

מועד א' סמסטר ב' תשס"ב

25.6.02

אוניברסיטת תל אביב

הפקולטה למדעים מדויקים

ע"ש ריימונד וברלי סקלר

כימיה פיזיקלית 2
לתלמידי שנה ב', ביה"ס ל כימיה
המרצה: ד"ר ערן רבני

משך הבחינה 3 שעות.

מותר להכניס מחברות, רשימות ומחשבוניס.

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

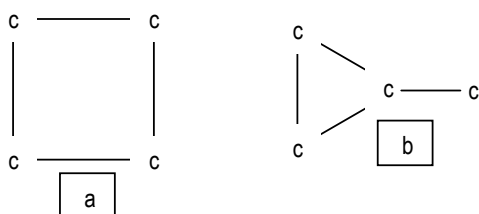
יש להסביר ולנמק את התשובות.

(1) ענה/י בקצרה על השאלות הבאות. נמקי את תשובותיך.

- (א) בשנת 1971 פורסם מאמר בו נעשה שימוש בפונקצית הוריאציה המנורמלת הבאה להערכת אנרגיית מצב היסוד של אטום המימן: $\Psi(r) = Ne^{-br^2/a_0^2 - cr/a_0}$. במאמר נאמר כי מינימיזציה של אינטגרל הוריאציה ביחס לפרמטרים b ו c מניבה ערך אנרגטי הגבוה ב -0.7% מערך אנרגיית מצב הייסוד האמיתית של אטום המימן. הסבירו, ללא חישובים, האם תוצאה זו הגיונית.
- (ב) מהו ההפרש בין אנרגיית מצב הייסוד המדויקת עבור אוסצילטור הרמוני קוונטי לבין זו אשר תחושב באמצעות פונקצית הוריאציה הנ"ל?

(ג) כאשר משתמשים בפונקצית הגל המנורמלת הבאה $0 \leq x \leq l$; $\varphi(x) = \left(\frac{3}{l^3}\right)^{\frac{1}{2}} x$ כפונקצית

וריאציה עבור חלקיק בקופסא חד ממדית נמצא כי ערכו המינימלי של אינטגרל הוריאציה הנו אפס. כיצד ייתכן כי הערך שהתקבל עבור האנרגיה הוריאציונית קטן מערך מצב הייסוד המדויק?



- (2) נשתמש בקירוב היקל כדי לקבוע מי מבין שתי הקונפיגורציות הבאות של המולקולה C_4H_4 יציבה יותר (באיור מופיע רק השלד הפחמני):
- (א) רשום/י את המשוואה הסקולרית עבור כל קונפיגורציה.

(ב) מהם הערכים העצמיים עבור הקונפיגורציה הריבועית (a)? סדרי אותם לפי סדר עולה. ניתן להיעזר בפתרון שקבלנו בכיתה.

(ג) הראה/י שהערכים הבאים הם ערכים עצמיים של הקונפיגורציה (b): $\alpha - \beta$, $\alpha - 1.48\beta$,

$\alpha + 0.31\beta$, $\alpha + 2.17\beta$. סדרי אותם לפי סדר עולה.

ד) עבור כל קונפיגורציה, רשמו את האנרגיה הכללית של המולקולה הניטרלית C_4H_4 , היון החיובי $C_4H_4^+$, והיון השלילי $C_4H_4^-$. עבור כל מולקולה, איזו קונפיגורציה יציבה יותר?

3) עפ"י מודל האורביטלים המולקולריים, איזה מבין המולקולות הבאות יציבה יותר: F_2 , F_2^- או F_2^+ ?
נמקי את תשובתך תוך שימוש בשיטת LCAO-MO.

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

א) לאילו רמות רוטציה מתאימים המעברים הללו?

ב) מצאו את קבועי הרוטציה B ו- D ביחידות של cm^{-1} .

ג) מה תהיה התדירות של המעבר $J = 6 \rightarrow 7$?

ד) מצאו את אורך הקשר $H^{35}Cl$ ואת תדירות הויברציה של המולקולה.

ה) מהם הערכים של B ו- D במולקולה $D^{35}Cl$?

5) בספקטרום ה-IR של המעבר הויברציוני הבסיסי של המולקולה HI התקבלו קווי הרוטציה הבאים (ב- cm^{-1}):

2216.7, 2242.2, 2254.3, 2266.1, 2277.5, 2288.5, 2132.7, 2147.5, 2161.7, 2176.0, 2190.0, 2203.6, 2117.7

א) שייכו כל קו למעבר המתאים, כלומר $P(1)$, $R(3)$, וכו'.

ב) חשבי את B_0 ו- B_1 ואת מרחק שיווי המשקל בשני המקרים.

ג) מהי תדירות המעבר הויברציוני הטהור?

ד) חשבי את מיקום המעבר בעל העוצמה המקסימלית בשני הענפים, עבור $T=300\text{K}$.

בהצלחה!

$$\begin{aligned}
 m_e &= 9.1094 \cdot 10^{-31} \text{ kg} & e &= 1.6022 \cdot 10^{-19} \text{ C} & \hbar &= 1.0546 \cdot 10^{-34} \text{ J sec} \\
 4\pi\epsilon_0 &= 1.1127 \cdot 10^{-10} \text{ C}^2 \text{ N}^{-1} \text{ m}^{-2} & N &= 6.0221 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1} & m_a &= 1.6606 \cdot 10^{-27} \text{ kg} \\
 c &= 2.9979 \cdot 10^8 \text{ m sec}^{-1} & k_B &= 1.3807 \cdot 10^{-23} \text{ JK}^{-1} = 0.695 \text{ cm}^{-1} \text{ K}^{-1}
 \end{aligned}$$