ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΠΑΤΡΩΝ
UNIVERSITY OF PATRAS
ΑΝΟΙΚΤΑ ακαδημαϊκά μαθήματα ΠΠ

ΦΥΣΙΚΟΧΗΜΕΙΑ Ι

Ασκήσεις

Ενότητα 4
Αρχές της Κβαντικής Μηχανικής

Δημήτρης Κονταρίδης
Αναπληρωτής Καθηγητής

Πολυτεχνική Σχολή
Τμήμα Χημικών Μηχανικών

Άσκηση 1

Να αποδειχθεί ότι το e^{ax} είναι ιδιοσυνάρτηση του τελεστή d/dx, και να βρεθεί η αντίστοιχη ιδιοτιμή.

(Τελεστής)(συνάρτηση) = (σταθερός παράγοντας) x (ίδια συνάρτηση)

$$\Omega\psi = \omega\psi$$

$$\Omega\psi = \frac{d}{dx}e^{ax} = ae^{ax} = a\psi$$

Άρα, πράγματι, το e^{ax} είναι ιδιοσυνάρτηση του τελεστή d/dx, και η αντίστοιχη ιδιοτιμή είναι a.

Αντίθετα, το e^{ax^2} δεν είναι ιδιοσυνάρτηση του τελεστή d/dx διότι, αν και το ψ εμφανίζεται στο δεξί μέρος της εξίσωσης, δεν πολλαπλασιάζεται με κάποια σταθερά, αλλά με μια μεταβλητή ($2ax$).

$$\Omega\psi = \frac{d}{dx}e^{ax^2} = 2axe^{ax^2} = \left(2ax\right)\psi$$

Άσκηση 2

Ποια είναι η γραμμική ορμή σωματιδίου που περιγράφεται από την παρακάτω κυματοσυνάρτηση (α) για B=0 και (β) για A=0;

$$\boxed{\psi = Ae^{ikx}} + Be^{-ikx} \qquad E = \frac{k^2\hbar^2}{2m} \qquad \Omega\psi = \omega\psi$$

i) **Εφαρμόζουμε τον τελεστή της ορμής στην ψ και ελέγχουμε το αποτέλεσμα.**

ii) **Αν αυτό είναι η αρχική κυματοσυνάρτηση ψ πολλαπλασιασμένη με μια σταθερά (ιδιοτιμή), τότε η σταθερά αυτή αποτελεί την τιμή του παρατηρήσιμου μεγέθους.**

(α) $$p_x\psi = \frac{\hbar}{i}\frac{d\psi}{dx} = \frac{\hbar}{i}A\frac{de^{ikx}}{dx} = \frac{\hbar}{i}A\left(ike^{ikx}\right) = \hbar k\left(Ae^{ikx}\right) = \hbar k\psi$$

Επομένως, πρόκειται για εξίσωση ιδιοτιμής με: $\boxed{p_x = +k\hbar}$

(β) $$p_x\psi = \frac{\hbar}{i}\frac{d\psi}{dx} = \frac{\hbar}{i}B\frac{de^{-ikx}}{dx} = \frac{\hbar}{i}B\left(-ik\right)e^{-ikx} = -\hbar k\left(Be^{-ikx}\right) = -\hbar k\psi$$

Επομένως, πρόκειται για εξίσωση ιδιοτιμής με: $\boxed{p_x = -k\hbar}$

Άσκηση 3

(α) Να δειχθεί ότι οι κυματοσυναρτήσεις $\sin x$ και $\sin 2x$ είναι ιδιοσυναρτήσεις του ερμητιανού τελεστή d^2/dx^2, με ιδιοτιμές -1 και -4, αντίστοιχα.

$$\Omega\psi = \omega\psi$$

$$\frac{d^2}{dx^2}\sin x = -\sin x$$

$$\frac{d^2}{dx^2}\sin 2x = -4\sin 2x$$

Γνωρίζουμε ότι

$$\frac{d}{dx}\sin(ax) = a\cos(ax)$$

$$\frac{d}{dx}\cos(ax) = -a\sin(ax)$$

Άσκηση 3

(α) Να δειχθεί ότι οι κυματοσυναρτήσεις $\sin x$ και $\sin 2x$ είναι ιδιοσυναρτήσεις του ερμητιανού τελεστή d^2/dx^2, με ιδιοτιμές -1 και -4, αντίστοιχα.

