

כימיה פיזיקלית 2 – תרגיל מספר 7

תנע זוויתי ואטום המימן

1. א. הוכיחו כי הפונקציות הספריות-הרמוניות $Y_l^m(\theta, \phi)$ עצמיות לאופרטור $\hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2$. מהם

הערכים העצמיים המתאימים? (רמז: אין צורך להפעיל את $\hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2$ על $Y_l^m(\theta, \phi)$ במפורש!)

ב. עבור האופרטור $\hat{L}^2$, כמה פונקציות $Y_l^m(\theta, \phi)$ בעלות ערך עצמי $20\hbar^2$ קיימות? האם יש פונקציות גל אחרות בעלות אותו ערך עצמי?

ג. מהו ערך הביטויים $(\hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2) Y_l^m$ ו $\hat{L}_z^2 Y_l^m$?

2. הראו כי פונקציות הגל $Y_1^0(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta$ ו $Y_1^{-1}(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{-i\phi}$ אורתונורמליות

(כלומר מנורמלות ואורתוגונליות).

להזכירכם, המכפלה הסקלארית בין פונקציות ספריות הרמוניות מוגדרת כך:

$$\langle Y_l^m | Y_{l'}^{m'} \rangle = \int_0^{2\pi} \int_0^\pi Y_l^{m*}(\theta, \phi) Y_{l'}^{m'}(\theta, \phi) \sin \theta d\theta d\phi$$

3. אטום המימן

קיבלנו בתרגיל הכתה את ערכי התצפית של $\langle r \rangle$ עבור האורביטלים $2s, 1s$ באטום המימן –

$\langle r_{1s} \rangle, \langle r_{2s} \rangle$ בהתאמה.

עבור קומבינציה לינארית $\psi = \frac{1}{\sqrt{2}}|1s\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|2s\rangle$ של המצבים הללו האם ערך התצפית של

$\langle r \rangle$ ניתן ע"י $\langle r \rangle = \frac{1}{2}\langle r_{1s} \rangle + \frac{1}{2}\langle r_{2s} \rangle$? אם כן, חשבו אותו על סמך הנתונים מכיתה, אם לא

הסבירו מדוע?

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

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

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

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

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: $R_{10}(r) = \frac{2}{\sqrt{a^3}} e^{-r/a}$; $R_{21}(r) = \frac{1}{2\sqrt{6}a^5} r e^{-r/2a}$, המכפלה הסקלארית מוגדרת

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

הדרכה: השתמשו בעובדה שהלפליסיאן 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.

5. מהו ערך התצפית $\langle r^2 \rangle$ עבור מצב $2p_1$ באטום המימן.

6. א. עבור אטום המימן מהו התחום המותר באופן קלאסי לאלקטרון להימצא בו?

ב. עבור רמת היסוד מהי ההסתברות למצוא את האלקטרון בתחום זה?

7. החלק הרדיאלי של פונקציית הגל ψ_{1s} של אלקטרון באטום המימן ניתן ע"י: $R_{1s} = 2 \left(\frac{1}{a}\right)^{3/2} e^{-r/2a}$.

צפיפות ההסתברות למציאת אלקטרון בקליפה ברדיוס r סביב הגרעין ניתנת ע"י:

$$P(r) = r^2 R_{nl}^2(r)$$

א. לאילו ערכי r מתאפסת צפיפות ההסתברות למציאת האלקטרון?

ב. באילו ערכי r צפיפות זו מקסימלית?

8. פונקציות הגל האלקטרוניות

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_1, ψ_2 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 (שכולם 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. תנע זוויתי

נתונה פונקציית הגל: $\Phi(x, y, z) = N(x + y + z)e^{-[(x^2 + y^2 + z^2)/\alpha^2]}$, כאשר N מקדם נרמול ו- α פרמטר.

מבצעים מדידה של ערכי $\hat{L}_z$ ו- $\hat{L}^2$. מהי ההסתברות שהמדידה תניב את הערכים הבאים:

א. $L^2 = 2\hbar^2$; $L_z = 0$ (1/3)

ב. $L^2 = 2\hbar^2$; $L_z = \hbar$ (1/3)

ג. $L^2 = 2\hbar^2$; $L_z = -\hbar$ (1/3)

נתונים גם: $Y_1^1(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin(\theta)e^{i\phi}$; $Y_1^{-1}(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin(\theta)e^{-i\phi}$; $Y_1^0(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos(\theta)$

2. תנע זוויתי

אחת הדרכים להגדיר את הפונקציות הספריות ההרמוניות הנה: $Y_l^m(\theta, \phi) = C_l^m P_l^m(\cos\theta)e^{im\phi}$ כאשר C_l^m הנו קבוע נרמול ו- $P_l^m(x)$ הן ה- associated Legendre functions המוגדרות על ידי

$$P_l^m(x) = (1-x^2)^{|m|/2} \frac{d^{|m|}}{dx^{|m|}} P_l(x) = P_l^{-m}(x) \quad \text{היחס:}$$

והפונקציות $P_l(x)$ הן ה- Legendre polynomials.

בהנתן $P_1(x) = x$ חשבו את $Y_1^m(\theta, \phi)$ עבור $m = 0, \pm 1$ מתוך קשרים אלו.

(פתרון: ראה שאלה מספר 1 בתרגיל הכיתה).

3. 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 ו- 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).

4. 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.

$$(R=2.661a_0)$$