

מועד ב' סמסטר ב' תשס"ז

27.8.07

אוניברסיטת תל אביב

הפקולטה למדעים מדויקים

ע"ש ריימונד ובברלי סאקלר

כימיה פיזיקלית 2

לתלמידי שנה ב', ביה"ס ל כימיה

מרצים: ד"ר יורם זלצר, ד"ר חיים דימנט

משך הבחינה 3 שעות.

מותר להכניס מחברות, רשימות, ספרים ומחשבוניס.

יש לענות על 3 מתוך 4 השאלות הבאות.

יש להסביר ולנמק את התשובות.

בסוף טופס הבחינה תמצאו נוסחאות שתסייענה לכם בפתרון.

1. מולקולה נמצאת במצב שפונקציית הגל המנורמלת שלו היא:

$$\psi(r, \theta, \varphi) = f(r) \sqrt{\frac{3}{8\pi}} (\cos \theta + \sin \theta \cos \varphi)$$

כאשר $f(r)$ היא פונקציה כלשהי של הקואורדינטה הרדיאלית r בלבד.

א. האם המצב הנתון הוא מצב עצמי של ריבוע התנע הזויתי \hat{L}^2 ? אם כן, מהו הערך העצמי המתאים? אם לא, הציגו את המצב כקומבינציה לינארית של מצבים עצמיים של \hat{L}^2 . (8 נקודות)

ב. האם המצב הנתון הוא מצב עצמי של התנע הזויתי בכיוון z , \hat{L}_z ? אם כן, מהו הערך העצמי המתאים? אם לא, הציגו את המצב כקומבינציה לינארית של מצבים עצמיים של \hat{L}_z . (8 נקודות)

ג. מהו ערך התצפית של \hat{L}^2 ? (5 נקודות)

ד. מהו ערך התצפית של \hat{L}_z ? (6 נקודות)

ה. חשבו את ההסתברויות למדוד למולקולה:

$$L^2 = 0 \quad (i)$$

$$L_z = 0 \quad (ii)$$

$$L_z = -\hbar \quad (iii)$$

(9 נקודות)

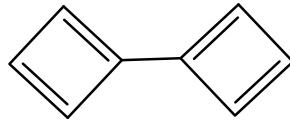
2. חלקיק בעל מסה m נמצא בקופסא חד-מימדית באורך a . החלקיק נמצא במצב שפונקצית הגל המנורמלת שלו היא:

$$\psi(x) = \left(\frac{30}{a^5}\right)^{1/2} x(a-x), \quad 0 \leq x \leq a$$

מבצעים מדידות של אנרגית החלקיק E .

- אילו ערכי אנרגיה ניתן לקבל במדידות אלה (עקרונית, ביטוי ללא חישוב)? (5 נקודות)
- מהו ערך התצפית של האנרגיה? מהו היחס בינו לבין אנרגית רמת היסוד (תשובה מספרית)? (10 נקודות)
- ג. חשבו את התפלגות המדידות, כלומר, את ההסתברות למדוד כל אחד מערכי האנרגיה שצינתם בסעיף א'. (15 נקודות)
- ד. מהי ההסתברות למדוד את אנרגית רמת היסוד (תשובה מספרית)? הסבירו את משמעות התוצאה הזו לאור תוצאת סעיף ב'. (5 נקודות)

3. ברצוננו לבצע חישוב Hückel על bicyclobutadiene:



- א. רשמו מהי הדטרמיננטה הסקולארית על פי Hückel של מולקולה זו. (10 נקודות)
 - ב. על מנת לבצע חישוב מקורב של המולקולה נניח כי היא נוצרת מעירבוב אורביטלים של שתי מולקולות cyclobutadiene. ראשית עלינו לחשב את האורביטלים של מולקולה זו. רשמו את הדטרמיננטה הסקולארית על פי Hückel של המולקולה ופתרו אותה באופן מלא לקבלת רמות האנרגיה ולקבלת האורביטלים. ציירו את האורביטלים המתקבלים בצורה סכמטית. (15 נקודות)
 - ג. על מנת לחשב את סדר הרמות ב-bicyclobutadiene נניח את ההנחות הבאות:
 - (i) כל אורביטל ב-cyclobutadiene מסוגל להתערבב רק עם אורביטל בעל אנרגיה זהה ב-cyclobutadiene השני.
 - (ii) בעירבוב יש להתחשב בצורת האורביטל על מנת להעריך את ערכו של אינטגרל הרזוננס β . לצורך החישוב הניחו שערכו יכול להיות רק 0 או β' (שערכו קטן מערכו של β מסעיף ב'), קרי, החפיפה בין האורביטלים המולקולריים על שתי הטבעות קטנה מהחפיפה בין האורביטלים האטומיים).
- העריכו את סדר רמות האנרגיה של bicyclobutadiene. (10 נקודות).

.4

א. נניח פונקציית גל מקורבת עבור חלקיק בקופסא חד-מימדית מהצורה הבאה:

$$F(x) = x, \quad 0 \leq x \leq L/2$$

$$F(x) = L - x, \quad L/2 \leq x \leq L$$

אורך הקופסא הוא L .

שימו לב שהנגזרת הראשונה של פונקציה זו אינה רציפה ב- $L/2$, ולכן העזרו בביטוי הבא:

$$\int_0^L f f'' dx = - \int_0^L (f')^2 dx = - \int_0^{L/2} (f')^2 dx - \int_{L/2}^L (f')^2 dx$$

על מנת לחשב את אנרגיית מצב היסוד של החלקיק. מהי השגיאה באחוזים לעומת הפתרון המדויק? (15 נקודות)

ב. נבחר פונקציה אחרת לתאר את אותו חלקיק:

$$\psi = \left(\frac{3}{L^3}\right)^{1/2} x$$

מהו ערכה של אנרגיית הוריאציה במקרה זה? השוו מול הערך האמיתי והסבירו את ההבדל. (20 נקודות).

בהצלחה!

נוסחאות עזר

$$\cos \alpha = \frac{1}{2}(e^{i\alpha} + e^{-i\alpha}), \quad \sin \alpha = \frac{1}{2i}(e^{i\alpha} - e^{-i\alpha})$$

$$\int dy y \sin(\alpha y) = \frac{\sin(\alpha y)}{\alpha^2} - \frac{y \cos(\alpha y)}{\alpha}$$

$$\int dy y^2 \sin(\alpha y) = \frac{2y \sin(\alpha y)}{\alpha^2} - \frac{(\alpha^2 y^2 - 2) \cos(\alpha y)}{\alpha^3}$$