

כימיה פיזיקלית 2 – תרגיל מספר 4

חלקיק בקופסא רב ממדית, חלקיק בטבעת, חלקיק על פני גליל

1. (נקי 34) פונקצית הגל של חלקיק בקופסא ריבועית דו-ממדית הנה:

$$\Psi(x, y) = \begin{cases} \frac{2}{L} \sin\left(\frac{n_x \pi x}{L}\right) \sin\left(\frac{n_y \pi y}{L}\right) & 0 \leq x, y \leq L \\ 0 & \text{אחר} \end{cases}$$

א. חשבו את הממוצעים $\langle x \rangle$, $\langle y \rangle$ ו- $\langle xy \rangle$. השוו את התוצאה המתקבלת עבור $\langle xy \rangle$ לתוצאת המכפלה $\langle x \rangle \langle y \rangle$, הסבירו.

ב. דרגת הניוון של ערך עצמי של אופרטור הנה מספר פונקציות הגל העצמיות הבלתי תלויות המתאימות לערך העצמי הנתון. מצאו את דרגת הניוון של רמות האנרגיה הבאות עבור חלקיק בקופסא דו-ממדית:

$$E = \frac{h^2}{4mL^2} \quad \text{(i)} \qquad E = \frac{5}{8} \frac{h^2}{mL^2} \quad \text{(ii)} \qquad E = \frac{h^2}{mL^2} \quad \text{(ii)}$$

ג. חשבו את דרגת הניוון של שלושת רמות האנרגיה הראשונות של חלקיק בקופסא ריבועית תלת-ממדית.

2. (נקי 33) חלקיק בטבעת

- א. השתמשו במודל של חלקיק בטבעת בכדי להעריך את רמות האנרגיה של אלקטרוני ה- π במולקולת הבנזן. אורך הקשר פחמן-פחמן במולקולת הבנזן הנו כ- 1.39 \AA .
- ב. מהו הניוון של כל רמה. הסבירו באמצעות אנלוגיה לעולם הקלאסי את הניוון.
- ג. השוו את רמות האנרגיה של הבנזן לאלו של מולקולת האוקטן (טבעת מתומנת מצומדת) והסבירו ממה נובעים ההבדלים. הניחו כי אורך הקשר פחמן-פחמן זהה לזה שבבנזן.
- ד. העריכו את אורך הגל של המעבר האופטי בעל אורך הגל הארוך ביותר בשתי המולקולות.

3. (נקי 33) אופרטור התנע הזוויתי בקואורדינטות ספריות

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} = \begin{vmatrix} \hat{i} & \hat{j} & \hat{k} \\ x_1 & x_2 & x_3 \\ p_1 & p_2 & p_3 \end{vmatrix} \quad \text{אופרטור התנע הזוויתי הקלאסי מוגדר ע"י:}$$

א. השתמשו בהגדרת האופרטור הקוונטי $p_i = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_i}$ בכדי לרשום את אופרטור התנע

הזוויתי בקואורדינטות קרטזיות.

ב. רשמו את הדיפרנציאל השלם של פונקציה כללית $f(r, \theta, \phi)$ בקואורדינטות ספריות ומצאו

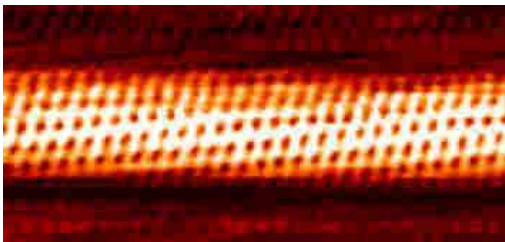
באמצעות את מטריצת הנגזרות החלקיות המקשרת בין וקטור הגרדיאנט בקואורדינטות קרטזיות לוקטור הנגזרות החלקיות בקואורדינטות הספריות.

ג. באמצעות הטרנספורמציה של סעיף ב' הוכיחו כי מתקיים:

$$\vec{L}^2 = \vec{L} \cdot \vec{L} = L_1^2 + L_2^2 + L_3^2 = -\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \cot(\theta) \cdot \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2(\theta)} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right)$$

כימיה פיזיקלית 2 – תרגיל כיתה מספר 4

1. 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 ההמילטוניאן המערכת בקואורדינטות קרטזיות ובקואורדינטות 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

2. המונחים מצב ורמת אנרגיה אינם זהים במכניקת הקוונטים. עבור חלקיק בעל מסה m בקופסא תלת ממדית קובייתית בעלת צלע a התייחסו לטווח האנרגיות $E < 15\hbar^2/8ma^2$ וקבעו כמה מצבים נמצאים בתחום זה וכמה רמות אנרגיה נמצאות בתחום.