

מועד ב' סמסטר ב' תשס"ו
14.8.06

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 על 3 מתוך 4 השאלות הבאות.
במקום בו ניתן להשיב על השאלה ללא חישוב, אין צורך בחישוב. יש לנמק את התשובות.

1. חלקיק בעל מסה m נמצא בטבעת בעלת רדיוס R . נתונה פונקציית הגל המנורמלת שלו:

$$\psi(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{3\pi}} \left[\cos(\varphi) + \sqrt{2} \cos(2\varphi) \right]$$

במצב נתון זה:

א. מהי הזווית φ לאורך הטבעת בה צפיפות ההסתברות למציאת החלקיק היא מירבית? (רמז: אין צורך בחישוב מסובך.) (5 נקודות)

ב. מהו ערך התצפית של התנע הזוויתי L_z של החלקיק? (8 נקודות)

ג. מהי ההסתברות למדוד לחלקיק תנע זוויתי בשיעור $+\hbar$? ($L_z = +\hbar$) (10 נקודות)

ד. מהו ערך התצפית של האנרגיה של החלקיק? (12 נקודות)

2. חלקיק בעל מסה m נמצא בקופסא דו-ממדית מלבנית התופסת את השטח $0 \leq x \leq a, 0 \leq y \leq 2a$.

א. רשמו את סט המצבים העצמיים וספקטרום האנרגיות של החלקיק. אין צורך בחישוב אך יש להסביר בקצרה איך הגעתם לתוצאה. (8 נקודות)

ב. עבור המצב המעורר הראשון: מהי האנרגיה? מהי פונקציית הגל? מהו הניוון? (10 נקודות)

ג. עבור המצב המעורר הראשון: מהם ערכי התצפית של התנע בכיוון x , p_x , ושל התנע בכיוון y , p_y ? (5 נקודות)

ד. עבור המצב המעורר הראשון: מהם ערכי התצפית של ריבוע התנע בכיוון x , p_x^2 , ושל ריבוע התנע בכיוון y , p_y^2 ? מהי אי הודאות במדידת p_x ו- p_y ? (12 נקודות)

3. כח "מסתוריי" מעביר אתכם ליקום מקביל שבו אורביטלי p של פחמנים במולקולה יוצרים אינטראקציה בשיטת "דלג-פחמן" קרי, האינטראקציה בין פחמנים אינה מתרחשת כאשר הם סמוכים זה לזה אלא רק כאשר מצוי ביניהם אטום נוסף. מלבד הבדל קטן זה כל שאר התכונות הכימיות והפיסיקליות ביקום המקביל זהות למוכר ביקומנו.

על מנת להרשים את היצורים החיים ביקום המקבילי אתם מבקשים להראות להם חישוב Hückel של קרבו-קטיון אלילי.



א. כיצד תראה הדטרמיננטה הסקולארית של המולקולה הני"ל ביקום המקבילי? (10 נקודות)

ב. מה יהיו ערכי האנרגיה של האורביטלים המולקולריים? (5 נקודות)

ג. פיתרו (כולל נירמול) את המשוואות הסקולאריות של המערכת וציירו סכמטית את האורביטלים המתקבלים. האם אתם יכולים להסביר מדוע היצורים מהיקום המקביל אינם מתרשמים מהחישוב? (10 נק)

ד. על מנת בכל זאת להרשים את החיזורים אתם מביאים אותם לכדור הארץ (ליקום שלנו) ומראים להם כי חישובי Hückel מאפשרים לדוגמא להבין מדוע ה- pK_a של Cyclopentadiene הוא 15 ושל 1,4-pentadiene הוא 30. רשמו את הדטרמיננטות הסקולאריות של כל אחת מהמולקולות. על מנת להסביר את ערכי ה- pK_a היעזרו בביטויים הבאים עבור ערכי האנרגיה: (10 נקודות)

$$j = 1, 2, \dots, n \quad e_j = \alpha + 2\beta \cos \frac{j\pi}{n_c + 1} \quad \text{מערכת מצומדת ליניארית:}$$

$$j = 1, 2, \dots, n \quad e_j = \alpha + 2\beta \cos \frac{2\pi j}{n_c} \quad \text{מערכת מצומדת טבעתית:}$$



