

מכניקה קוונטית של אטומים

פרק 9 - חלקיקים זהים

תוכן העניינים

1. הרצאות ותרגילים.....1

חלקיקים זהים

פונקציית הגל של חלקיקים זהים

רקע תיאורטי

פונקציית גל של שני חלקיקים

$$P(a \leq x_1 \leq b, c \leq x_2 \leq d) = \int_c^d \int_a^b |\Psi(x_1, x_2, t)|^2 dx_1 dx_2$$

ההמילטוניאן שח המערכת צריך להיות

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_1} \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} - \frac{\hbar^2}{2m_2} \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + V(x_1, x_2, t)$$

אם הפוטנציאל לא תלוי בזמן אז

$$\Psi(x_1, x_2, t) = \psi(x_1, x_2) e^{-i \frac{E}{\hbar} t}$$

עבור שני חלקיקים הנמצאים במצבים $\psi_a(x)$ ו- $\psi_b(x)$ אורתונורמליים, פונקציית הגל היא:

$$\psi(x_1, x_2) = \psi_a(x_1) \psi_b(x_2) \text{ אז}$$

אם החלקיקים הם בוזונים / פרמיונים זהים אז פונקציית הגל צריכה להיות סימטרית / אנטי-סימטרית **להחלפה של החלקיקים** בהתאמה.

המבנה של פונקציית גל מרחבית סימטרית (סימן פלוס) / אנטי סימטרית (סימן מינוס):

$$\Psi_{\pm}(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_a(x_1) \psi_b(x_2) \pm \psi_a(x_2) \psi_b(x_1)]$$

שימו לב שפונקציית הגל הכללית צריכה לקיים את תנאי הסימטריה ובאופן כללי צריך להתחשב גם בספין.

שאלות

1 פונקציית הגל של בוזונים ופרמיונים והסבר לעיקרון האיסור של פאולי

הוכיחו את הטענה כי אם $|\Psi(x_1, x_2)|^2 = |\Psi(x_2, x_1)|^2$, אז $\Psi(x_1, x_2) = \pm \Psi(x_2, x_1)$.

הדרכה: הניחו מקרה כללי שבו $\Psi(x_1, x_2) = \alpha \psi_a(x_1) \psi_b(x_2) + \beta \psi_a(x_2) \psi_b(x_1)$ ו- $\Psi(x_1, x_2) = \gamma \Psi(x_2, x_1)$, כאשר $|\gamma| = 1$.

2 קבוע הנרמול

א. נניח כי $\psi_a(x)$ ו- $\psi_b(x)$ הן פונקציות אורתונורמליות שהמכפלה הפנימית שלהם מתאפסת.
מצאו את קבוע הנרמול A של פונקציית הגל הכללית.
ב. חזרו על סעיף א' עבור המקרה שבו $\psi_a(x) = \psi_b(x)$ (כמובן שמקרה זה תקף רק לבוזונים).

3 פונקציית גל של 3 חלקיקים

הניחו שישנם שלושה חלקיקים: אחד במצב $\psi_a(x)$, השני במצב $\psi_b(x)$, והשלישי במצב $\psi_c(x)$. הניחו גם שכל הפונקציות אורתונורמליות.
מצאו פונקציית גל המתארת את מערכת שלושת החלקיקים עבור המקרים הבאים:
א. החלקיקים שונים.
ב. החלקיקים הם בוזונים זהים.
ג. החלקיקים הם פרמיונים זהים (רמז: השתמשו בדטרמיננטת סלייטר).

4 שני חלקיקים בבור פוטנציאל

שני חלקיקים בעלי מסה m נמצאים בבור פוטנציאל ברוחב l . הניחו כי אין אינטראקציה בין החלקיקים.
מצאו את פונקציית הגל והאנרגיות של מצב הייסוד והמצב המעורר הראשון, וציינו אם יש ניוון באנרגיה עבור כל אחד מהמצבים הבאים:
א. החלקיקים שונים.
ב. החלקיקים הם בוזונים זהים.
ג. החלקיקים הם פרמיונים זהים.
ד. רשמו את ההמילטוניאן של המערכת והראו כי פונקציות הגל של סעיף ג' הן אכן פונקציות עצמיות עם הערכים העצמיים המתאימים.

פונקציית הגל של חלקיק יחיד בבור פוטנציאל היא $\phi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{l}} \sin\left(\frac{\pi n}{l} x\right)$

והאנרגיה היא $E_n = \alpha n^2$, כאשר $\alpha = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ml^2}$.

תשובות סופיות

1) שאלת הוכחה.

