

כימיה פיזיקלית 2 – תרגיל מספר 6
חלקיק בטבעת ++

1. **בנון ואוקטן**

- א. השתמשו במודל של חלקיק בטבעת בכדי להעריך את רמות האנרגיה של אלקטרוני ה- π במולקולת הבנון. אורך הקשר פחמן-פחמן במולקולת הבנון הנו כ- 1.39\AA .
- ב. מהו הניוון של כל רמה. הסבירו באמצעות אנלוגיה לעולם הקלאסי את הניוון.
- ג. השוו את רמות האנרגיה של הבנון לאלו של מולקולת האוקטן (טבעת מתומנת מצומדת) והסבירו ממה נובעים ההבדלים. הניחו כי אורך הקשר פחמן-פחמן זהה לזה שבבנון.
- ד. מהו אורך הגל של פוטון הנבלע כאשר אלקטרון π מעורר מהרמה המאוכלסת הגבוהה ביותר (HOMO) לרמה הריקה הנמוכה ביותר (LUMO).

2. חלקיק בטבעת נמצא במצב עצמי $\Phi(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi}$

- א. עבור $m=1$ מה הסיכוי למצוא את החלקיק בתחום $0 < \varphi < \pi$?
- ב. עבור $m=2$ מהו הסיכוי למצוא את החלקיק באותו תחום?
- ג. לאור תוצאות הסעיפים הקודמים נסחו אמירה כללית לגבי ההסתברות למצוא את החלקיק בתחום כלשהו.
3. הראו שהפונקציות העצמיות של חלקיק בטבעת אורתונורמליות. כלומר מנורמלות ואורתוגונליות.

4. נתונה פונקצית גל מעורבת $\Phi(\varphi) = \cos(2\varphi)$

- א. נרמלו את פונקצית הגל.
- ב. כמו כל פונקצית גל ניתן לרשום את Φ זו כקומבינציה לינארית של פונקציות הבסיס $\Phi(\varphi) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} C_m \Psi_m(\varphi)$. מהם ערכי המקדמים C_n ?
- ג. האם פונקציה זו עצמית להמילטוניאן?

5. בשיעור ראיתם כי הלפלסיאן יכול להיכתב בקואורדינאטות פולאריות כ

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}$$

כמו כן ידוע לכם כי $\varphi = \arctan(y/x)$, $r = \sqrt{x^2 + y^2}$. התחילו

- בהצגה הקרטזית של הלפלסיאן $\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}$ והשתמשו בכלל השרשרת ע"מ למצוא את הצגתו הפולארית.

6. בכיתה ראינו דוגמא של חלקיק בגליל ובה ההמילטוניאן היה מורכב משני חלקים נפרדים $H = H_{\text{ID Box}}(z) + H_\varphi(\varphi)$. האחד היה זהה להמילטוניאן של חלקיק בקופסא והשני היה זהה לזה של חלקיק בטבעת.

א. מהן הפונקציות העצמיות של המילטוניאן הנראה כך $H = H_{\text{HO}}(z) + H_{\varphi}(\varphi)$ כאשר $H_{\text{HO}}(z)$ הוא המילטוניאן של אוסילטור הרמוני ו $H_{\varphi}(\varphi)$ הוא המילטוניאן של חלקיק בטבעת.

- ב. הסבירו במלים האם פונקציות אלה אורתונורמליות?
 ג. מהן רמות האנרגיה של החלקיק ומה ערכה של רמת היסוד?
 ד. כמה מספרים קוונטיים יש בפתרון? מדוע?

כימיה פיזיקלית 2 – תרגיל כיתה מספר 6 אוסילטור הרמוני, חלקיק טבעת וחלקיק בגליל.

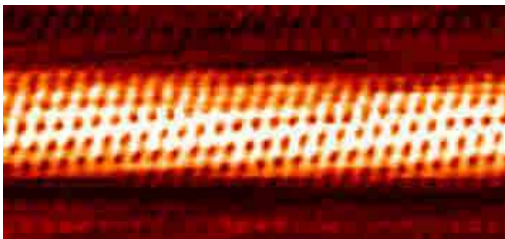
1. אפקט המנהור באוסילטור הרמוני קוונטי

- א. הוכיחו כי גבולות התחום המותר קלאסית עבור אוסילטור הרמוני קוונטי ניתנים ע"י הביטוי: $-\sqrt{(2n+1)} \leq \sqrt{\alpha}x \leq \sqrt{(2n+1)}$, כאשר $\alpha = \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)$.
- ב. חשבו את הסתברות החלקיק להימצא מחוץ לתחום האסור קלאסית עבור הרמות $n = 0, 1$.
 (0.1116 : $n=1$; 0.1573 : $n=0$)

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

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

3. 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 המילטוניאן של המערכת בקואורדינאטות קרטזיות 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