

כימיה פיזיקלית 2 – תרגיל מספר 7

אטום המימן

1. (25 נק') .1

א. האם הפונקציות ψ_{nlm} העצמיות להמילטוניאן $\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}$ עצמיות לכל אחד מהאופרטורים

$$\hat{T} \text{ או } \hat{V} \text{ בנפרד? האם הן עצמיות ל } \hat{L}^2?$$

ב. מהם ערכי התצפית של \hat{L}^2 ו- \hat{L}_z עבור מצב $\psi_{1s} = R_{10}(r)Y_0^0(\theta, \varphi)$ ועבור מצב

$$\psi_{2p_z} = R_{21}(r)Y_1^0(\theta, \varphi)$$

ג. מהו ערך התצפית של האנרגיה הקינטית $\langle \hat{T} \rangle$ עבור כל אחד מהמצבים האלו?

ד. מהו ערך התצפית של $\langle \hat{V} \rangle$ עבור מצבים אלו? (אין צורך לבצע את האינטגרציה בשנית,

היעזרו בהמילטוניאן ובערכיו העצמיים.)

לשימושכם: $R_{10}(r) = \frac{2}{\sqrt{a^3}} e^{-r/a}$; $R_{21}(r) = \frac{1}{2\sqrt{6}a^3} r e^{-r/2a}$; המכפלה הסקלארית מוגדרת

$$\langle \Psi | \Psi \rangle = \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} r^2 dr \sin \theta d\theta d\varphi \Psi^* \Psi \quad \text{כך} \quad \int_0^\infty x^n e^{-x/a} dx = a^{n+1} n!$$

הדרכה: השתמשו בעובדה שהלפסיאן בהצגה כדורית מתפרק לשני חלקים, אחד שגוזר את

הזוויות θ ו- φ (ופרופורציוני ל \hat{L}^2) והשני שגוזר את r , וגם בעובדה שהפונקציות ההרמוניות

ספריות מנורמלות, ע"מ "לחסוך" את האינטגרציה על הזוויות.

2. (25 נק') 2. אטום מימן נמצא במצב המתואר ע"י פונקציה הגל $\varphi = \frac{1}{3}\psi_{4,2,-1} + \frac{1}{3}\psi_{4,2,2} + \frac{1}{3}\psi_{3,2,1} + C\psi_{3,2,0}$

א. מהו ערכו של C ע"מ שפונקציה הגל תהיה מנורמלת.

ב. מהו ערך התצפית של האנרגיה במצב זה?

ג. מה ההסתברות למדוד ערך נמוך מערך התוחלת?

ד. מה ההסתברות למדוד בדיוק את ערך התוחלת הזה.

ה. האם לפונקציה הגל יש ערך מוגדר של התנע הזוויתי? אם כן מהו?

3. מישורי צומת רדיאליים

(25 נק')

החלק הרדיאלי של פונקציית הגל ψ_{2s} של אלקטרון באטום המימן ניתן ע"י:

$$R_{2s} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{1}{a}\right)^{3/2} \left(1 - \frac{r}{2a}\right) e^{-r/2a}$$

$$. P(r) = r^2 R_{nl}^2(r) \text{ : הגרעין ניתנת ע"י}$$

א. לאילו ערכי r מתאפסת צפיפות ההסתברות למציאת האלקטרון?

ב. באילו ערכי r צפיפות זו מקסימלית?

4. פונקציות הגל האלקטרוניות

(25 נק')

א. הוכיחו כי אם מתקיים: $\hat{H}\psi_1 = E_1\psi_1$ ו $\hat{H}\psi_2 = E_1\psi_2$ כך ש ψ_2, ψ_1 מנוונים אזי קומבינציה ליניארית שלהם גם היא עצמית ובעלת אותו הערך העצמי:

$$\hat{H}(c_1\psi_1 + c_2\psi_2) = E_1(c_1\psi_1 + c_2\psi_2)$$

ב. פתרון משוואת שרדינגר הסטציונארית עבור אטום המימן מניב, בין היתר, את פונקציות הגל הבאות (שלכולם אותם אנרגיות):

$$\psi_{2p_0} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{2a}\right)^{5/2} e^{-Zr/2a} r \cos \theta, \quad \psi_{2p_{\pm 1}} = \frac{1}{8\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{2a}\right)^{5/2} e^{-Zr/2a} r \sin \theta e^{\pm i\phi}$$

השתמשו בקשרים הטריגונומטריים: $e^{i\phi} = \cos \phi + i \sin \phi$; $e^{-i\phi} = \cos \phi - i \sin \phi$ בכדי למצוא פונקציות גל **ממשיות** עצמיות להמילטוניאן אטום המימן מתוך הפונקציות הרשומות מעלה. נרמלו את הפונקציות הללו וזהו את הפונקציות שקיבלתם עם הפונקציות $2p_y, 2p_x, 2p_z$.

כימיה פיזיקלית 2 - תרגיל כיתה מספר 7**1. אורביטלים אטומיים – אטום המימן**

א. מהי הנקודה (לא רדיוס!) המסתברת ביותר למציאת האלקטרון באורביטל $2p$ באטום המימן?

ב. חשבו את ערך התצפית של הרדיוס באורביטלים $1s, 2s, 2p$ באטום המימן.

ג. בשנת 1976 חשבו מדענים בטעות כי האטום ה"על-כבד" הראשון נתגלה בדוגמה של מיקה. המדענים האמינו כי מספרו האטומי של האטום שנתגלה הנו – 126. העריכו את המרחק המסתבר ביותר למציאת האלקטרונים הפנימיים ביותר מגרעינו של אטום זה. (באטומים "על-כבדים" אפקטים יחסותיים הנם מכריעים. בחישוביכם הזניחו אפקטים אלו וכן הזניחו את הדחייה הבין-אלקטרונית).

2. הערכת גודל אטום המימן באמצעות עיקרון אי-הודאות

א. השתמשו ב אורך גל דה-ברולי ע"מ להעריך את גודל אטום המימן במצב הייסוד ואת אנרגיית היוניזציה במצב זה.

ב. 'גודל' האטום מוגדר בד"כ כרדיוס כדור המכיל 90% מצפיפות המטען של האלקטרונים המאוכלסים באורביטלים החיצוניים ביותר. חשבו את 'גודלו' של אטום המימן במצב הייסוד עפ"י הגדרה זו. ($R=2.661a_0$)