

מועד א' סמסטר ב' תשס"ג

10.6.03

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) אלקטרון נמצא בבור פוטנציאל אין סופי שרוחבו  $0 \leq x \leq a$ . האלקטרון נמצא במצב היסוד שלו

$$\text{עם אנרגיה } E_1 = \frac{h^2}{8ma^2}. \text{ בזמן כלשהו, בבת אחת, מזיזים את הקיר הימני מ- } a \text{ ל- } 2a, \text{ כך}$$

שפונקציות האלקטרון לא משתנה. ענו על השאלות הבאות:

(א) מהן הפונקציות העצמיות והאנרגיות העצמיות של הבור החדש (7 נק')?

(ב) הציגו את פונקציות הגל של האלקטרון מייד לאחר הזזת הקיר כקומבינציה ליניארית של

פונקציות הגל העצמיות בבור החדש. מהו מקדם הפיתוח של מצב היסוד של הבור

החדש (10 נק')?

(ג) אם נבצע מדידה מייד לאחר הזזת הקיר, מהו הסיכוי למצוא את החלקיק במצב היסוד

של הבור החדש (8 נק')?

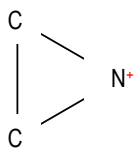
(2) המעבר האלקטרוני בעל התדר הנמוך ביותר של המולקולה  $CN$  הנו  $8065 \text{ cm}^{-1}$  [המולקולה

 $CN$  בולעת אור בתדירות  $(8065 \text{ cm}^{-1})$ ] לעומת זאת למולקולה  $CN^-$  (יון שלילי) אין קו בליעה

בתחום זה. הסבירו את התופעה תוך שימוש במודל האורביטלים המולקולריים (25 נק').

(3) נשתמש בקירוב היקל כדי לתאר את קשרי ה- $\pi$  במולקולה  $C_2H_3N^+$  (באיור מופיע רק השלד

הפחמני-חנקתי):



(א) רשום/י את המשוואה הסקולרית. שמו לב כי מדובר בשני אטומים

שונים (8 נק')!

(ב) הראה/י שהערכים הבאים הם ערכים עצמיים של המערכת עבור

$$\text{המקרה הפרטי בו מתקיים } \alpha_C = \alpha_N \text{ ו- } \beta_{CC} = 0.9\beta_{CN} :$$

$$\alpha_C - \beta_{CC}$$

$$\frac{1}{2} \left( \alpha_C + \alpha_N + \beta_{CC} - \sqrt{\alpha_C^2 - 2\alpha_C\alpha_N + \alpha_N^2 + 8\beta_{CN}^2 - 2\alpha_C\beta_{CC} + 2\alpha_N\beta_{CC} + \beta_{CC}^2} \right)$$

$$\cdot \frac{1}{2} \left( \alpha_C + \alpha_N + \beta_{CC} + \sqrt{(\alpha_C^2 - 2\alpha_C\alpha_N + \alpha_N^2 + 8\beta_{CN}^2 - 2\alpha_C\beta_{CC} + 2\alpha_N\beta_{CC} + \beta_{CC}^2)} \right)$$

סדרי אותם לפי סדר אנרגיה עולה [עבור  $\alpha_C = \alpha_N$  ו-  $\beta_{CC} = 0.9\beta_{CN}$ ] (10 נק').

ג) רשמו את האנרגיה הכללית של אלקטרוני ה- $\Pi$  במולקולה (7 נק').

4) מולקולה ליניארית הספוחה למשטח חלק מוגבלת לתנועה רוטציונית על פני המשטח בלבד, קרי לתנועה רוטציונית הניתנת לתיאור בממד אחד.

א) רשמו את ההמילטוניאן של תנועה רוטציונית זו (רמז: מהו ההמילטוניאן של חלקיק בטבעת?) (5 נק').

ב) מהם הפונקציות העצמיות והמצבים העצמיים של המערכת (5 נק')?

ג) נתון אופרטור מומנט הדיפול:  $\hat{\mu} = \mu_0 \cos(\varphi)$ , כאשר  $\mu_0$  קבוע. מהם כללי הברירה (5 נק')?

ד) ציירו ספקטרום אופייני של המערכת הנ"ל. רשמו את תדירות המעבר ליד כל קו. שייכו את המעברים לרמות אנרגיה. התייחסו לעוצמת המעברים (10 נק').

5) אנרגית הדיסוציאציה הנסיונית של הרדיקל  היא  , אורך הקשר ברדיקל הוא  $R_e = 0.112nm$  ומספר הגל המתאים למעבר ויברציוני טהור הוא  $\bar{\nu}_v = 2860cm^{-1}$ .

א) מהו עומק בור הפוטנציאל ברדיקל  ? השתמשו

בקשר:  $D_e = D_0 + \hbar\omega/2$ , כאשר  $\omega$  תדירות הויברציה. שימו לב ליחידות (5 נק')!

ב) מהו ערך קבוע הרוטציה B של הרדיקל  (5 נק')?

ג) באיזה מספרי גל יופיעו בספקטרום של  שני המעברים הרוטציוניים הטהורים

ו-  $(J = 5 \rightarrow J = 6)$  (5 נק'?).

ד) באיזה מספר גל יופיע בספקטרום הויברציה-רוטציה של  המעבר שמקורו מצב היסוד הויברציוני-רוטציוני (5 נק'?)

ה) מהו יחס העוצמות בין שני הקווים הספקטראליים המתאימים למעברים

ו-  $(J = 5 \rightarrow J = 6)$  בטמפרטורה של  (5 נק'?)

בהצלחה!

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

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

$$c = 2.9979 \cdot 10^8 \text{ m sec}^{-1}$$