

מועד אי סמסטר ב' תש"ע

אוניברסיטת תל אביב  
הפקולטה למדעים מדויקים  
ע"ש ריימונד וברלי סקלרלתלמידי שנה ב', ביה"ס ל כימיה  
מרצים: ד"ר עודד הוד, פרופ' ערן רבני

משך הבחינה 3 שעות.

מותר להכניס מחברות, רשימות ומחשבוניס.  
יש לענות **בפרוט** על כל השאלות (סך הנקודות 120).  
יש להסביר ולנמק את התשובות.

(1) המסה של כוכבי נויטרונים דומה למסת השמש אך קוטרם כ-10 ק"מ בלבד. הם מהווים מקור לשדות מגנטים אולטרא-חזקים (על פני הכוכב שדות חזקים פי  $10^{12}$  מהשדות המגנטים על כדה"א). בשאלה זו נדון במבנה האלקטרוני של אטום מימן המצויים בענן הבינכוכבי בנוכחות כוכב נויטרונים, כלומר בתנאים של שדות מגנטים חזקים. אופרטור אנרגיית האינטראקציה של האלקטרון עם שדה מגנטי בכיוון ציר  $z$  נתון על-ידי הנוסחה  $B_a \cdot V = -\frac{E_h}{2\hbar} B_a (\hat{L}_z + 2\hat{S}_z)$ . מספר חסר מימדים,  $\hat{S}_z$  אופרטור היטל התנע הזויתי על ציר  $z$ -ו  $\hat{L}_z$  אופרטור התנע הזויתי בכיוון  $z$ .

א) האם  $V$  חילופי עם המילטוניאן אטום המימן הרגיל? הוכיחו. (8 נק')

ב) קבלו ביטוי כללי לרמות האנרגיה של אלקטרון (העזרו בתכונה שהוכחתם בסעיף א, שימו לב שההמילטוניאן אלכסוני בבסיס של אטום המימן). (10 נק')

ג) נניח כעת כי  $B_a = \frac{7}{8}$ . אפיינו את מצב היסוד והמצב המעורר הראשון של אטום המימן המופרע: מה הם המספרים הקוונטים? מה הן האנרגיות? (12 נק')

(2) השתמשו במודל האנרגיה הפוטנציאלית של אלקטרון עודף באטום מהצורה  $V = -D \exp\left\{-\frac{r^2}{2\sigma^2}\right\}$ , כאשר  $r^2 = x^2 + y^2 + z^2$ ,  $D = 0.1 \text{ Rydberg}$ , ו- $\sigma = 5a_0$ , וענו על השאלות הבאות:

א) מהי אנרגיית מצב היסוד ופונקציית הגל של המצב הייסוד באוסצילטור הרמוני תלת מימדי בעל תדר  $\omega$  ומסת האלקטרון? (7 נק')

ב) כתבו ביטוי מקורב לאנרגיה הפוטנציאלית הנ"ל במונחים של אנרגיה פוטנציאלית הרמונית ומצאו את הקשר בין הקבועים  $D$  ו- $\sigma$  לבין  $\omega$ . (7 נק')

ג) תוך שימוש בעיקרון הוראיציה ובפונקציית מצב היסוד של אוסצילטור הרמוני תלת מימדי, מצאו ביטוי לאנרגיית מצב היסוד של אלקטרון עודף באטום. האם האנרגיה שמצאתם גדולה או קטנה מהערך המדויק? (16 נק')

$$\text{נתון: } \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dy \int_{-\infty}^{\infty} dz \exp\{-ar^2\} = \left(\frac{\pi}{a}\right)^{\frac{3}{2}}$$

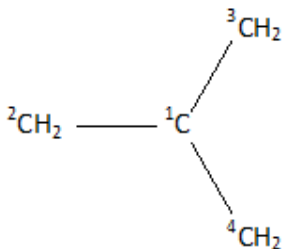
(3) נתונה המולקולה טרי-מתילן-מתאן. ענו על השאלות הבאות:

א) כתבו את הדטרמיננטה הסקולארית בקירוב Huckel עבור מולקולה זו. (5 נק')

ב) מצאו את רמות האנרגיה המולקולאריות וציירו את תרשימי הרמות עבור המולקולה בקירוב זה. מהי הקונפיגורציה הספינית במצב היסוד? (7 נק')

ג) במונחי הפרמטרים של מודל היקל (אינטגרלי הרזוננס) מצאו מהי אנרגיית מצב הייסוד של המולקולה, מהי אנרגיית הייצוב ומהי אנרגיית הדה-לוקאליזציה. (5 נק')

ד) ציירו באופן סכמטי את האורביטלים המולקולאריים המתקבלים. (5 נק')



ה) איזה איזומר יציב יותר, בוטאדיאן או טרי-מתילן-מתאן? נתונה תערובת של שני האיזומרים האם ניתן להבחין ביניהם באמצעות שדה מגנטי חיצוני? הסבירו. (8 נק')  
(ניתן להשתמש בתוצאות שנתקבלו בכיתה עבור בוטאדיאן).

4) משטח הפוטנציאל במצב היסוד של המולקולה הדו-אטומית ההומונוקלארית  $A_2$  ניתן בקירוב ע"י המשוואה  $V(r) = \alpha e^{-\beta r} (1 - \beta r)$ , כאשר  $r$  הינו המרחק הבין-גרעיני והפרמטרים  $\alpha$  ו- $\beta$  חיוביים.

א. חשבו את ביטוי הכוח הקלאסי הפועל על הגרעינים  $A$  במולקולה במרחק בין גרעיני  $r$ . (7 נק')  
ב. חשבו את אורך הקשר של המולקולה? מהו הכוח הפועל על הגרעינים במרחק זה? מהי אנרגיית הקשר של המולקולה? לאור תשובותיכם הסבירו את משמעות הפרמטרים  $\alpha$  ו- $\beta$ . (7 נק')

ג. השתמשו בפיתוח טיילור סביב מרחק שיווי המשקל בכדי לקרב את הפוטנציאל לביטוי הרמוני:  $V(r) \approx V_0 + \frac{1}{2}k(r - r_0)^2$ . בטאו את  $V_0$  ואת  $k$  כפונקציה של  $\alpha$  ו- $\beta$ . (9 נק')  
ד. בטמפרטורת האפס המוחלט מה תהיה האנרגיה הויברציונית של המולקולה? מה תהיה אנרגיית הפוטון המינימאלית הדרושה בכדי לבצע עירור ויברציוני של המולקולה? בטאו תשובתכם באמצעות  $\alpha$ ,  $\beta$  ו- $\mu$  המסה המצומצמת. (7 נק')

*בהצלחה!*

$$\begin{array}{lll}
 m_e = 9.1094 \cdot 10^{-31} \text{ kg} & e = 1.6022 \cdot 10^{-19} \text{ C} & \hbar = 1.0546 \cdot 10^{-34} \text{ J sec} \\
 4\pi\epsilon_0 = 1.1127 \cdot 10^{-10} \text{ C}^2 \text{ N}^{-1} \text{ m}^{-2} & N = 6.0221 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1} & m_a = 1.6606 \cdot 10^{-27} \text{ kg} \\
 c = 2.9979 \cdot 10^8 \text{ m sec}^{-1} & & k_B = 1.3807 \cdot 10^{-23} \text{ JK}^{-1} = 0.695 \text{ cm}^{-1} \text{ K}^{-1}
 \end{array}$$