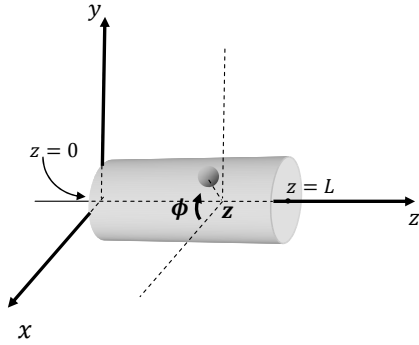


מבוא לקשר כימי – בוחן-אמצע תשס"ח

משך הבוחן: שעה.

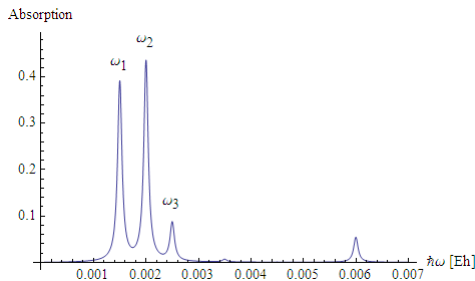
מרצה: פרופ' רועי בר

ענו על שאלה אחת מתוך שתי השאלות. ניתן להשתמש דף נוסחאות (מצורף) ובמחשבון. שימו לב: ניתן גם לענות על שתי השאלות, והתשובה הטובה תקבע את הציור.



1. נתבונן במודל הבא לאניון (יון שלילי) של ננו-שפופרת פחמן, בה האלקטרון העודף הוא נייד ויכול לנוע בחופשיות יחסית על-פני השפופרת:

- השפופרת מהווה משטח גלילי (דו-מימדי) חלק.
- האלקטרון מאולץ לנוע על פני המשטח (ראה איור משמאל).
- לא פועלים על האלקטרון כוחות נוספים. סימון: רדיוס הגליל r ואורכו L . בננו-שפופרת הספציפית בה אנו דנים קיים הקשר הבא: $L = 2\pi r$.



א. (60 נק') למערכות הבאות, פרטו והסבירו מהו ההמילטוניאן; מהם תנאי השפה לפונקציות הגל; מהם המצבים הסטאציונרים ומהם רמות האנרגיה של:

- i. (15 נק') אלקטרון בקופסא באורך L (תנודה אורכית).
- ii. (15 נק') אלקטרון על טבעת בברדיוס r (תנודה סיבובית).
- iii. (30 נק') האלקטרון במערכת שלנו (כמתואר לעיל). ניתן להשתמש בשיטת הפרדת משתנים או פשוט לנחש את הפתרון ולהסביר מדוע הוא נכון.

ב. (40 נק') באיור משמאל מופיע ספקטרום הבליעה האלקטרוני של גז של האניון בטמפרטורת החדר.

בהנחה שפוטון הנבלע מעורר רק אחד משני אופני התנודה, אך לא את שתיהן בו-זמנית, ענו על השאלות:

- i. (14 נק') הסבירו את יחס התדירויות $\omega_2/\omega_1 = 4/3$ של שני הקוים הראשונים.
- ii. (13 נק') העריכו את אורך השפופרת. לנוחיותכם, השתמשו ביחידות אטומיות.
- iii. (13 נק') איך יראה הספקטרום בטמפרטורה נמוכה, קרוב ל- 0°K (כלומר, אילו קווי בליעה ייעלמו ואילו יישארו)?

פתרון:

האלקטרון הזה מהווה למעשה שתי מערכות בלתי תלויות: אלקטרון בקופסא (קואור' z , תנודה אורכית) ואלקטרון על טבעת (קואור' ϕ , תנודה סיבובית). כל מצב עצמי של המערכת המשולבת הוא מכפלה של זוג מצבים עצמיים של כל אחת מהמערכות: $\psi_{n,m}(z, \phi) = \varphi_n(z)\chi_m(\phi)$. באשר $\varphi_n(z) = \sin k_n z$ עם $k_n = \pi n/L$ ו- $n = 1, 2, 3, \dots$. $\chi_m(\phi) = e^{im\phi}$ עם $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$. אוסף רמות האנרגיה של המערכת מכיל את סך האנרגיה של כל זוג רמות (אחד מהטבעת ואחד מהקופסא):

$$E_{n,m} = \frac{\hbar^2}{2\mu} \left(\frac{\pi n}{L} \right)^2 + \frac{\hbar^2 m^2}{2\mu r^2} = \frac{\hbar^2}{8\mu r^2} (n^2 + 4m^2) = E_{1,0} (n^2 + 4m^2)$$

לפי הנתונים, פוטון נבלע באחד משני תהליכים: $m \rightarrow m+1$ או $n \rightarrow n+1$. שני קווי הבליעה הנמוכים נובעים ממעבר מרמת היסוד לרמה מעוררת:

$$\hbar\omega_1 = E_{2,0} - E_{1,0} = E_{1,0}(4 - 1) = 3E_{1,0}$$

$$\hbar\omega_2 = E_{1,1} - E_{1,0} = E_{1,0}4 = 4E_{1,0}$$

ואמנם $\omega_2/\omega_1 = 4/3$. שאר קוי הבליעה הם בתדר גבוה יותר כי הם נובעים ממעברים בין רמות גבוהות יותר באנרגיה, ובשתי המערכות שלפנינו (וחלקיק בקופסא חד מימדית וחלקיק על טבעת) הרמות מתרחקות זו מזו ככל שעולים באנרגיה.

