

כימיה פיסיקלית 2

לתלמידי שנה ב', ביה"ס ל כימיה

המורים: ד"ר ערן רבני, פרופ' ביקסון

משך הבחינה 3 שעות.

מותר להכניס מחברות, רשימות ומחשבוניס.

יש לענות **בפרוט** על 4 מתוך 5 השאלות הבאות.

יש להסביר ולנמק את התשובות.

$$(1) \text{ נתון חלקיק בעל מסה } m \text{ בפוטנציאל הבא: } V(x) = \frac{1}{2}kx^2 + \frac{1}{4}\gamma^2 x^4$$

(א) האם לפונקצית מצב היסוד זוגיות מוגדרת? כלומר האם היא סימטרית או אנטיסימטרית?

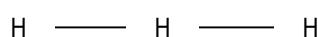
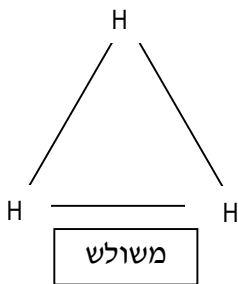
(ב) השתמש/י בשיטת הוריאציה עבור פונקצית הוריאציה $\psi = \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/4} e^{-\frac{1}{2}\alpha x^2}$, והראה/י כי עבור $\alpha = 1.43113$ מתקבלת אנרגיית וריאציה מינימלית למערכת בה $\hbar = k = m = \gamma = 1$. מהי

האנרגיה של מצב היסוד? האם האנרגיה המתקבלת נמוכה או גבוהה מהאנרגיה המדויקת?

$$\text{נתון: } \int_{-\infty}^{\infty} x^{2n} e^{-\alpha x^2} dx = \frac{1 \cdot 3 \cdot 5 \cdots (2n-1)}{(2\alpha)^n} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}$$

(ג) עבור פונקצית הוריאציה הנ"ל, מהו המקום המסתבר ביותר למציאת החלקיק? האם זהו

המקום המסתבר ביותר במצב היסוד של הפתרון המדויק?



(2) נשתמש בקירוב היקל כדי לקבוע מי מבין שתי

הקונפיגורציות, משולשת או ליניארית, יציבה

יותר במולקולות: H_3^+ , H_3 , H_3^- .

(א) רשמו את המשוואה הסקולרית עבור כל קונפיגורציה.

(ב) מהם הערכים העצמיים עבור הקונפיגורציה הליניארית? סדרו אותם

לפי סדר עולה. נתון: עבור אחד המצבים $\lambda = \alpha$.

(ג) מהם הערכים העצמיים עבור הקונפיגורציה המשולשת? סדרו אותם לפי סדר עולה. נתון: עבור

אחד המצבים $\lambda = \alpha - \beta$.(ד) עבור כל קונפיגורציה, רשמו את האנרגיה הכללית של H_3^+ , H_3 , H_3^- . עבור כל מולקולה, איזו

קונפיגורציה יציבה יותר?

רמז: לצורך פתרון השאלה יש להתייחס לאורביטלי $1s$ בלבד על כל אטום מימן.

3) ענה/י על השאלות הבאות. בסעיפים האחרונים עשה/י שימוש בעקרונות שהועלו בכיתה כאשר דנו באטום ההליום ובעקרון פאולי.

- א) מהן רמות האנרגיה של אלקטרון בעל מסה μ הנע בחופשיות על טבעת ברדיוס a ?
- ב) מהם המצבים העצמיים של האלקטרון ומהו הניוון של כל רמת אנרגיה (זכרו כי לאלקטרון ספין $1/2$)?
- ג) בהזנחת האינטראקציה בין שני אלקטרונים, מהן רמות האנרגיה של מערכת בת שני אלקטרונים באותה טבעת?
- ד) מהו הניוון של רמת האנרגיה היסודית של זוג אלקטרונים אלו? זכור/י כי האלקטרונים מקיימים את עיקרון האיסור של פאולי.
- ה) כנ"ל לגבי רמת האנרגיה המעוררת הראשונה. בהתחשב בעובדה שיש אינטראקציה בין האלקטרונים, מי מבין רמות האנרגיה המתקבלות עבור המצב המעורר הראשון נמוכה יותר: הסינלט או הטריפלט?

4) מקור הקרינה בספקטרומטר Raman הוא ליזר He/Ne בעל מספר גל $\bar{\nu}_0 = 15802.8 \text{ cm}^{-1}$. במדידת ספקטרום Raman רוטציוני של $^{12}\text{C}^{16}\text{O}_2$ מתקבלות התדירויות הבאות עבור שלושת קווי Stokes הראשונים: $\bar{\nu}_3 = 15794.2 \text{ cm}^{-1}$ $\bar{\nu}_2 = 15797.3 \text{ cm}^{-1}$ $\bar{\nu}_1 = 15800.4 \text{ cm}^{-1}$.

- א. מהו אורך הגל והתחום הספקטראלי של קרינת הליזר?
- ב. מהו קבוע הרוטציה של $^{12}\text{C}^{16}\text{O}_2$?
- ג. מהו אורך הקשר פחמן-חמצן במולקולת CO_2 ?
- ד. מהו יחס העוצמות של שני הקווים $\bar{\nu}_1$ ל- $\bar{\nu}_3$?
- ה. מהם מספרי הגל של שלושת קווי Stokes הראשונים ב- $^{12}\text{C}^{16}\text{O}^{17}\text{O}$?

5) בספקטרום הויברציה-רוטציה של $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$ מופיע קו הבליעה המתאים לערור ממצב היסוד הרוטציוני עם מספר גל של 2146.9 cm^{-1} . מספר הגל של קו הבליעה הקרוב אליו בכיוון של תדירויות נמוכות יותר, הוא 2139.1 cm^{-1} .

- א. מהן רמות האנרגיה הרלוונטיות? צרפו תאור גרפי.
- ב. חשבו את ערך קבוע הכוח של המולקולה.
- ג. מה ערכו של קבוע הרוטציה של המולקולה?
- ד. חשבו את אורך הקשר של מולקולת CO.
- ה. באיזה מספר גל מופיע הקו השני בענף P?

בהצלחה!

$$m_e = 9.1094 \cdot 10^{-31} \text{ kg} \quad e = 1.6022 \cdot 10^{-19} \text{ C} \quad \hbar = 1.0546 \cdot 10^{-34} \text{ J sec}$$

$$4\pi\epsilon_0 = 1.1127 \cdot 10^{-10} \text{ C}^2 \text{ N}^{-1} \text{ m}^{-2} \quad N = 6.0221 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1} \quad m_a = 1.6606 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$$

$$c = 2.9979 \cdot 10^8 \text{ m sec}^{-1} \quad k_B = 1.3807 \cdot 10^{-23} \text{ JK}^{-1} = 0.695 \text{ cm}^{-1} \text{ K}^{-1}$$