

מועד א' סמסטר ב' תשע"א

אוניברסיטת תל אביב  
הפקולטה למדעים מדויקים  
ע"ש ריימונד וברלי סקלר

לתלמידי שנה ב', ביה"ס לכימיה  
מרצה: ד"ר עודד הוד

משך הבחינה 3 שעות.

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

(1) נתון ההמילטוניאן הבא (ביחידות אטומיות) המתאר אוסילטור הרמוני

$$\hat{H} = -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} x^2 + \frac{1}{5} x$$

$$\hat{H}_0 = -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} x^2 \quad \text{עם הפרעה לינארית } \hat{V} = \frac{1}{5} x \quad \text{כאשר } k = m = 1$$

(א) רישמו (אין צורך לבצע פיתוח) את האנרגיות העצמיות  $(\epsilon_0^{(0)}, \epsilon_1^{(0)})$  ופונקציות הגל העצמיות המנורמלות

$$\text{של שני המצבים הנמוכים ביותר של } \hat{H}_0 \text{ (5 נק')}$$

(ב) רישמו את ההצגה המטריציאלי של ההמילטוניאן המלא,  $\hat{H}$ , בבסיס שתי הפונקציות העצמיות של  $\hat{H}_0$

שרשמתם בסעיף א'. מהי מטריצת החפיפה המתאימה (רמז: זיכרו כי  $\hat{H}$  הרמיטי). (7 נק')

$$\int_{-\infty}^{\infty} x^{2n} e^{-ax^2} dx = \frac{1 \cdot 3 \cdot 5 \cdot \dots \cdot (2n+1)}{2^n a^n (2n+1)} \sqrt{\frac{\pi}{a}}; n = 0, 1, 2, 3, \dots$$

ניתן להשתמש באינטגרלים הבאים:

$$\int_{-\infty}^{\infty} x^{2n+1} e^{-ax^2} dx = 0; n = 0, 1, 2, 3, \dots$$

(ג) עבור פונקציית וריאציה מהצורה  $\phi = c_0 \psi_0^{(0)} + c_1 \psi_1^{(0)}$  מהי המשוואה הסקולארית המתקבלת מתוך

ביצוע וריאציה לינארית של ביטוי האנרגיה הוריאציונית לפי המקדמים  $c_0$  ו-  $c_1$ . פיתרו את המשוואה

הסקולארית לקבלת האנרגיות העצמיות הוריאציוניות. (5 נק')

(ד) חשבו את התיקונים מסדר ראשון בתורת הפרעות עבור  $\epsilon_0^{(0)}$  ו-  $\epsilon_1^{(0)}$ . (7 נק')

(ה) הערכים העצמיים המדויקים של ההמילטוניאן הם  $\epsilon_0 = \epsilon_0^{(0)} - \frac{1}{50}$  ו-  $\epsilon_1 = \epsilon_1^{(0)} - \frac{1}{50}$ . איזה מן

הקירובים שביצעתם מתאר טוב יותר את מצב הייסוד ואת המצב המעורר הראשון? חשבו את אנרגיית העירור הראשונה לפי תורת הוריאציה ולפי תורת הפרעות. השוו את התוצאה לאנרגיית העירור

המתקבלת עבור  $\hat{H}_0$ . (6 נק')

(2) חלקיק בעל מסה  $m$  נתון תחת השפעה של פוטנציאל חד-ממדי  $V(x)$ . החלקיק נמצא במצב עצמי המתואר

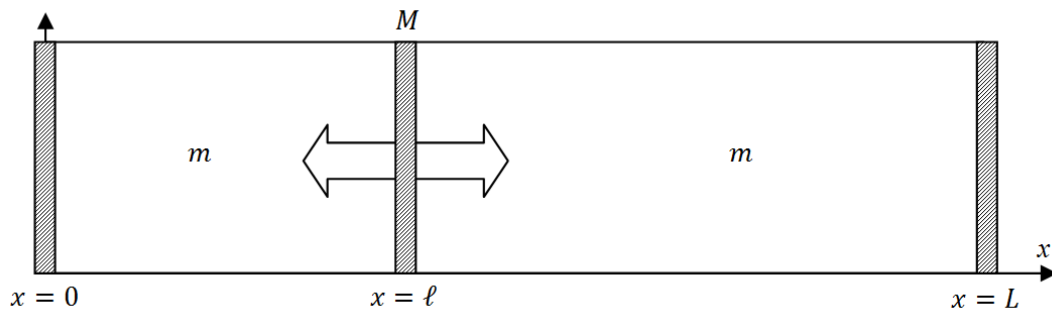
$$\text{ע"י הפונקציה הבאה } \psi(x) = \left(\frac{1}{\pi}\right)^{1/2} \frac{\alpha}{x^2 + \alpha^2} \quad \text{כאשר } \alpha \text{ הינו מספר ממשי חיובי.}$$

(א) איירו את פונקציית הגל. מהו המקום המסתבר ביותר למציאת החלקיק במצב בו הוא נתון? מהו ערך התצפית של אופרטור המקום במצב זה? האם החלקיק נמצא במצב הייסוד? הסבירו. (רמז: אין צורך לבצע חישובים בסעיף זה) (5 נק')