2) א. $\frac{1}{\sqrt{2}}$ ב. $\frac{1}{2}$

3) א. $\psi(x_1, x_2, x_3) = \psi_a(x_1)\psi_b(x_2)\psi_c(x_3)$

ב.
$$\psi(x_1, x_2, x_3) = \frac{1}{\sqrt{6}} \left[\begin{aligned} &\psi_a(x_1)\psi_b(x_2)\psi_c(x_3) + \psi_a(x_1)\psi_b(x_3)\psi_c(x_2) + \\ &\psi_a(x_2)\psi_b(x_1)\psi_c(x_3) + \psi_a(x_3)\psi_b(x_1)\psi_c(x_2) + \\ &\psi_a(x_3)\psi_b(x_2)\psi_c(x_1) + \psi_a(x_2)\psi_b(x_3)\psi_c(x_1) \end{aligned} \right]$$

ג.
$$\begin{aligned} &\psi_a(x_1)\psi_b(x_2)\psi_c(x_3) + \psi_b(x_1)\psi_c(x_2)\psi_1(x_3) + \psi_a(x_1)\psi_c(x_2)\psi_b(x_3) + \\ &\psi_b(x_1)\psi_a(x_2)\psi_c(x_3) + \psi_c(x_1)\psi_b(x_2)\psi_c(x_3) \end{aligned}$$

4) א. מצב ייסוד: $E = 2\alpha$; אין ניוון. $\psi(x_1, x_2) = \frac{2}{l} \sin\left(\frac{\pi}{l} x_1\right) \sin\left(\frac{\pi}{l} x_2\right)$

מצב מעורר ראשון: $E = 5\alpha$; ניוון 2. $\psi_{12}(x_1, x_2) = \frac{2}{l} \sin\left(\frac{\pi}{l} x_1\right) \sin\left(\frac{2\pi}{l} x_2\right)$

$\psi_{21}(x_1, x_2) = \frac{2}{l} \sin\left(\frac{2\pi}{l} x_1\right) \sin\left(\frac{\pi}{l} x_2\right)$

ב. מצב ייסוד: זהה לסעיף א'.

מצב מעורר ראשון: $E = 5\alpha$; אין ניוון.

$$\psi(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\frac{2}{l} \sin\left(\frac{\pi}{l} x_1\right) \sin\left(\frac{2\pi}{l} x_2\right) + \frac{2}{l} \sin\left(\frac{\pi}{l} x_2\right) \sin\left(\frac{2\pi}{l} x_1\right) \right]$$

ג. מצב ייסוד: $E = 5\alpha$; אין ניוון.

$$\psi(x_1, x_2) = \frac{2}{l} \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\sin\left(\frac{\pi}{l} x_1\right) \sin\left(\frac{2\pi}{l} x_2\right) - \sin\left(\frac{\pi}{l} x_2\right) \sin\left(\frac{2\pi}{l} x_1\right) \right]$$

מצב מעורר ראשון: $E = 10\alpha$; אין ניוון.

$$\psi(x_1, x_2) = \frac{2}{l} \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\sin\left(\frac{\pi}{l} x_1\right) \sin\left(\frac{3\pi}{l} x_2\right) - \sin\left(\frac{\pi}{l} x_2\right) \sin\left(\frac{3\pi}{l} x_1\right) \right]$$

ד.
$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + V(x_1, x_2)$$

$$V(x_1, x_2) = \begin{cases} 0 & 0 \leq x_1 l \text{ and } 0 \leq x_2 \leq l \\ \infty & \text{else} \end{cases}$$

כוח ההחלפה – Exchange Forces

רקע תיאורטי

ריבוע המרחק הממוצע של שני חלקיקים שונים

$$\langle \Delta x^2 \rangle = \langle (x_1 - x_2)^2 \rangle = \langle x^2 \rangle_a - 2 \langle x \rangle_a \langle x \rangle_b$$

$$\langle x \rangle_a = \int x |\psi_a(x)|^2 dx$$

ריבוע המרחק הממוצע של חלקיקים עם פונקציה מרחבית סימטרית / אנטי סימטרית

$$\langle \Delta x^2 \rangle_{\pm} = \langle \Delta x^2 \rangle_d \mp 2 |\langle x \rangle_{ab}|^2$$

$$\langle x \rangle_{ab} = \int \psi_a(x) \psi_b(x) dx$$

קשר קוולנטי

קשר קוולנטי נוצר כאשר יש אלקטרונים במצב ספין אנטי-סימטרי (עבור שני אלקטרונים זהו מצב הסינגלט). מצב הספין האנטי-סימטרי מאלץ את פונקציית הגל המרחבית של האלקטרונים להיות סימטרית ולקרב בין האלקטרונים. המטען העודף של האלקטרונים כשהם מתקרבים מושך את הגרעינים של האטומים ויוצר את הקשר.