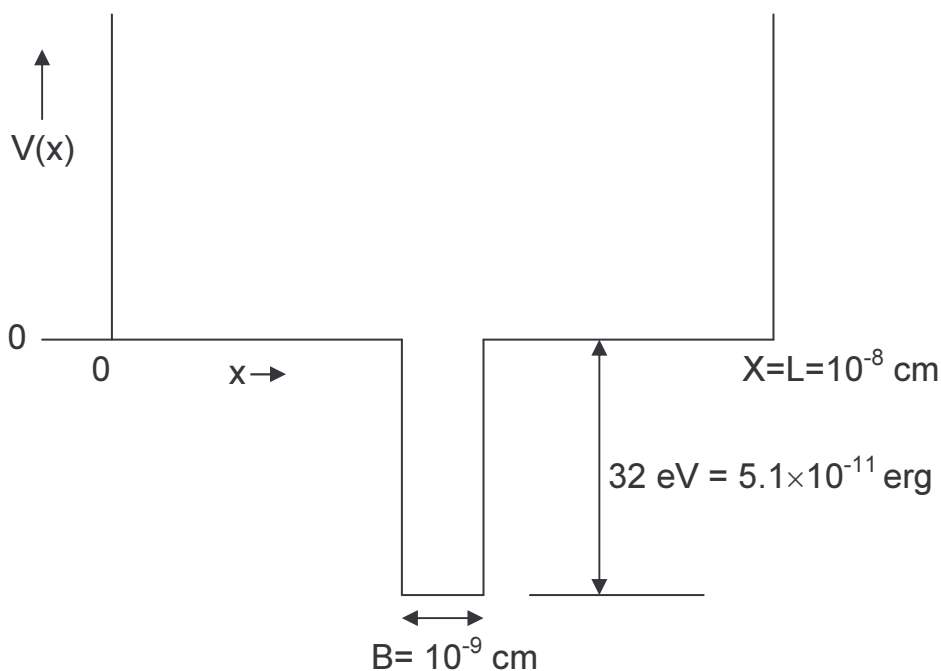
4. אלקטרון נתון בקופסא חד-ממדית המצוירת בסוף המבחן. לבור הפוטנציאל במרכזה ניתן להתייחס כאל הפרעה על חלקיק בקופסא.

א. מהו התיקון מסדר ראשון לרמת האנרגיה השנייה של המערכת? (5 נקודות)

ב. פונקצית הגל המתארת את רמה זו מורכבת כמובן מפונקציה מסדר $0, \psi_2^0$, ואיברי תיקון. מהו ערכם של שני המקדמים המשמעותיים ביותר בתיקון זה. רמז: בחנו היטב את הגאומטריה של הבעיה והפעילו שיקולי סימטריה. תוכלו בצורה זו לחסוך לכם הרבה זמן חישוב. (10 נקודות)

ג. במערכת קלאסית חלקיק אשר נמצא בבור פוטנציאל כפי שבציור יאבד אנרגיה עד אשר "יצנח" לתוך בור הפוטנציאל הצר והעמוק של הפרעה. נסו להעריך מה צריכה להיות גודלה (עומקה) של הפרעה כך שהאלקטרון (שהוא חלקיק קוונטי) אכן יהיה חסום בתוך הפרעה. (10 נקודות)

ד. נניח כי מזיזים את הפרעה שמאלה כך שתשתרע בין 0 ל- 10^{-9} cm. חשבו את האנרגיה של הרמה הראשונה במקרה זה. (10 נקודות)



ההצמחה!

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