

כימיה פיזיקלית 2 – תרגיל מספר 3

חלקיק בקופסא חד מימדית

1. שלושה חלקיקים שניתן להבדיל ביניהם נמצאים במערכת בעלת שלוש רמות אנרגיה
 $E_0 \ll E_1 \ll E_2$. בכל רמה אפשר לאכלס יותר מחלקיק אחד.
 א. מהם רמות האנרגיה הכוללות של המערכת ומהו הניוון של כל רמה?
 ב. מהי הרמה בעלת הניוון הגדול ביותר?
 ג. מהו סכום הניוונים? התוכלו להסביר מספר זה?
2. עבור חלקיק בקופסא חד-מימדית במצב טהור $n=3$ חשבו את הגדלים הבאים:
 א. ההסתברות למציאת החלקיק בצדה הימני של הקופסא.
 ב. ההסתברות למציאת החלקיק בשליש המרכזי של הקופסא.
 ג. המקום המסתבר ביותר למציאת החלקיק.
3. כאשר חלקיק בקופסא חד-מימדית עובר מרמה $n=4$ לרמה $n=2$ הוא פולט פוטון בתדירות
 $6 \cdot 10^{14} \text{ s}^{-1}$. מהו אורך הקופסא.
4. תיאור גס ביותר של אלקטרון באטום (או במולקולה) מתייחס אליו כחלקיק בקופסא חד מימדית
 אשר אורכה הנו מסדר הגודל של גודל המערכת (האטום או המולקולה). 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?
5. עבור קופסא חד מימדית שמרכזו בראשית איך יראו פונקציות הגל? ומה יהיה ספקטרום

$$V(x) = \begin{cases} 0 & -\frac{a}{2} < x < \frac{a}{2} \\ \infty & x < -\frac{a}{2}, \frac{a}{2} < x \end{cases}$$

האנרגיה? (הכוונה היא לפוטנציאל הנראה כך)

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

אלקטרוניס המוגבלים לנוע בקופסא שאורכה הוא כאורך השרשרת המצומדת. עפ"י עקרון פאולי כל רמה אנרגטית ניתנת לאכלוס ע"י שני אלקטרוניס בלבד (בעלי ספין הפוך). עבור בוטאדיאן

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 – 2170A^0 .

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

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

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

4. המונחים מצב ורמת אנרגיה אינם זהים במכניקת הקוונטים. עבור חלקיק בעל מסה m בקופסא

תלת ממדית קובייתית בעלת צלע a התייחסו לטווח האנרגיות $E < 15h^2/8ma^2$ וקבעו כמה מצבים

נמצאים בתחום זה וכמה רמות אנרגיה נמצאות בתחום.