

מועד ב' סמסטר ב' תשע"א

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

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

משך הבחינה 3 שעות.

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

(1) נתונה פונקציית הוריאציה הבאה:

$$\psi(x) = \begin{cases} N(A^2 - x^2) & -A \leq x \leq A \\ 0 & \text{else} \end{cases}$$

(א) נרמלו את הפונקציה (קיבעו את מקדם הנרמול N). (5 נק')

(ב) מהו ערך התצפית של האנרגיה סביב פונקציית הוריאציה המנורמלת עבור חלקיק בקופסא חד-ממדית בגבולות $-A \leq x \leq A$? השוו לאנרגיית מצב הייסוד המדויקת וקיבעו האם מתקיים עקרון הוריאציה בבעיה זו? (10 נק')

(ג) עבור המילטוניאן המתאר אוסילטור הרמוני קוונטי $\left(\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} kx^2 \right)$ חשבו את

האנרגיה הוריאציונית כפונקציה של פרמטר הוריאציה, A . רמז: במהלך החישוב ניתן להיעזר בתוצאה שנתקבלה בסעיף ב'. (10 נק')

(ד) השתמשו בתוצאה של סעיף ג' ובעקרון הוריאציה בכדי למצוא את הערך האופטימאלי של A עבור אוסילטור הרמוני קוונטי. (5 נק')

(2) אלקטרון מצוי בבור פוטנציאל מהצורה $V(x) = -\text{sech}^2(x) = -\left(\frac{2}{e^x + e^{-x}}\right)^2$ (הפוטנציאל רשום

ביחידות אטומיות). נתונות הנגזרות הבאות:

$$\frac{d}{dx} [-\text{sech}^2(x)] = 8 \left[\frac{e^x - e^{-x}}{(e^x + e^{-x})^3} \right]; \quad \frac{d^2}{dx^2} [-\text{sech}^2(x)] = 8 \left[\frac{1}{(e^x + e^{-x})^2} - 3 \frac{(e^x - e^{-x})^2}{(e^x + e^{-x})^4} \right]$$

$$\frac{d^2}{dx^2} [\text{sech}(x)] = \frac{2}{e^x + e^{-x}} \left[\frac{2(e^x - e^{-x})^2}{(e^x + e^{-x})^2} - 1 \right]$$

(א) רישמו את משוואת שרדינגר עבור האלקטרון ביחידות אטומיות. (5 נק')

(ב) מהו הערך האסימפטוטי של הפוטנציאל בגבול בו $x \rightarrow \pm\infty$? באיזה ערך של המשתנה x מתקבל המינימום של הפוטנציאל? מהו המינימום המתקבל? (5 נק')

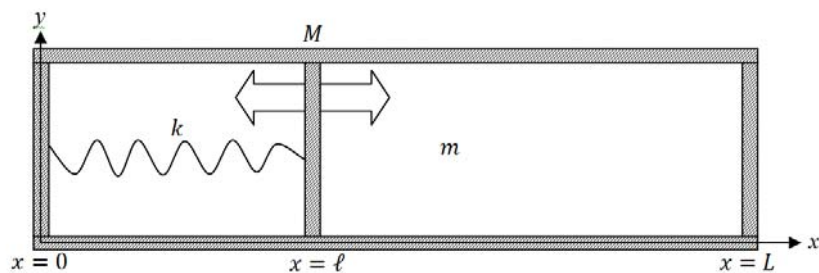
(ג) השתמשו בפיתוח טיילור מסדר שני עבור הפוטנציאל בכדי לקרבו לפוטנציאל הרמוני סביב נקודת המינימום. השתמשו בתוצאה זו ובתוצאות שנתקבלו בסעיף ב' בכדי לקרב את אנרגיית מצב הייסוד של האלקטרון. הישתמשו ביחידות אטומיות (12 נק')

(ד) הראו כי הפונקציה $\psi(x) = \frac{2}{e^x + e^{-x}}$ הינה עצמית להמילטוניאן. פונקציה זו מתארת את מצב

