

מועד ב' סמסטר ב' תשס"ב
19.8.02

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.

1) נתון חלקיק בעל מסה m נמצא בקופסה באורך L .
א) רשום/י את מצב היסוד והאנרגיה המתאימה.

ב) מפעילים על החלקיק כוח המתואר ע"י הפוטנציאל $V(x) = -\lambda \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} \sin(\pi x / L)$. חשבו את

האנרגיה של מצב היסוד תוך שימוש בתורת ההפרעות מסדר ראשון תחת ההנחה שהפרמטר λ קטן.

ג) השתמשו/י בפונקציה וריאציה מהצורה $\phi(x) = c_1 \psi_1(x) + c_2 \psi_2(x)$, כאשר $\psi_n(x)$ הינן פונקציות עצמיות של חלקיק בקופסה, וקבעו את אנרגיית מצב היסוד הוריאציונית ואת המקדמים c_1, c_2 הנותנים ערך מינימלי לאינטגרל הוריאציה. נתון:

$$-\int_0^L \psi_2(x) \sin(\pi x / L) \psi_2(x) dx = 32 / (15\pi), \int_0^L \psi_1(x) \sin(\pi x / L) \psi_1(x) dx = 8 / (3\pi)$$

$$\int_0^L \psi_1(x) \sin(\pi x / L) \psi_2(x) dx = 0$$

ד) עבור פונקציה הוריאציה הנ"ל, מהו המקום המסתבר ביותר למציאת החלקיק עבור $\lambda = 0.1, m = 1, L = 1$?

2) ענה/י על השאלות הבאות. בסעיפים האחרונים עשה/י שימוש בעקרונות שהועלו בכיתה כאשר דנו בעקרון פאולי.

א) מהן רמות האנרגיה של **אלקטרון** בעל מסה μ הנע בתוך קופסה בעלת צלע באורך L ?

ב) מהו הניוון של שלושת רמות האנרגיה הנמוכות ביותר (זכרו כי לאלקטרון ספין $1/2$)?

ג) בהזנחת האינטראקציה בין האלקטרונים, מהי האנרגיה של שלושה אלקטרונים במערכת הני"ל במצב היסוד, במצב המעורר הראשון והשני?

ד) רשום/י את פונקצית הגל של מצב היסוד של המערכת.

ה) מהו מצב היסוד ואנרגיית מצב היסוד כאשר אחד האלקטרונים מוחלף במיאוון. למיאוון מסה שונה מהאלקטרון אולם הנו בעל ספין חצי.

3) שנים רבות נחשבה המולקולה He_2 כלא יציבה. מדענים שעשו חישובים מדויקים טענו שהמולקולה יציבה, ואכן המולקולה התגלתה בטמפרטורות נמוכות ותכונותיה המבניות והספקטראליות נחקרו. נמצא שאורך הקשר שלה הנו גדול במיוחד ואנרגיית הפרוק שלה קטנה במיוחד.

- (א) השתמש/י במודל ה-MO וצייר/י את דיאגרמת הרמות הרלוונטית כדי להסביר מדוע סברו תחילה המדענים כי המולקולה אינה יציבה.
- (ב) מהו סדר הקשר של המולקולה בקרוב ה-MO? מדוע התגלתה המולקולה בטמפרטורות נמוכות?
- (ג) מדוע אורך הקשר גדול מאד, ומדוע חוזק הקשר קטן מאד?
- (ד) מדוע אורך הקשר קטן במצב המעורר הראשון ביחס למצב היסוד?
- (ה) מהם התכונות של היון He_2^+ : האם אורך הקשר קטן או גדול והאם אנרגיית הפירוק קטנה או גדולה ביחס למולקולה הניטרלית? השווה תכונות אילו גם למצב המעורר הראשון של He_2 .

(4) קבוע הרוטציה של המולקולה $^{16}\text{O}_2$ הנו $B = 1.4456 \text{ cm}^{-1}$.

- (א) מהו מרחק שיווי המשקל של המולקולה?
- (ב) מה תהיינה שלוש תדירויות המעבר הנמוכות ביותר בספקטרום רוטציוני בו המעבר המותר הוא $\Delta J = +2$?
- (ג) מה תהיינה שלוש תדירויות המעבר הנמוכות ביותר בספקטרום רוטציוני בו המעבר המותר הוא $\Delta J = +2$ במולקולה $^{16}\text{O}-^{18}\text{O}$?
- (ד) מהו המעבר החזק ביותר שיופיע בספקטרום רוטציוני בטמפרטורת החדר בו המעבר המותר הוא $\Delta J = +2$ עבור שתי המולקולות הללו?

(5) נתונים מעברי הויברציה הבאים של המולקולה $^{23}\text{Na}^{35}\text{Cl}$: $0 \rightarrow 1$ 378 cm^{-1} ,

$1 \rightarrow 2$ 376 cm^{-1} , $2 \rightarrow 3$ 374 cm^{-1} .

- (א) חשבו את ω_e ואת x_e .
- (ב) חשבו את אנרגיית הדיסוציאציה של המולקולה.
- (ג) היכן יופיעו מעברים אלו במולקולה $^{23}\text{Na}^{37}\text{Cl}$?
- (ד) מהי הטמפרטורה בה נערך הניסוי בהינתן כי יחס עוצמת הבליעה בין המעבר השני והראשון הנו 0.1.

בהצלחה!

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