

כימיה פיזיקלית 2 – תרגיל מספר 9

1. פוטנציאל מורס (25 נק') .1

אחד התאורים לפונקציית הפוטנציאל בין שני אטומים תחת קירוב בורן אופנהיימר ניתן ע"י

$$V(R) = D_e \left[1 - e^{-a(R-R_e)} \right]^2 \quad \text{Morse בשנת 1929: כאשר } R \text{ הנו המרחק בין הגרעינים.}$$

- א. מהו מרחק שווי המשקל של המולקולה תחת פוטנציאל זה?
- ב. מהי אנרגיית הדיסוציאציה של המולקולה (בהזנחת אנרגיית מצב הייסוד)?
- ג. קרבו את $V(R)$ לטור טיילור עד סדר שני סביב מרחק שיווי המשקל ומצאו את תדירות הויברציה באנרגיות נמוכות.
- ד. מהי אנרגיית מצב הייסוד הויברציונית?
- ה. מהי אנרגיית הדיסוציאציה של המולקולה בהתחשב במצב הייסוד?

2. אינטגרל החפיפה במולקולת H_2^+ (25 נק') .2

אינטגרל החפיפה במולקולת ה- H_2^+ ניתן ע"י הביטוי: $S = [1 + R/a_0 + R^2/3a_0^2] e^{-R/a_0}$. ציירו ביטוי זה כפונקציה של R/a_0 . עבור איזה ערך של R הביטוי מקסימלי? עבור איזה ערך של R הביטוי מינימלי? מה מידת החפיפה בין האורביטלים האטומיים במרחק שווי המשקל של המולקולה ($R=106\text{pm}$)?

3. אורביטלים אטומיים (25 נק') .3

כיוון שהאלקטרון החיצוני באטום ה- ליתיום מרוחק מהגרעין באופן משמעותי ביחס לאלקטרונים הנמצאים באורביטל 1s ניתן להתייחס (בהזנחת האינטראקציה בין האלקטרונים) לאטום זה כמעין אטום מימן במצב 2s. מהי אנרגיית היוניזציה הצפויה להתקבל ממודל זה של אטום הליתיום? מהו המטען האפקטיבי Z' אשר אותו חש האלקטרון החיצוני אשר יניב את אנרגיית היוניזציה הראשונה הניסיונית עבור אטום הליתיום – 5.39eV. השוו את גודלו של המטען האפקטיבי למטען הגרעין והסבירו את ממצאיכם.

אנרגיות היוניזציה הראשונות של נתרן, אשלגן ורובידיום הן 4.341eV, 5.138eV ו- 4.166eV בהתאמה. הניחו כי פונקציות הגל של האלקטרונים ברמה העליונה ניתנת לייצוג באמצעות אורביטלים דמויי מימן בעלי מטען גרעיני אפקטיבי Z' וחשבו את המטען האפקטיבי עבור האורביטלים 3s, 4s ו- 5s באטומים אלו בהתאמה.

4. סימטריה ואנטי סימטריה תחת החלפת אלקטרונים (25 נק') .4

אלו מהפונקציות הבאות הן: סימטריות לחלוטין/אנטי סימטריות לחלוטין תחת החלפת אלקטרונים?

$$(i) f(1)g(2)\alpha(1)\alpha(2)$$

$$(ii) f(1)f(2)[\alpha(1)\beta(2) - \beta(1)\alpha(2)]$$

$$(iii) f(1)f(2)f(3)\beta(1)\beta(2)\beta(3)$$

$$(IV) [f(1)g(2) - g(1)f(2)][\alpha(1)\beta(2) - \beta(1)\alpha(2)]$$

$$(V) r_{12}^2 e^{-a(\eta_1 + \eta_2)}$$

$$(VI) e^{-a(\eta_1 - \eta_2)}$$

כימיה פיזיקלית 2 - תרגיל כיתה מספר 9

LCAO - H₂⁺ 1.

במהלך פיתוח ה-LCAO עבור מולקולת המימן המיוננת חיובית תחת קירוב בורן אופנהיימר

מתקבל הביטוי הבא עבור אנרגיית מצב הייסוד: $E_g = E_{1s} + \frac{J+K}{1+s}$ כאשר: $J = e^{-2R} \left(1 + \frac{1}{R}\right)$

$$K = \frac{S}{R} - e^{-R}(1+R) \quad \text{ו-} \quad S = e^{-R} \left(1 + R + \frac{R^2}{3}\right)$$

א. מהו מרחק שווי המשקל של המולקולה תחת פוטנציאל זה?

ב. מהי אנרגיית הדיסוציאציה של המולקולה (בהזנחת אנרגיית מצב הייסוד)?

ג. קרבו את $V(R)$ לטור טיילור עד סדר שני סביב מרחק שיווי המשקל ומצאו את תדירות הויברציה באנרגיות נמוכות.

ד. מהי אנרגיית מצב הייסוד הויברציונית?

ה. מהי אנרגיית הדיסוציאציה של המולקולה בהתחשב במצב הייסוד?

פוטנציאל לנרד-ג'ונס 2.

אחד התאורים לפונקציית הפוטנציאל בין שני אטומים תחת קירוב בורן אופנהיימר ניתן ע"י

פוטנציאל לנרד-ג'ונס: $V(r) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^6 \right]$ עבור מולקולת Ne₂ הפרמטרים

המתאימים ניתנים ע"י הערכים: $\sigma = 275 \text{ pm}$; $\epsilon = 35.6 \text{ K}$. ציירו את הפוטנציאל כפונקציה של

המרחק הבין-גרעיני ביחידות של J/mol וחשבו את מרחק שיווי המשקל של המולקולה (המרחק בו $dV/dr=0$).