הייסוד של המערכת – נמקו מדוע. מהי אנרגיית מצב הייסוד המדויקת של המערכת? השוו את הערך המתקבל לתוצאה המקורבת שנתקבלה בסעיף ג' – האם הקירוב ההרמוני מתאר נאמנה את הפוטנציאל האמיתי באנרגיות נמוכות? (8 נק')

(3) נתון קיר נייד במסה M הנמצא במיקום $0 < \ell < L$ ויכול לנוע לאורך ציר x . בשני צידי המערכת ממוקמים קירות נייחים, ב- $x = 0$ וב- $x = L$. בין הקיר הנייד לקיר הימני נמצא חלקיק קוונטי היכול לנוע במימד x בלבד ובעל מסה $m \ll M$. בין הקיר הנייד לקיר השמאלי מחובר קפיץ קלאסי שקבועו k ואורך שיווי המשקל שלו הוא L . בדומה למה שנעשה בקירוב בורן-אופנהיימר, הניחו כי החלקיק רואה את הקיר כסטטי, וכי הקיר נע בשדה פוטנציאל הנוצר על ידי מצב היסוד של החלקיק ועל-ידי הקפיץ.

- (א) כתבו את ההמילטוניאן ואת תנאי השפה עבור החלקיק, ב- ℓ כלשהו. (5 נק')
 (ב) כתבו את הפונקציות העצמיות והאנרגיות של החלקיק ב- ℓ כלשהו (שימו לב כי החלקיק אינו יכול לחצות את הקיר המרכזי). (5 נק')
 (ג) רישמו במפורש את פונקציית הגל של מצב היסוד החלקיקי, את אנרגיית מצב היסוד החלקיקי ואת אנרגיית הקפיץ הקלאסי, ב- ℓ כלשהו. (5 נק')
 (ד) בהנחה שהקיר סטטי והחלקיק נמצא במצב הייסוד, מהי אנרגיית המערכת כולה (קפיץ+חלקיק) ב- ℓ כלשהו? התייחסו לאנרגיה זו כפוטנציאל אותו חווה הקיר וקיבעו מהו מיקום שיווי המשקל (ℓ_0) של הקיר במצב זה? מהי אנרגיית מצב היסוד של המערכת כולה (E_g) אם מתייחסים לתנועת הקיר כקלאסית? (8 נק')
 (ה) השתמשו בפיתוח טיילור בכדי לרשום קירוב הרמוני עבור הפוטנציאל אותו חווה הקיר. מהו התיקון לאנרגיית מצב היסוד בקירוב זה, כאשר מתייחסים לדרגת החופש של הקיר כקוונטית? (7 נק')



- (4) נתונה המולקולה הדו-אטומית הטריו-נוקלארית (Lithium Hydride) LiH.
 (א) על פי מודל אטום דמוי מימן מהי האנרגיה של מצב 1S של אטום המימן ומהי אנרגיית מצב 2S של אטום הליתיום? רישמו תשובותיכם ביחידות אטומיות. (5 נק')
 (ב) השתמשו בנתונים שקיבלתם בסעיף א' בכדי לרשום את המשוואה הסקולארית עבור המולקולה בקירוב Huckel. הניחו כי $\beta = \frac{\alpha_{1s}^H + \alpha_{2s}^{Li}}{2}$. (5 נק')
 (ג) מיצאו את רמות האנרגיה והאורביטלים המולקולאריים בקירוב Huckel עבור המולקולה. ציירו את דיאגרמת הרמות ואכלסו אותה באלקטרונים. איירו את האורביטלים המולקולאריים. (10 נק')
 (ד) עפ"י מודל היקל מהו המטען הגרעיני האפקטיבי על גבי האטומים השונים במצב הייסוד? (5 נק')
 (ה) עפ"י מודל היקל מהו המטען הגרעיני האפקטיבי על גבי האטומים השונים כאשר מעוררים את שני האלקטרונים לרמה המולקולארית השניה? (5 נק')

בהצלחה!

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