

כימיה פיזיקלית 2 – תרגיל מספר 5

חלקיק בקופסא רב ממדית, חלקיק בטבעת, חלקיק על פני גליל

1. (25 נק') האם יתכן שבקופסא תלת מימדית בעלת אורכי צלעות שונים ($a \neq b \neq c$) יהיה ניוון לרמות האנרגיה? אם לא, הסבירו מדוע. אם כן, תנו דוגמא.

2. (25 נק') פונקצית הגל של חלקיק בקופסא דו מימדית סימטרית $\varphi(x, y)$ יכולה להרשם בקומבינציה

לינארית של הפונקציות העצמיות $\Psi_{n_x n_y}(x, y) = \frac{2}{a} \sin\left(\frac{n_x \pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{n_y \pi y}{a}\right)$, כלומר

$$\varphi(x, y) = \sum_{n_x=1, n_y=1}^{\infty, \infty} C_{n_x n_y} \Psi_{n_x n_y}(x, y)$$

$$\text{א. } \varphi(x, y) = \frac{2}{a} \sin\left(\frac{3\pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{4\pi y}{a}\right)$$

$$\text{ב. } \varphi(x, y) = \frac{\sqrt{2}}{a} \left[\frac{2}{3} \sin\left(\frac{5\pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{2\pi y}{a}\right) + \frac{\sqrt{5}}{3} \sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{5\pi y}{a}\right) \right]$$

$$\text{ג. } \varphi(x, y) = \frac{\sqrt{2}}{a} \sin\left(\frac{7\pi x}{a}\right)$$

$$\text{להזכירכם, } C_{n_x n_y} = \langle \Psi_{n_x n_y} | \varphi \rangle = \int_0^a \int_0^a \Psi_{n_x n_y}(x, y) \varphi(x, y) dx dy$$

3. (25 נק') חלקיק בטבעת

א. השתמשו במודל של חלקיק בטבעת בכדי להעריך את רמות האנרגיה של אלקטרוני ה- π

במולקולת הבנזן. אורך הקשר פחמן-פחמן במולקולת הבנזן הנו כ- $1.39 \text{ \AA}$.

ב. מהו הניוון של כל רמה. הסבירו באמצעות אנלוגיה לעולם הקלאסי את הניוון.

ג. השוו את רמות האנרגיה של הבנזן לאלו של מולקולת האוקטן (טבעת מתומנת מצומדת)

והסבירו ממה נובעים ההבדלים. הניחו כי אורך הקשר פחמן-פחמן זהה לזה שבבנזן.

ד. מהו אורך הגל של פוטון הנבלע כאשר אלקטרון π מעורר מהרמה המאוכלסת הגבוהה ביותר

(HOMO) לרמה הריקה הנמוכה ביותר (LUMO).

4. (25 נק') אופרטור התנע הזוויתי בקואורדינטות ספריות

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} = \begin{vmatrix} \hat{i} & \hat{j} & \hat{k} \\ x_1 & x_2 & x_3 \\ p_1 & p_2 & p_3 \end{vmatrix} \quad \text{אופרטור התנע הזוויתי הקלאסי מוגדר ע"י:}$$

א. השתמשו בהגדרת האופרטור הקוונטי $p_i = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_i}$ בכדי לרשום את אופרטור התנע

הזוויתי בקואורדינטות קרטזיות.

ב. רשמו את הדיפרנציאל השלם של פונקציה כללית $f(r, \theta, \phi)$ בקואורדינטות ספריות ומצאו

באמצעותו את מטריצת הנגזרות החלקיות המקשרת בין וקטור הגרדיאנט בקואורדינטות

קרטיזיות לוקטור הנגזרות החלקיות בקואורדינטות הספריות.

ג. באמצעות הטרנספורמציה של סעיף ב' הוכיחו כי מתקיים:

$$\vec{L}^2 = \vec{L} \cdot \vec{L} = L_1^2 + L_2^2 + L_3^2 = -\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \cot(\theta) \cdot \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2(\theta)} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right)$$

כימיה פיזיקלית 2 – תרגיל כיתה מספר 5

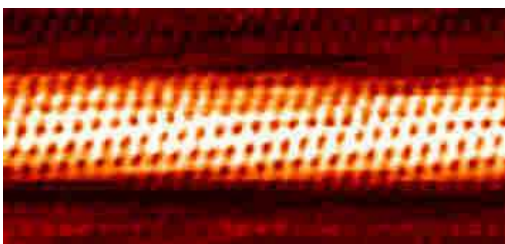
1. פונקצית גל טהורה של חלקיק בקופסא ריבועית דו-ממדית הנה:

$$\Psi(x, y) = \begin{cases} \frac{2}{a} \sin\left(\frac{n_x \pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{n_y \pi y}{a}\right) & 0 \leq x, y \leq a \\ 0 & \text{אחר} \end{cases}$$

חשבו את הממוצעים $\langle x \rangle$, $\langle y \rangle$ ו- $\langle xy \rangle$. השוו את התוצאה המתקבלת עבור $\langle xy \rangle$ לתוצאת המכפלה $\langle x \rangle \langle y \rangle$, הסבירו.

2. Carbon Nanotubes (CNT's) הן מולקולות פחמניות בעלות מבנה צינורי. מבנה השריג

האטומרי במולקולות אלו הנו של יריעת גרפן (יחידת הבניין של גרפית) המגולגלת לכדי צינור מושלם. כקירוב ראשון לאלקטרוני ה- π ניתן להתייחס אל המערכת כאל אלקטרון החופשי לנוע על פניו של גליל פתוח. רשמו את ההמילטוניאן של המערכת בקואורדינאטות קרטיזיות ובקואורדינאטות גליליות. רשמו את הפונקציות העצמיות ואת הערכים העצמיים של המערכת. מהי דרגת הניוון של שלוש רמות האנרגיה הנמוכות ביותר במערכת.



תמונת STM של Carbon Nanotube



איור של CNT

3. הראו שהפונקציות העצמיות של חלקיק בטבעת אורתונורמליות. כלומר מנורמלות ואורתוגונליות.

4. מהו ערך התצפית של האנרגיה, $\langle H \rangle$, עבור חלקיק בטבעת בעל פונקצית גל

$$\Psi(\varphi) = \sum_{j=-\infty}^{\infty} C_j \Psi_j(\varphi) \quad \left(\langle H \rangle = \sum_{j=-\infty}^{\infty} C_j^2 \frac{\hbar^2 j^2}{2I} \right)$$