

כימיה פיזיקלית 2 – תרגיל מספר 3

חלקיק בקופסא

1. (34 נק') עבור חלקיק בקופסא חד-ממדית במצב הייסוד חשבו את הגדלים הבאים:
- ההסתברות למציאת החלקיק בצדה הימני של הקופסא.
 - ההסתברות למציאת החלקיק בשליש המרכזי של הקופסא.
 - המקום המסתבר ביותר למציאת החלקיק.
2. (33 נק') אלקטרון נע בבור פוטנציאל חד-ממדי בעל רוחב של 0.25nm וקירות אינסופיים.
- חשבו את שלושת רמות האנרגיה הראשונות של האלקטרון (השתמשו ביחידות של kJ/mol).
 - כאשר האלקטרון מבצע מעבר קרינתי מהרמה $n=2$ לרמה $n=1$ מהו אורך הגל של הפוטון הנפלט?
3. (33 נק') תיאור גס ביותר של אלקטרון באטום (או במולקולה) מתייחס אליו כחלקיק בקופסא חד ממדית אשר אורכה הנו מסדר הגודל של גודל המערכת. עבור אלקטרון בקופסא בעלת אורך של 1\AA חשבו את ההפרש בין האנרגיות של שתי הרמות הנמוכות ביותר. מהו אורך הגל של פוטון המעורר מעבר אנרגטי בין הרמות הללו? באיזה תחום בספקטרום האלקטרומגנטי נמצא אורך גל זה?

כימיה פיזיקלית 2 – תרגיל כיתה מספר 3

1. חשבו את הביטוי עבור רמות האנרגיה של חלקיק בקופסא חד ממדית באמצעות הביטוי עבור

$$\text{אורך גל דה-ברולי של החלקיק ותנאי השפה של הבעיה. } (E = \frac{n^2 h^2}{8mL^2}).$$

2. ניתן לקרב, באופן גס, את אלקטרוני ה- π במולקולה אורגנית שרשרתית מצומדת ע"י מודל של

אלקטרונים המוגבלים לנוע בקופסא שאורכה הוא כאורך השרשרת המצומדת. עפ"י עקרון פאולי

כל רמה אנרגטית ניתנת לאכלוס ע"י שני אלקטרונים בלבד (בעלי ספין הפוך). עבור בוטאדיאן

$\text{CH}_2=\text{CHCH}=\text{CH}_2$, הניחו אורך קופסא של 7\AA והשתמשו במודל הני"ל בכדי להעריך את אורך

הגל של פוטון הנבלע כאשר אלקטרון π מעורר מהרמה המאוכלסת הגבוהה ביותר

(Highest Occupied Molecular Orbital) לרמה הריקה הנמוכה ביותר

(Lowest Unoccupied Molecular Orbital). השוו לערך המדוד – 2.170\AA .

3. התייחסו לחלקיק בעל מספר קוונטי n הנע בקופסא חד ממדית בעלת אורך l . חשבו את

ההסתברות למצוא את החלקיק ברבע השמאלי של הקופסא. עבור איזה ערך של n ההסתברות זו

מקסימאלית? מהו הגבול של ההסתברות זו עבור $n \rightarrow \infty$? מהו העיקרון המודגם בשאלה זו?