(β) Να δειχθεί ότι οι δύο κυματοσυναρτήσεις είναι ορθογώνιες.

$$\int \psi_i \psi_j d\tau = 0$$

Για $a=1$ και $b=2$, και επειδή $\sin 0 = 0$, $\sin 2\pi = 0$ και $\sin 6\pi = 0$, έχουμε:

$$\int_0^{2\pi} (\sin x)(\sin 2x)dx = 0$$

Άρα, οι δύο κυματοσυναρτήσεις είναι ορθογώνιες.

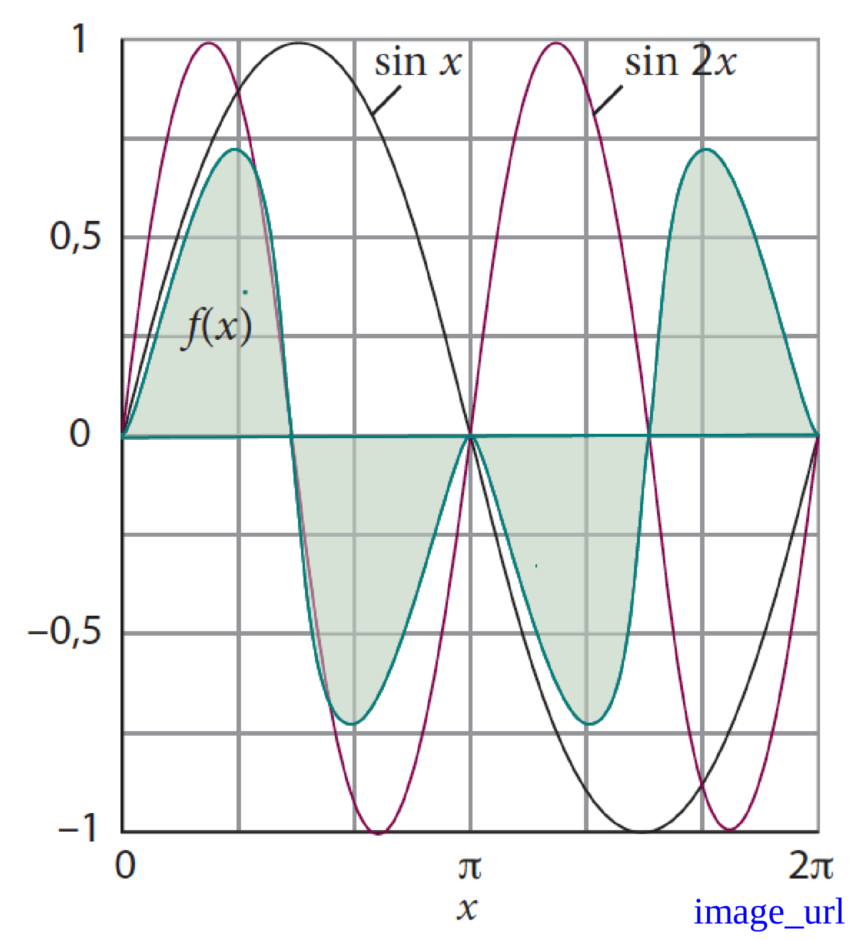
$$\int \sin(ax)\sin(bx)dx = \frac{\sin(a-b)x}{2(a-b)} - \frac{\sin(a+b)x}{2(a+b)} + constnt, \quad \text{εάν } a^2 \neq b^2$$

Άσκηση 3 – Ορθογωνικότητα

Όπως φαίνεται από το σχήμα, το ολοκλήρωμα της συνάρτησης

$$f(x) = \sin x \sin 2x$$

(γραμμοσκιασμένη επιφάνεια) είναι ίσο με μηδέν.



$$\int_0^{2\pi} (\sin x)(\sin 2x)dx = 0$$

Η συνάρτηση, και η τιμή του ολοκληρώματος, επαναλαμβάνονται κάθε 2π και, επομένως, η τιμή του ολοκληρώματος από $-\infty$ μέχρι $+\infty$ θα είναι επίσης μηδέν.

