

כימיה פיזיקלית 2 – תרגיל מספר 12

ספקטרוסקופיה ויברציונית ויברוטציונית

1. (33 נק') בספקטרום הויברציה-רוטציה של מולקולת ה- HCl מופיעים שני הקווים הראשונים של ענף P (מעברים שמקורם בכלל הברירה $\Delta J = -1$) בתדירויות 2866.8 cm^{-1} ו- 2847.1 cm^{-1} .
- מה התדירות של הקו הראשון בענף R ?
 - מהי תדירות הויברציה של המולקולה?
 - מה ערכו של קבוע הרוטציה של המולקולות HCl ו- DCl ?
 - מהי התדירות של הקו הראשון בענף R של ספקטרום DCl ?

2. (34 נק') ניתן לתאר בקירוב השפעת האנהרמוניות של המצבים הויברציוניים על מרווחי האנרגיה בין הרמות ע"י הנוסחה: $\bar{E}_v = \omega_e \left(v + \frac{1}{2} \right) - \omega_e x_e \left(v + \frac{1}{2} \right)^2$ בנוסף ניתן לקרב את תלות קבוע הרוטציה ברמת הויברציה ע"י הנוסחה: $B_v = B_e - \alpha_e \left(v + \frac{1}{2} \right)$.
- א. הראו כי ניתן לתאר את המעבר $v'', J'' \rightarrow v', J'$ של ספקטרום ויברוטציוני ע"י הביטוי הבא:
- $$\bar{\nu} = \omega_0 + (B_{v'} + B_{v''})n + (B_{v'} - B_{v''})n^2; n = \pm 1, \pm 2, \dots$$
- מהו ω_0 ?
- ב. שלושת קווי הבליעה הראשונים של ענף R בפס הבסיסי של ספקטרום הרוטציה-ויברציה של מולקולת $H^{35}Cl$ הנם בעלי התדירויות הבאות: $2944.89(2)$, $2925.78(1)$, $2906.25(0)$ כאשר המספרים בסוגריים מייצגים את רמת הרוטציה ההתחלתית. חשבו את הגדלים הבאים: $\omega_0, B_{v'}, B_{v''}, B_e, \alpha_e$.

3. (33 נק') תדירות הויברציה של מולקולת H_2 הנה 4401.21 cm^{-1} . חשבו את תדירות הויברציה של המולקולות D_2 ו- HD בהנחה שקבוע הכוח אינו תלוי בזהות האיזוטופ. חשבו את D_0 (אנרגיית הפירוק הכוללת את אנרגיית מצב הייסוד הויברציונית) של המולקולות D_2 ו- HD בהינתן כי עבור מולקולת H_2 מתקיים $D_0(H_2) = 4.4781 \text{ eV}$.

☺ בהצלחה במבחן!!!

כימיה פיזיקלית 2 - תרגיל כיתה מספר 12

ספקטרוסקופיה ויברוטציונית

1. בספקטרום הויברציה-רוטציה של $H^{35}Cl$ מופיעים שני הקווים הראשונים של ענף R (מעברים שמקורם בכלל הברירה $\Delta J = +1$) בתדירויות 2906.2 cm^{-1} ו- 2925.9 cm^{-1} .
- א. מה תדירות הקו הראשון בענף P? (2866.8 cm^{-1})
- ב. מהי תדירות הויברציה של המולקולה? (2886.5 cm^{-1})
- ג. מה ערכו של קבוע הרוטציה של $H^{35}Cl$? ומהו ערכו של קבוע הרוטציה של $D^{35}Cl$? (5.06 cm^{-1} , 9.85 cm^{-1})
- ד. מהי התדירות של הקו הראשון בענף R של ספקטרום ה- $D^{35}Cl$? (2079.3 cm^{-1})
- ה. מהי התדירות של הקו הראשון בענף P של ספקטרום ה- $D^{35}Cl$? (2059.1 cm^{-1})