

כימיה פיזיקלית 2 – תרגיל מספר 11

ספקטרום רוטציה

1. (20 נק') אילו מהמולקולות הבאות תראינה בליעת מיקרוגל טהורה בפאזה הגאזית: N_2 , HBr , CCl_4 , CH_3CH_3 , CH_3CH_2OH , H_2O , CO_2 , O_2 ?
2. (20 נק') בספקטרום הרוטציה של $^{12}C^{16}O$ קיימים פסי בליעה ב 3.863 cm^{-1} וב- 7.725 cm^{-1} . חשבו את מרחק שיווי המשקל בין אטום החמצן והפחמן ונבאו את מיקום שני פסי הבליעה הבאים (במספרי גל).
3. (20 נק') חשבו את מיקום פס הבליעה (במספרי גל) של המעבר הרוטציוני הראשון עבור המולקולות $^{13}C^{16}O$, $^{13}C^{17}O$ ו- $^{12}C^{17}O$. הניחו כי האפקט האיזוטופי על מרחק שיווי המשקל של המולקולה CO זניח.
4. (20 נק') נתונות המולקולות הדו-אטומיות $H^{35}Cl$ ו- $^{12}C^{16}O$. עבור שתי המולקולות:
 א. מצאו את הרמה המאוכלסת ביותר בטמפרטורת החדר.
 ב. מהו הפרש האנרגיות בין הרמה המאוכלסת ביותר לרמת הייסוד הרוטציונית ביחידות של kT ?
 ג. מהו יחס האכלוס בין הרמה המאוכלסת ביותר לבין רמת הייסוד?
5. (20 נק') מיקום קווי הבליעה הרוטציוניים של מולקולת ה- $H^{35}Cl$ ניתן ע"י הנוסחה:

$$\tilde{\nu} = (20.794\text{ cm}^{-1})(J+1) - (0.000164\text{ cm}^{-1})(J+1)^3$$
 כאשר J הנו המספר הקוונטי של הרמה ממנה אנו יוצאים.
 א. מהו מרחק שיווי המשקל של המולקולה? נמקו מדוע הערך שקיבלתם הנו מרחק שיווי המשקל.
 ב. מהו ערך הקבוע D מה משמעותו של קבוע זה?

כימיה פיזיקלית 2 - תרגיל כיתה מספר 11

ספקטרום רוטציה

מתוך מבחן מועד ב' תשס"ב

1. קבוע הרוטציה של המולקולה $^{16}\text{O}_2$ הנו $B=1.4456 \text{ cm}^{-1}$.

א. מהו מרחק שיווי המשקל של המולקולה? (1.2 \AA)

ב. מה תהייה שלוש תדירויות המעבר הנמוכות ביותר בספקטרום רוטציוני בו המעבר המותר הוא $\Delta J = +2$: (14.456 cm^{-1} , 26.021 cm^{-1} , 37.586 cm^{-1})

ג. מה תהייה שלוש תדירויות המעבר הנמוכות ביותר בספקטרום רוטציוני בו המעבר המותר הוא $\Delta J = +2$ במולקולה $^{16}\text{O}-^{18}\text{O}$? (8.1918 cm^{-1} , 13.653 cm^{-1} , 19.1142 cm^{-1})

ד. מהו המעבר החזק ביותר שיופיע בספקטרום רוטציוני בטמפרטורת החדר בו המעבר המותר הוא $\Delta J = +2$ עבור שתי המולקולות הללו: ($^{16}\text{O}-^{18}\text{O}$: $8 \rightarrow 10$, $^{16}\text{O}_2$: $7 \rightarrow 9$)

מתוך מבחן מועד א' תשס"ב

2. בספקטרום הרוטציה של מולקולת H^{35}Cl נמדדו שני המעברים הרוטציוניים העוקבים: מעבר בתדר 83.06 cm^{-1} ומעבר נוסף בתדר 103.75 cm^{-1} .

א. לאילו רמות רוטציה מתאימים מעברים אלו: ($J=3 \rightarrow 4$, $J=4 \rightarrow 5$)

ב. מצאו את קבועי הרוטציה B ו- D ביחידות של cm^{-1} . ($B=10.39 \text{ cm}^{-1}$, $D=4.167 \cdot 10^{-4} \text{ cm}^{-1}$)

ג. מה תהייה תדירות המעבר של $J=6 \rightarrow 7$? (144.97 cm^{-1})

ד. מצאו את אורך הקשר H^{35}Cl ואת תדירות הוויברציה של המולקולה. (3284.1 cm^{-1})

(1.29 \AA)

ה. מהם הערכים של B ו- D במולקולה D^{35}Cl ? ($D=1.1 \cdot 10^{-4} \text{ cm}^{-1}$, $B=5.342 \text{ cm}^{-1}$)

3. המרחק בין פסים עוקבים בספקטרום הרוטציה של D^{35}Cl הוא 10.59 cm^{-1} .

א. מהו אורך הקשר במולקולה? (1.3 \AA)

ב. מהו המרחק בין פסים עוקבים בספקטרום הרוטציה של H^{35}Cl ? (20.6 cm^{-1})

ג. מהו אורך הגל ומספר הגל של המעבר מ- $J=10$ ל- $J=11$ בספקטרום הבליעה של המולקולות

הללו: ($4.41 \cdot 10^{-5} \text{ m}$, $8.58 \cdot 10^{-5} \text{ m}$; 226.6 cm^{-1} , 116.49 cm^{-1})