

Задача 2. Кот Шредингера и химия

Решение

1. Вклад всех орбиталей одинаковый, следовательно $|c_1|^2 = |c_2|^2 = |c_3|^2 = |c_4|^2 = 1/4$, так как сумма всех квадратов равна 1. Следовательно, $|c_1| = |c_2| = |c_3| = |c_4| = 1/2$.

2. Вероятность нахождения в определенном состоянии равна квадрату соответствующего коэффициента в разложении полной волновой функции:

$$p_a = \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \right)^2 = \frac{1}{2}.$$

Этот результат достаточно очевиден, так как оба атома водорода в ионе H_2^+ эквивалентны.

3. По условию, вероятность оказаться в ионном состоянии равна 17%:

$$|c_{\text{ион}}|^2 = 0.17,$$

откуда $|c_{\text{ион}}| = \sqrt{0.17} \approx 0.41$. Аналогично, $|c_{\text{ков}}| = \sqrt{0.83} \approx 0.91$.

4. Вклад кекулевских структур равен сумме квадратов коэффициентов при соответствующих волновых функциях:

$$P_{\text{Кекуле}} = \left(\sqrt{\frac{2}{5}} \right)^2 + \left(\sqrt{\frac{2}{5}} \right)^2 = \frac{4}{5},$$

то есть в данном состоянии бензол на 80% состоит из кекулевских структур, а на 20% – из дьюаровских.

5.

$$\Psi(x, t) = c_1(t)\Psi_1(x) + c_2(t)\Psi_2(x)$$

$c_1(t)$, $c_2(t)$ – периодические функции времени, причем $c_1(0) = 1$, $c_1(\pi/\omega) = 0$, $c_2(0) = 0$, $c_2(\pi/\omega) = 1$. Для описания периодических зависимостей естественно использовать синус и косинус:

$$c_1(t) = \cos\left(\frac{\omega t}{2}\right), \quad c_2(t) = \sin\left(\frac{\omega t}{2}\right)$$

Через четверть периода, в момент времени $t = \pi/(2\omega)$, волновая функция будет представлять собой суперпозицию двух состояний с равными коэффициентами:

$$\Psi\left(x, \frac{\pi}{2\omega}\right) = \cos\left(\frac{\omega}{2} \frac{\pi}{2\omega}\right)\Psi_1(x) + \sin\left(\frac{\omega}{2} \frac{\pi}{2\omega}\right)\Psi_2(x) = \frac{1}{\sqrt{2}}\Psi_1(x) + \frac{1}{\sqrt{2}}\Psi_2(x)$$