Άσκηση 4

Να υπολογιστεί η μέση τιμή της απόστασης ενός ηλεκτρονίου από τον πυρήνα στο άτομο του υδρογόνου, όταν αυτό βρίσκεται στη χαμηλότερη κατάσταση ενέργειας.

$$\psi = \left(\frac{1}{\pi a_o^{\ 3}}\right)^{1/2} e^{-r/a_0}$$

$$d\tau = r^2 \sin\theta\, dr\, d\theta\, d\phi$$

$$\langle r \rangle = \int \psi^* r \psi \boxed{d\tau} = \frac{1}{\pi a_0^3} \int_0^\infty r^3 e^{-2r/a_0} dr \int_0^\pi \sin\theta d\theta \int_0^{2\pi} d\phi$$

$$= \frac{1}{\pi a_0^3} \left[\frac{3!a_0^4}{2^4}\right] \times 2 \ \times 2\pi \Rightarrow \boxed{\langle r \rangle = \frac{3}{2}\alpha_0}$$

Επειδή α_0= 52,9 pm, $<r>$= 79,4 pm

Αυτό σημαίνει ότι, αν πραγματοποιήσουμε μεγάλο αριθμό μετρήσεων, η μέση τιμή τους θα είναι ίση με 79,4 pm.

$$\boxed{\int_0^\infty x^n e^{-ax} dx = \frac{n!}{a^{n+1}}}$$

Άσκηση 5

Έστω ότι η ταχύτητα ενός βλήματος μάζας 1,0 g είναι γνωστή με αβεβαιότητα 1 μm s^{-1}. Να υπολογιστεί η αβεβαιότητα για τη θέση του.

$$\Delta p \Delta q \geq \frac{1}{2}\hbar$$

$$\Delta p = m\Delta u \quad \Rightarrow \Delta q = \frac{\hbar}{2m\Delta u}$$

$$= \frac{1,055\times10^{-34}\,J\,s}{2\times\left(1,0\times10^{-3}\,kg\right)\times\left(1\times10^{-6}\,m\,s^{-1}\right)} = 5\times10^{-26}\,m$$

Η αβεβαιότητα είναι μηδανιμή, όπως και για όλα τα μακροσκοπικά σώματα.

Αν η μάζα του σώματος ήταν ίση με αυτή του ηλεκτρονίου, η αβεβαιότητα στη θέση θα ήταν Δ*q*= 60 m.

Άσκηση 6

(α) Να υπολογιστεί ο μεταθέτης των τελεστών ορμής και θέσης για μονοδιάστατο σύστημα.

$$p = -i\hbar \frac{d}{dx}$$

$$x = x$$

$$\left[A, B\right] = AB - BA$$

$$\left(px\right)\psi(x) = \left(-i\hbar \frac{d}{dx}\right) x\psi(x) = -i\hbar\psi(x) - i\hbar x \frac{d\psi}{dx}$$

$$\left(xp\right)\psi(x) = x\left(-i\hbar \frac{d}{dx}\right)\psi(x) = -i\hbar x \frac{d\psi}{dx}$$

$$\left[p, x\right] = px - xp \Rightarrow \boxed{\left[p, x\right] = -i\hbar}$$

Άσκηση 6

(α) Να υπολογιστεί ο μεταθέτης των τελεστών ορμής και θέσης για μονοδιάστατο σύστημα.

