

מועד ב' סמסטר ב' תשס"ג

18.8.03

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) פונקציית הגל של רמת היסוד עבור הפוטנציאל $V(x) = V_0 \tanh^2(ax)$ (V_0 ו- a קבועים) היא

מהצורה $\psi(x) = c / \cosh^\alpha(ax)$ כאשר c הוא קבוע הנרמול, ו- $\alpha > 0$.

א) מצא עבור אילו ערכים של α פונקציית הגל הנ"ל מקיימת את משוואת שרדינגר (13 נק').

ב) מהי האנרגיה הכללית של המערכת (12 נק')?

2) השתמשו בתיאוריית האורביטלים המולקולריים וציירו דיאגרמות רמות כדי להסביר את

הטבלה הבאה. העריכו את D_e עבור O_2^- (25 נק').

יון או מולקולה	D_e (eV)	R_e (nm)
O_2^+	6.48	0.112
O_2	5.08	0.121
O_2^-	?	0.126

3) השתמשו בשיטת היקל עבור היון $CH_2CHCH_2^+$ וענו על השאלות הבאות:

א) מהן רמות האנרגיה (5 נק')?

ב) מהי אנרגיית הייצוב (בהשוואה לאתילן) של היון, הרדיקל $\cdot CH_2CHCH_2$ ושל היון

השלילי $CH_2CHCH_2^-$ (7 נק').

ג) כתבו את פונקציות הגל המתאימות לכל רמה שחישבתם וציירו אותם באופן סכמתי.

תארו את שלד המולקולה כקו ישר (13 נק').

4) להלן נתונים הקיימים עבור $^{132}\text{Cs}^{79}\text{Br}$:

תדירות (MHz)	מעבר רוטציוני	רמת ויברציה
21588	9 → 10	0
21514	9 → 10	1
21441	9 → 10	2
21366	9 → 10	3
23747	10 → 11	0
23666	10 → 11	1
23583	10 → 11	2
25816	11 → 12	1
25649	11 → 12	2
25550	11 → 12	3

א) חשבו את B_0 ו- B_1 (10 נק').

ב) חשבו את B_e ו- α_e (5 נק').

ג) חשבו את ω_e ו- $\omega_e x_e$ (10 נק').

5) עבור BrCl נתון :

תדירות (MHz)	רמת ויברציה	מעבר רוטציוני	מולקולה
9080.73	0	0 → 1	$^{79}\text{Br}^{35}\text{Cl}$
9034.14	1	0 → 1	$^{79}\text{Br}^{35}\text{Cl}$
9018.40	0	0 → 1	$^{81}\text{Br}^{35}\text{Cl}$
8972.41	1	0 → 1	$^{81}\text{Br}^{35}\text{Cl}$

א) חשבו את B_e ו- α_e עבור שני האיזוטופים (11 נק').

ב) נתון $\omega_e = 440\text{cm}^{-1}$ עבור $^{79}\text{Br}^{35}\text{Cl}$. מהו D עבור שני האיזוטופים (7 נק')?

ג) חשבו את מרחק שיווי המשקל עבור שני האיזוטופים (7 נק').

בהצלחה!

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