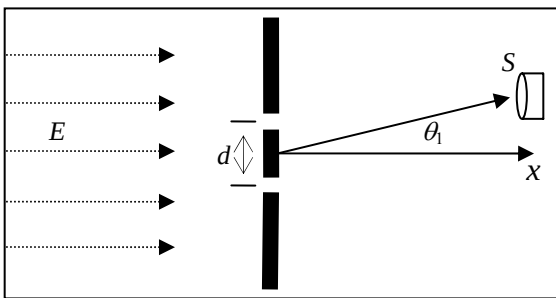
קווי בליעה 1 ו-2 ישרדו בטמפרטורה נמוכה כי כאשר מורידים את הטמפרטורה איכלוס המצבים המעוררים מתדלדל ואילו זה של מצב היסוד גדל. בגבול של טמפרטורה 0°K יש 100% איכלוס של מצב היסוד.

התדר של המעבר הראשון הוא $\omega = 0.0015E_h\hbar^{-1}$ לכן: $E_{1,0} = \hbar\omega_1/3 = 0.0005E_h$.

לכן $E_{1,0} = 0.0005E_h$. ביחידות אטומיות: $\frac{\hbar^2}{8m_e r^2} = E_{1,0} = 0.0005E_h \rightarrow r = \sqrt{\frac{1}{8 \times 0.0005}} a_0 = 15.8a_0 \rightarrow L = 2\pi r = 100a_0$

2. אלוהם דלילה של אטומי הליום באנרגיה קינטית E (ראו איור) פוגעת משמאל בשני סדקים צרים שהמרחק ביניהם d . מציבים גלאי S במרחק גדול מימין לסדקים. באמצעות הגלאי מאתרים את הכיוון (זווית θ_1) בו מתקבל מכסימום ראשון בעוצמת האלוהם העוברת את הסדקים.

א. (20 נק') האם נתוני השאלה מאפשרים, לפי יסודות המכאניקה הקוונטית, לדעת בוודאות את התנע של אטום באלוהם? יש להוכיח את טענתכם.



ב. (15 נק') בהנחה שלאטום מסוים באלוהם יש מסה m , מהו אורך-גל דה-ברולי $\lambda(m)$ של האטום?

ג. (10 נק') רשום את פונקציית הגל של אטום באלוהם, הסבר את הגדלים בהם הינך משתמש.

ד. (15 נק') מהו הקשר בין האנרגיה הקינטית E , המסה m המרווח בין הסדקים d והזווית θ_1 ?

ה. (20 נק') מהו היחס $\frac{\sin \theta_1}{\sin \theta_2}$? (כאשר θ_2 היא הזווית בה מתקבל המכסימום השני). האם יחס זה תלוי בנתון כלשהו המאפיין את אטום ההליום?

ו. (20 נק') מדידות ברזולוציה גבוהה במיוחד מגלות שהמכסימום הראשון בעצם מפוצל לשני מקסימא. כלומר, יש שתי זוויות θ_1 ו- θ'_1 דומות בגודלן שבהן מתקבל מכסימום. יחס

$$\frac{\sin \theta_1}{\sin \theta'_1} = \sqrt{\frac{3}{4}}$$

הזוויות הינו $\frac{\sin \theta_1}{\sin \theta'_1} = \sqrt{\frac{3}{4}}$. נמצא, שהיחס הזה אינו משתנה גם אם משנים את האנרגיה הקינטית של אטומי האלוהם E או את המרווח בין הסדקים d . תנו הסבר לתופעה זו.

פתרון:

א. מנתוני השאלה עולה כי ידועה האנרגיה הקינטית של על אטום E . זה מאפשר לנו לקבוע בוודאות את התנע, כי

$$E = \frac{p^2}{2m}$$

מתאפשר מחוקי המכאניקה הקוואנטית כי אופרטור האנרגיה הקינטית ואופרטור התנע חילופיים.

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2mE}}$$

$$d \sin \theta_n = n\lambda \quad \text{לכן הקשר המבוקש הוא:} \quad d \sin \theta_n = n \frac{h}{\sqrt{2mE}}$$

$$\text{ד. היחס הוא:} \quad \frac{\sin \theta_1}{\sin \theta_2} = \frac{1}{2} \quad \text{יחס זה אינו מעיד על אופי החלקיקים כלל.}$$

ה. מהסעיף הקודם, הפיצול לחייב לנבוע ממהו המאפיין את האטומים זה לא האנרגיה כי נתון שלאטומים באלוהם

יש אנרגיה E , זה לא המרווח בין הסדקים d . נותרה אם כן רק המסה. אמנם נתון שבאלוהם יש אטומי הליום, אבל עדיין יש אפשרות לאיזוטופים שונים של הליום. לכן, ההסבר לנתוני השאלה הוא שהאלוהם מכילה את שני

$$\text{איזוטופים של הליום, } {}^3\text{He} \text{ ו- } {}^4\text{He}, \text{ ואז: } \frac{\sin \theta_1}{\sin \theta'_1} = \sqrt{\frac{m'_1}{m_1}} = \sqrt{\frac{3}{4}}$$