מבוא לקשר כימי – בוחן-אמצע תשס"ג

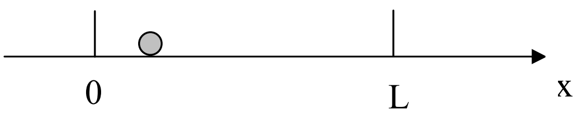
מורה: פרופ' רועי בר | ג' אייר תשס"ג, 5 במאי 2003 | משך הבוחן: שעה.

ענו על שאלה מתוך שתי השאלות. ניתן להשתמש במחברות ובספרים.

שימו לב: ניתן גם לענות על שתי השאלות, והטובה ביותר תקבע את הציון. ציון מכסימלי - 100.

---

1. חלקיק בעל מסה μ מצוי בתוך קופסא חד-מימדית באורך L (ראה ציור). מצבו של החלקיק בזמן $t=0$ נתון על-ידי פונקציית הגל (הלא-מנורמלת): $\psi(x)=\sin\frac{\pi}{L}x+\sqrt{3}\sin\frac{2\pi}{L}x$



א. 20 נק' מודדים את אנרגיית החלקיק. מה הסיכוי שיתקבל הערך $\frac{4\hbar^2\pi^2}{2\mu L^2}$?

ננרמל: נשתמש בעובדה ש- $\psi_n(x)=\sqrt{\frac{2}{L}}\sin\frac{n\pi}{L}x$ הם מצבים עצמיים מנורמלים ואורתוגונליים. נרשום:

$$\psi(x)=N\sqrt{\frac{2}{L}}\left[\sin\frac{\pi}{L}x+\sqrt{3}\sin\frac{2\pi}{L}x\right]=N\left[\psi_1(x)+\sqrt{3}\psi_2(x)\right]$$

לכן: $N^2(1+3)=1\Rightarrow N=\frac{1}{2}$, כלומר:

$$\psi(x)=\frac{1}{2}\sqrt{\frac{2}{L}}\left[\sin\frac{\pi}{L}x+\sqrt{3}\sin\frac{2\pi}{L}x\right]=\frac{1}{2}\left[\psi_1(x)+\sqrt{3}\psi_2(x)\right]$$

הסיכוי למדוד את הערך העצמי השני של האנרגיה הוא ריבוע המקדם של $\psi_2(x)$, כלומר $\frac{3}{4}$.

ב. 20 נק' מהי צפיפות ההסתברות של מקום החלקיק בזמן t? האם המצב סטאציונרי? הסבר.

צפיפות ההסתברות היא מכפלת פונ' הגל בצמוד שלה:

$$\begin{aligned}P(x,t)=\left|\psi(x,t)\right|^2&=N^2\left|e^{-iE_1t/\hbar}\psi_1(x)+\sqrt{3}e^{-iE_2t/\hbar}\psi_2(x)\right|\\&=\frac{1}{4}\left[\psi_1(x)^2+\sqrt{3}\psi_1(x)\psi_2(x)\left(e^{-i(E_1-E_2)t/\hbar}+e^{-i(E_2-E_1)t/\hbar}\right)+3\psi_2(x)^2\right]\\&=\frac{1}{4}\left[\psi_1(x)^2+2\sqrt{3}\psi_1(x)\psi_2(x)\cos\left(\left(E_2-E_1\right)t/\hbar\right)+3\psi_2(x)^2\right]\end{aligned}$$

כאשר $E_n=\frac{\hbar^2\pi^2n^2}{2\mu L^2}$.

ג. 20 נק' מה התשובה ל- א בזמן t? התשובה לא משתנה כי הערך המוחלט של המשקלות אינו משתנה בזמן.

ד. 20 נק' כמה זמן עובר עד שהמערכת חוזרת למצבה ההתחלתי? יש שתי תשובות שנתנו על-ידי תלמידים, ושתיהן קבלו מלוא הנקודות. אם הכוונה מתי הצפיפות תחזור לעצמה: רואים מ-ג' שזה קורה כאשר $\left(E_2-E_1\right)t/\hbar=2\pi$ כלומר:

$$t=\frac{2\pi\hbar}{E_2-E_1}=\frac{2\pi\hbar}{\frac{\hbar^2\pi^2}{2\mu L^2}(4-1)}=\frac{4\mu L^2}{3\hbar\pi}$$

אם הכוונה מתי פונ' הגל תחזור לעצמה: $e^{-iE_1t/\hbar}=e^{-iE_2t/\hbar}=1$ לכן $t=h\frac{n_1}{E_1}=h\frac{n_2}{E_2}$ כאשר n_1 ו- n_2 מספרים טבעיים ו- $h=2\pi\hbar$ קבוע פלאנק . מכיוון ש- $E_2=4E_1$ נקבל: $4n_1=n_2$. הפעם הראשונה היא אם כן כאשר $n_1=1$ ו- $n_2=4$ ואז: $t=\frac{h}{E_1}=\frac{4\mu L^2}{\hbar\pi}$.

