

מועד א' סמסטר ב' תשס"ו

21.6.06

אוניברסיטת תל אביב

הפקולטה למדעים מדויקים

ע"ש ריימונד וברלי סאקלר

כימיה פיזיקלית 2

לתלמידי שנה ב', ביה"ס ל כימיה

מרצים: ד"ר יורם זלצר, ד"ר חיים דימנט

משך הבחינה 3 שעות.

מותר להכניס מחברות, רשימות ומחשבוניס.

יש לענות **בפרוט** על 3 מתוך 4 השאלות הבאות.

יש להסביר ולנמק את התשובות.

1. נתונה פונקצית הגל של אלקטרון באטום מימן (a_0 הוא רדיוס בוהר):

$$\psi(\vec{r}) = \frac{1}{8\sqrt{\pi}a_0^3} \frac{r}{a_0} e^{-r/(2a_0)} \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \cos \theta + \frac{1}{2} \sin \theta e^{i\varphi} + \frac{1}{\sqrt{2}} \sin \theta e^{-i\varphi} \right)$$

במצב נתון זה:

א. מהי אנרגיית הינון של האטום? (5 נק)

ב. מהו ערך התצפית של ריבוע התנע הזויתי של האלקטרון (L^2)? (10 נק)ג. מהי ההסתברות למדוד לאלקטרון אפס תנע זויתי בכיוון z ($L_z = 0$)? (10 נק)ד. מהו ערך התצפית של רכיב התנע הזויתי של האלקטרון בכיוון z (L_z)? (10 נק)2. חלקיק בעל מסה m נמצא בפוטנציאל החד-ממדי $V(x) = \frac{1}{2} kx^2$. נתון כי עבור $x \rightarrow \infty$ המצביםהעצמיים של ההמילטוניאן נראים כך: $\psi_n(x \rightarrow \infty) \propto Ax^n e^{-\beta x^\alpha}$, כאשר A , α ו- β הם קבועים,ו- $n = 0, 1, 2, \dots$. השתמשו בנתונים אלה בלבד כדי לענות על השאלות הבאות:א. מה ערכו של α ? (5 נק)ב. מה ערכו של β ? (5 נק)ג. מהי אנרגיית מצב היסוד E_0 ? (10 נק)ד. חשבו את ספקטרום האנרגיות E_n . (15 נק)

3. נתון חלקיק בקופסא חד-ממדית עם האנרגיה הפוטנציאלית הבאה :

$$V = \hbar^2 / (ml^2) \text{ כאשר } \frac{1}{4}l \leq x \leq \frac{3}{4}l$$

$$V = 0 \text{ כאשר } 0 \leq x \leq \frac{1}{4}l \text{ ו- } \frac{3}{4}l \leq x \leq l$$

$V = \infty$ עבור כל x אחר.

נבחן את פונקצית הווריאציה הליניארית הבאה עבור מערכת זו :

$$\phi = c_1 f_1 + c_2 f_2 = c_1 (2/l)^{1/2} \sin(\pi x / l) + c_2 (2/l)^{1/2} \sin(3\pi x / l) \text{ עבור } 0 \leq x \leq l$$

א. הסבירו מדוע פונקציה זו נותנת חסם עליון ל- E_1 . (5 נק)

ב. הסבירו מדוע f_1 ו- f_2 הן אורתונורמליות. (5 נק)

ג. נשים לב כי $\langle f_i | \hat{T} | f_j \rangle = \langle f_i | \hat{T} | f_j \rangle + \langle f_i | V | f_j \rangle$. הסבירו מדוע $\hat{T} f_j = \varepsilon_j f_j$ עבור

$0 \leq x \leq l$. מהם הערכים העצמיים ε_1 ו- ε_2 של $\hat{T}$? הראו כי $\langle f_i | \hat{T} | f_j \rangle = \delta_{ij} \varepsilon_j$. (10 נק)

ד. בעזרת שני הסעיפים הקודמים פתרו את המשוואה הסקולארית, ומצאו את פונקציות הווריאציה

ϕ_1 ו- ϕ_2 הרלוונטיות לערכי האנרגיה W_1 ו- W_2 . (10 נק)

ה. לו הייתם רוצים לבנות פונקצית ווריאציה ליניארית עם שלוש תרומות, באילו פונקציות f

הייתם בוחרים? (5 נק)

4. בקירוב גס ניתן להתייחס לאלקטרוני π בפוליאנים מצומדים מסוג :



כאל חלקיקים בקופסא חד-ממדית.

א. נסמן את אורך הקשר C-C ב- l_1 ואת אורך הקשר C=C ב- l_2 . כמו כן נניח כי האלקטרונים

"זולגים" מחוץ למולקולה בכל צד למרחק של $(1/4)l_2 + (3/4)l_1$. הראו כי אורך הקופסא הוא :

$$L = \frac{1}{2}(n_C + 1)(l_1 + l_2)$$

כאשר n_C הינו מספר הפחמנים בשרשרת. (5 נק)

ב. הראו כי אורך גל הבליעה הארוך ביותר הצפוי במולקולות אלו מתואר על פי הביטוי הבא :

$$\lambda = 2m_e c h^{-1} (l_1 + l_2)^2 (n_C + 1)$$

כאשר m_e היא מסת האלקטרון ו- c מהירות האור. (8 נק)

המשך השאלה בעמוד הבא

ג. מהו ערכו של λ עבור מולקולה שבה $k = 0$ וידוע כי: $l_1 = 1.46 \text{ \AA}$ ו- $l_2 = 1.34 \text{ \AA}$? (5 נק)

ד. על פי ערכו של λ מהסעיף הקודם חשבו את ערכו של β (bond integral) המופיע בחישוב Hückel עבור אותה מולקולה. (5 נק)

ה. על מנת לדעת אם תהליך הבליעה המתואר בסעיף ב' הינו מותר, יש לחשב את דיפול המעבר

$$\langle \psi_m | eX | \psi_n \rangle$$

כאשר e הוא מטען האלקטרון, X היא הקואורדינטה שלו, ו-

$$\psi_n = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi X}{L}\right), \quad \psi_m = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{m\pi X}{L}\right)$$

הראו כי דיפול המעבר לא מתאפס רק כאשר $m - n = \pm 1, \pm 3, \pm 5, \dots$ (12 נק)
היעזרו לצורך החישוב בביטויים הבאים:

$$\int X \cos(aX) = \frac{1}{a^2} [\cos(aX) + aX \sin(aX)]$$

$$\int X \sin(aX) = \frac{1}{a^2} [\sin(aX) - aX \cos(aX)]$$

$$\sin(u) \sin(v) = \frac{1}{2} [\cos(u - v) - \cos(u + v)]$$

המשמאל!

$$\begin{array}{lll} m_e = 9.1094 \cdot 10^{-31} \text{ kg} & e = 1.6022 \cdot 10^{-19} \text{ C} & \hbar = 1.0546 \cdot 10^{-34} \text{ J sec} \\ 4\pi\epsilon_0 = 1.1127 \cdot 10^{-10} \text{ C}^2 \text{ N}^{-1} \text{ m}^{-2} & N = 6.0221 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1} & m_a = 1.6606 \cdot 10^{-27} \text{ kg} \\ c = 2.9979 \cdot 10^8 \text{ m sec}^{-1} & & k_B = 1.3807 \cdot 10^{-23} \text{ JK}^{-1} = 0.695 \text{ cm}^{-1} \text{ K}^{-1} \end{array}$$