

כימיה פיסיקלית 2

לתלמידי שנה ב', ביה"ס ל כימיה

המורים: ד"ר ערן רבני, פרופ' מרדכי 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) שנים רבות נחשבה המולקולה Be_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 (2.45\AA) ואנרגיית הפרוק שלה קטנה במיוחד (2.4Kcal/mol).

א) השתמשו במודל ה-MO וציירו 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 Be_2^+ : האם אורך הקשר קטן או גדול והאם אנרגיית הפירוק קטנה או גדולה ביחס למולקולה הניטרלית? השווה תכונות אילו גם למצב המעורר הראשון של Be_2 .

2) נתון חלקיק חד-ממדי בעל מסה m ומטען חשמלי Q המוגבל בתנועתו לקטע באורך L על ציר x : $0 \leq x \leq L$. בתוך הקטע נע החלקיק בחופשיות (חלקיק בקופסה).

א) רשמו את ההמילטוניאן של המערכת. הראו והסבירו מדוע הפונקציות העצמיות של

המילטוניאן החלקיק בתנאים הנתונים הם: $\psi_n(x) = A \sin(n\pi x / L)$. מהו A ? מדוע n

מספר טבעי?

ב) מהו המקום המסתבר ביותר למציאת החלקיק?

ג) הראו שבמצב היסוד ערך התצפית של מומנט הדיפול הוא: $\langle D \rangle = QL/2$, כאשר אופרטור

מומנט הדיפול נתון ע"י $D = Qx$. נתון $\int \sin^2(ax) dx = \frac{x}{2} - \frac{\sin(2ax)}{4a}$ ו-

$$\int x \sin^2(ax) dx = \frac{x^2}{4} + \frac{\sin^2(ax)}{4a^2} - \frac{x \sin(2ax)}{4a}$$

ד) מהו ערך התצפית של מומנט הדיפול במצב המעורר הראשון?

3) 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 בבור הפוטנציאל הדו-ממדי הבא:

$$V(x, y) = \frac{1}{2}k(x^2 + y^2)$$

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

ג) בהזנחת האינטראקציה בין שני אלקטרונים, מהן רמות האנרגיה של שני אלקטרונים במערכת הני"ל?

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?

4) אנרגית הדיסוציאציה הנסיונית של הרדיקל $^{12}C^1H$ היא $D_0 = 3.46 eV$, אורך הקשר ברדיקל הוא

$$R_e = 112 pm \quad \bar{\nu}_v = 2860 cm^{-1}$$

א. מהו עומק בור הפוטנציאל (D_e) ברדיקל $^{12}C^1H$?

ב. מהו ערך קבוע הרוטציה B של הרדיקל $^{12}C^1H$?

ג. באיזה מספרי גל יופיעו בספקטרום של $^{12}C^2D$ שני המעברים הרוטציוניים הטהורים

$$(J=0 \rightarrow J=1) \quad \text{ו} \quad (J=3 \rightarrow J=4) ?$$

ד. באיזה מספר גל יופיע בספקטרום הויברציה-רוטציה של $^{12}C^2D$ המעבר שמקורו מצב היסוד הויברציוני-רוטציוני?

ה. מהו יחס העוצמות בין שני הקווים הספקטרליים המתאימים למעברים $(J=0 \rightarrow J=1)$

$$(J=3 \rightarrow J=4) \quad \text{בטמפרטורה של } T = 500K ?$$

5) בספקטרום הויברציה-רוטציה של $H^{35}Cl$ מופיעים שני הקווים הראשונים של ענף R (מעברים

$$\Delta J = 1) \text{ במספרי גל } 2906.2 cm^{-1} \text{ ו- } 2925.9 cm^{-1}.$$

א. מהי התדירות (ביחידות של Hz) ומהו מספר הגל של הקו הראשון בענף P?

ב. מהי תדירות הויברציה של המולקולה?

ג. מה ערכם של קבועי הרוטציה של $H^{35}Cl$ ושל $D^{35}Cl$?

ד. מהו מספר הגל של הקו הראשון בענף R של ספקטרום $D^{35}Cl$?

ה. מהו מספר הגל של הקו הראשון בענף P של ספקטרום $D^{35}Cl$?

הערות

$$h = 6.6261 \cdot 10^{-34} J \text{ sec}$$

$$m_e = 9.1094 \cdot 10^{-31} kg \quad m_a = 1.6606 \cdot 10^{-27} kg$$

$$N = 6.0221 \cdot 10^{23} mol^{-1}$$

$$e = 1.6022 \cdot 10^{-19} C \quad k_B = 1.3807 \cdot 10^{-23} JK^{-1} = 0.695 cm^{-1} K^{-1}$$