(β) Τι προβλέπει η αρχή της αβεβαιότητας για αυτό το ζεύγος φυσικών μεγεθών;

$$p = -i\hbar \frac{d}{dx}$$

$$x = x$$

$$\Delta A \cdot \Delta B \geq \frac{1}{2}\left|\left\langle \left[A, B\right] \right\rangle\right|$$

$$\Delta p \cdot \Delta x \geq \frac{1}{2}\left|-i\hbar\right| \Rightarrow \boxed{\Delta p \cdot \Delta x \geq \frac{\hbar}{2}}$$

$$\left[p, x\right] = p\,x - x\,p \Rightarrow \left[p, x\right] = -i\hbar$$

Άσκηση 7

Έστω ένα κβαντωμένο σύστημα τριών καταστάσεων που περιγράφεται από τις Φ_1, Φ_2, Φ_3, με αντίστοιχες ιδιοτιμές E_1= 5 eV, E_2= 10 eV, E_3= 20 eV.

Μια κανονικοποιημένη κυματοσυνάρτηση $\Phi_{ολ}(x)$ δίνεται από τη σχέση:

$$\Phi_{ολ} = 0,8\,\Phi_1 + 0,4472\,\Phi_2 + c\,\Phi_3$$

(α) Ποια είναι η μέση τιμή της ενέργειας;
(β) Ποια η πιθανότητα να βρεθεί σε κάποια μέτρηση η τιμή 5 eV;
(γ) Ποια η αντίστοιχη πιθανότητα για την τιμή 12 eV;

Όταν η κυματοσυνάρτηση μπορεί να γραφτεί ως γραμμικός συνδυασμός πολλών διαφορετικών ιδιοσυναρτήσεων …

$$\psi = c_1\psi_1 + c_2\psi_2 + \ldots = \sum_k c_k\psi_k$$

… η πιθανότητα να μετρηθεί μια συγκεκριμένη ιδιοτιμή σε μια σειρά παρατηρήσεων είναι:

$$P_k = |c_k|^2$$

Φ_3 — E_3= 20 eV

Φ_2 — E_2= 10 eV

Φ_1 — E_1= 5 eV

Άσκηση 7

Από την απαίτηση η ολική συνάρτηση να είναι κανονικοποιημένη, προκύπτει ότι:

$$P_{o\lambda.} = \sum_k P_k = \sum_k \left|c_k\right|^2 = 1$$

$$\Phi_{o\lambda} = 0,8\,\Phi_1 + 0,4472\,\Phi_2 + c\,\Phi_3$$

Μπορεί τώρα να υπολογιστεί η τιμή της σταθεράς c:

$$(0.8)^2 + (0.4472)^2 + c^2 = 1 \Rightarrow c = 0,4$$

Φ_3 $E_3 = 20$ eV

$$\psi = c_1\psi_1 + c_2\psi_2 + \ldots = \sum_k c_k\psi_k$$

Φ_2 $E_2 = 10$ eV

Φ_1 $E_1 = 5$ eV

… η πιθανότητα να μετρηθεί μια συγκεκριμένη ιδιοτιμή σε μια σειρά παρατηρήσεων είναι:

$$P_k = \left|c_k\right|^2$$

Άσκηση 7

$$\Phi_{o\lambda} = 0,8\,\Phi_1 + 0,4472\,\Phi_2 + 0,4\,\Phi_3$$

$$P_{o\lambda.} = \sum_k P_k = \sum_k |c_k|^2 = 1$$

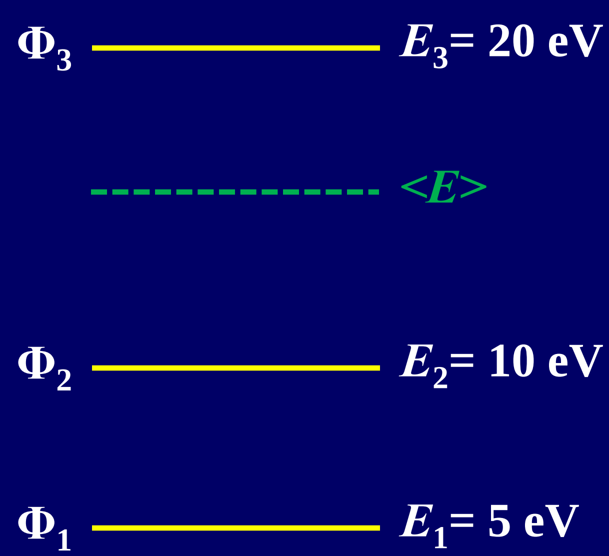
(α) Ποια είναι η μέση τιμή της ενέργειας;
(β) Ποια η πιθανότητα να βρεθεί σε κάποια μέτρηση η τιμή 5 eV;
(γ) Ποια η αντίστοιχη πιθανότητα για την τιμή 12 eV;