ה. 20 נק' מהו ערך התצפית לאנרגיה?

$$\langle E\rangle=\sum_n P(E_n)E_n=E_1\frac{1}{4}+E_2\frac{3}{4}=E_1\frac{1}{4}+4E_1\frac{3}{4}=\frac{13}{4}E_1=\frac{13\hbar^2\pi^2}{8\mu L^2}$$

2. במערכת כלשהי, מבצעים מדידה של גודל פיזיקלי A ומתקבלת התוצאה α.

א. (40 נק') הסבר מהו אופרטור הרמיטי ודון בקצרה בתכונותיו (אין צורך להוכיח). האם האופרטור $\hat{A}$ המייצג את המדידה של הגודל A הוא הרמיטי? הסבר.

אופ' הרמיטי מקיים לכל שתי פונקציות $\psi(x)$ $\phi(x)$ את השוויון הבא:

$$\left[\int \phi(x)^*\hat{A}\psi(x)\,dx\right]^*=\int \psi(x)^*\hat{A}\phi(x)\,dx$$

לפי אחת האכסיומות, כל גודל מדיד מתאים לאופרטור הרמיטי. אכסיומה זו ניקבעה כי ניתן להוכיח שערכיו העצמיים של אופרטור הרמיטי ממשיים. כל ערך עצמי הינו תוצאת מדידה אפשרית.

ב. (20 נק') מה הקשר בין α לבין $\hat{A}$? הסבר. α הוא ערך עצמי של $\hat{A}$

ג. (40 נק') כעת מודדים גודל B של המערכת. ומתקבלת תוצאה β. אחרי-כן מודדים את A פעם נוספת ומתקבלת שוב התוצאה α. חוזרים ומודדים את B ושוב – אותה התוצאה β. וחוזר חלילה! נתון כי $\left[\hat{A},\hat{B}\right]\neq 0$ (כלומר, האופרטורים <u>אינם</u> חילופיים). האם הדבר בכלל ייתכן? אם לא – מדוע? אם כן -כיצד? הסבר בפרוטרוט.

למעשה, זה ייתכן (למרות, שמי שנתן תשובה עם הסבר טוב קיבל 36 נקודות גם אם טען שזה לא ייתכן). לאחר המדידה הראשונה נכנסת המערכת למצב עצמי $\psi(x)$ המתאים לערך העצמי α של $\hat{A}$. אם פונקציה זו היא גם פונ' עצמית של $\hat{B}$ כלומר: $\hat{A}\psi(x)=\alpha\psi(x)$ וגם $\hat{B}\psi(x)=\beta\psi(x)$ אז התופעה המתוארת בשאלה מתקיימת. דבר זה ייתכן גם אם $\left[\hat{A},\hat{B}\right]\neq 0$.

מתי זה יתכן? אם לאופרטור החילופיות הזה (למרות שאינו שווה ממש לאפס) יש פונקציה עצמית עם <u>ערך עצמי אפס</u>. ואמנם פונקציה זו היא $\psi(x)$ של למעלה כי:

$$\left[\hat{A},\hat{B}\right]\psi(x)=\hat{A}\hat{B}\psi(x)-\hat{B}\hat{A}\psi(x)=(\alpha\beta-\beta\alpha)\psi(x)=0\psi(x)$$

אולם, נשים לב כי כאשר: $\left[\hat{A},\hat{B}\right]=i\hbar$ כמו יחס החילוף של מקום ותנע, (או קבוע אחר) אז אין לאופרטור מצב עצמי עם ערך עצמי אפס (כי הוא קבוע שונה מאפס) ואז באמת לא יתכן המצב המתואר בשאלה.

סיכום: אם $\left[\hat{A},\hat{B}\right]=const\neq 0$ - המצב לא ייתכן, אך אם ל- $\left[\hat{A},\hat{B}\right]$ יש ערך עצמי אפס אז המצב ייתכן.

בהצלחה!