(ב) רישמו את משוואת שרדינגר הסטציונארית עבור החלקיק. (5 נק')

(ג) מתוך הנתונים שבשאלה ניתן למצוא את הפוטנציאל הפועל על החלקיק עד כדי קבוע. העזרו בסעיף ב' בכדי למצוא ביטוי מפורש עבור הפוטנציאל. מהי המשמעות הפיזיקאלית של הקבוע? (10 נק')

(ד) מסיתים את הפוטנציאל להיות ממורכז סביב הנקודה  $x_0$ . מהי פונקציית הגל המתארת את מצב הייסוד של המערכת. כיצד השתנתה האנרגיה של החלקיק. (10 נק')



(3) נתון קיר נייד בעל מסה  $M$  הנמצא במיקום  $0 < \ell < L$  אשר יכול לנוע לאורך ציר  $x$  (ראו איור). משני צידי המערכת ממוקמים קירות נייחים, ב-  $x = 0$  וב-  $x = L$ . בין כל שני קירות נמצא חלקיק היכול לנוע במימד  $x$  בלבד ובעל מסה  $m \gg M$ .

(א) התייחסו לכל אחד מצידי התא כמערכת נפרדת. עבור כל אחד מן החלקיקים רישמו את ההמילטוניאנים המתאימים ( $\hat{H}_1$  משמאל ו-  $\hat{H}_2$  מימין), את תנאי השפה, את הפונקציות העצמיות, ואת האנרגיות המתקבלות. הניחו כי ניתן להתייחס אל הקיר כסטטי – הסבירו הנחה זו. (7 נק')

(ב) השתמשו בתשובותיכם לסעיף א' בכדי לרשום את ההמילטוניאן של המערכת השלמה. מהן הפונקציות העצמיות של ההמילטוניאן זה ומהן האנרגיות המתאימות של החלקיקים ב- $\ell$  כלשהו? **שימו לב**: מדובר בשני חלקיקים שונים אשר אינם יכולים לחצות את הקיר המרכזי. עבור פונקציית הגל של המערכת השלמה הניחו כי החלקיקים ניתנים להבחנה. (5 נק')

(ג) השתמשו בסעיף ב' בכדי לרשום את מצב היסוד הדו-חלקיקי ואת האנרגיה שלו, ב- $\ell$  כלשהו. (4 נק')

(ד) התייחסו לביטוי שחושב בסעיף ג' כפוטנציאל על גביו נע הקיר המרכזי. מיצאו את הערך  $\ell$  עבורו נמצא הקיר במצב שיווי המשקל. מהי אנרגיית מצב היסוד של המערכת כולה בשיווי משקל אם מתייחסים אל הקיר כקלאסי? (7 נק')

(ה) השתמשו בפיתוח טיילור מסדר שני עבור הפוטנציאל על גביו נע הקיר המרכזי בכדי לקרבו לפוטנציאל הרמוני סביב נקודת המינימום. באמצעות תוצאה זו, מיצאו את התיקון לאנרגיית מצב היסוד הקלאסית (אנרגיית האפס) כאשר מתייחסים לדרגת החופש של הקיר כקוונטית. (7 נק')

(4) לצבר האטומי  $\text{Na}_3$  שתי קונפיגורציות עיקריות אפשריות – לינארית וציקלית.

(א) רישמו את הקונפיגורציה האלקטרונית של אטום הנתון. אילו אורביטלים אטומיים ישמשו בקירוב Huckel של הצבר הנתון לצורך פרישת האורביטלים המולקולאריים? (5 נק')

(ב) עבור הקונפיגורציה הלינארית: (7 נק')

i. כתבו את הדטרמיננטה הסקולארית בקירוב Huckel.

ii. מצאו במפורש את רמות האנרגיה המולקולאריות וציירו את תרשימי הרמות עבור המולקולה בקירוב זה.

iii. ציירו את האורביטלים המולקולאריים המתאימים.

iv. מהי הקונפיגורציה הספינית במצב היסוד?

v. מהו הניוון (כולל ספין) במצב היסוד?

(ג) עבור הקונפיגורציה הציקלית: (7 נק')

i. כתבו את הדטרמיננטה הסקולארית בקירוב Huckel.

ii. הראו כי רמות האנרגיה המולקולאריות המתקבלות הינן  $E = \alpha + 2\beta$  ו-  $E = \alpha - \beta$ . מהו הניוון המתאים לכל רמה? ציירו את תרשימי הרמות עבור המולקולה בקירוב זה.

iii. ציירו את האורביטלים המולקולאריים המתאימים.

iv. מהי הקונפיגורציה הספינית במצב היסוד?

v. מהו הניוון (כולל ספין) במצב היסוד?

(ד) על-פי קירוב Huckel מיהו האיזומר היציב יותר עבור הצבר, הלינארי או הציקלי? מדוע? (5 נק')

(ה) עבור המצב המעורר בו לכל האלקטרונים אותו הספין איזה משני האיזומרים יציב יותר? (6 נק')

בהצלחה!