(α) $\langle E \rangle = \sum_k P_k E_k = (0.8)^2 \times 5 + (0.4472)^2 \times 10 + (0.4)^2 \times 20 \Rightarrow \langle E \rangle = 15.43 \text{ eV}$

(β) $P_1 = |c_1|^2 = (0.8)^2 = 0.64$ (64%)

(γ) $P_{E=12\text{ eV}} = 0$

Η τιμή E= 12 eV δεν αποτελεί ιδιοτιμή καμιάς από τις ιδιοσυναρτήσεις που συνεισφέρουν στην ολική κυματοσυνάρτηση.



Άλυτες Ασκήσεις

Εξετάστε ποιες από τις ακόλουθες συναρτήσεις αποτελούν ιδιοσυναρτήσεις του τελεστή $A=d^2/dx^2$

(α) e^x (β) x^2 (γ) $\sin x$ (δ) $\cos x + \sin x$

Δείξτε ότι η συνάρτηση $f=(\cos ax)(\cos by)(\cos cz)$ είναι μια ιδιοσυνάρτηση του Λαπλασιανού τελεστή $\nabla^2=\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}$ και προσδιορίστε την ιδιοτιμή της.

Άλυτες Ασκήσεις

Δίνεται η κατάσταση υπέρθεσης $\psi = N\left(\psi_1 + 2\psi_2 + \psi_3\right)$

όπου ψ_1, ψ_2, ψ_3 κανονικοποιημένες ιδιοσυναρτήσεις κάποιου φυσικού μεγέθους A με ιδιοτιμές

α_1= -1 α_2= 0 α_3= 1

(α) Να βρεθεί ο συντελεστής κανονικοποίησης, N.

(β) Να υπολογιστούν η μέση τιμή και η αβεβαιότητα του μεγέθους Α.

<u>Σημείωση</u>: Αβεβαιότητα ή διασπορά του φυσικού μεγέθους που αντιστοιχεί στον τελεστή T ονομάζεται η ποσότητα

$$\Delta T = \sqrt{\left\langle T^2 \right\rangle - \left\langle T \right\rangle^2}$$

Η τιμή του $<T^2>$ υπολογίζεται με εφαρμογή του τύπου της μέσης τιμής για τον τελεστή T^2.

Χρηματοδότηση

- Το παρόν εκπαιδευτικό υλικό έχει αναπτυχθεί στο πλαίσιο του εκπαιδευτικού έργου του διδάσκοντα.
- Το έργο «**Ανοικτά Ακαδημαϊκά Μαθήματα στο Πανεπιστήμιο Αθηνών**» έχει χρηματοδοτήσει μόνο την αναδιαμόρφωση του εκπαιδευτικού υλικού.
- Το έργο υλοποιείται στο πλαίσιο του Επιχειρησιακού Προγράμματος «Εκπαίδευση και Δια Βίου Μάθηση» και συγχρηματοδοτείται από την Ευρωπαϊκή Ένωση (Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο) και από εθνικούς πόρους.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Σημείωμα Ιστορικού εκδόσεων έργου

Το παρόν έργο αποτελεί την έκδοση 1.0.0.

Σημείωμα αναφοράς

Copyright Πανεπιστήμιο Πατρών. Αναπληρωτής Καθηγητής, Δημήτρης Κονταρίδης. «Φυσικοχημεία Ι». Έκδοση: 1.0. Πάτρα 2015.

Διαθέσιμο από τη δικτυακή διεύθυνση:

https://eclass.upatras.gr/courses/CMNG2172/

Σημείωμα αδειοδότησης