\rangle$ והסיכוי להיות במצב זה הוא 4/9.

5. ההסתברות לקבל $E_0=\frac{1}{2}\hbar\omega$ היא C_0^2, לקבל $E_1=\frac{3}{2}\hbar\omega$ היא C_1^2, וכן הלאה.

א. ההסתברות לקבל אנרגיה הגבוהה מ $2\hbar\omega$ היא אם כך $P=\sum_{n=2}^{\infty}C_n^2$ והיא תתאפס רק אם

$\forall n\geq 2 \quad C_n=0$.

ב. נתון כי האנרגיה הממוצעת היא $\left\langle H\right\rangle=\sum_{n=0}^{\infty}E_nC_n^2=\frac{1}{2}\hbar\omega C_0^2+\frac{3}{2}\hbar\omega C_1^2=\hbar\omega$, וכמו כן

פונקצית הגל מנורמלת $\sum_{n=0}^{\infty}C_n^2=C_0^2+C_1^2=1$. ממשוואות אלו מקבלים כי $C_0=C_1=1/\sqrt{2}$.

6.א.

$$\hat{H}=-\frac{1}{2}\frac{\hbar^2}{m}\nabla^2+\frac{1}{2}m\omega^2r^2=-\frac{1}{2}\frac{\hbar^2}{m}\left[\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right]+\frac{1}{2}m\omega^2[x^2+y^2+z^2]=$$
$$=-\frac{1}{2}\frac{\hbar^2}{m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2-\frac{1}{2}\frac{\hbar^2}{m}\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{1}{2}m\omega^2y^2-\frac{1}{2}\frac{\hbar^2}{m}\frac{\partial^2}{\partial z^2}+\frac{1}{2}m\omega^2z^2=\hat{H}_x(x)+\hat{H}_y(y)+\hat{H}_z(z)$$

ב. מכיוון ששלושת ההמילטוניאנים פועלים על שלוש משתנים שונים פונקציות הגל הכלליות הן

$$\Psi_{n_xn_yn_z}(x,y,z)=\Psi_{n_x}(x)\Psi_{n_y}(y)\Psi_{n_z}(z)$$

כאשר הפונקציות Ψ_n (בעלות אינדקס אחד) הינן הפונקציות העצמיות לאוסילטור הרמוני חד ממדי (כפי שנלמדו בכיתה).

ג. כמו שאנו רואים ב-ב הפתרון כולל 3 מספרים קוונטיים.

ד. רמות האנרגיה הן סכום האנרגיות של שלושת האוסילטורים ההרמוניים

$$E_{n_xn_yn_z}=\hbar\omega(\tfrac{1}{2}+n_x)+\hbar\omega(\tfrac{1}{2}+n_y)+\hbar\omega(\tfrac{1}{2}+n_z)=\hbar\omega(\tfrac{3}{2}+n_x+n_y+n_z)$$

ורמת היסוד מתקבלת ע"י סכום רמות היסוד של 3 האוסילטורים, או במלים אחרות

$n_x=n_y=n_z=0$ כלומר $E_{000}=\frac{3}{2}\hbar\omega$

ה. רמת האנרגיה השנייה היא $E_{100}=E_{010}=E_{001}=\frac{5}{2}\hbar\omega$ וניוונה 3.

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