

כימיה פיזיקלית 2 – תרגיל מספר 10

1. פוטנציאל מורס (33 נק') .1

אחד התאורים לפונקציית הפוטנציאל בין שני אטומים תחת קירוב בורן אופנהיימר ניתן ע"י

$$V(R) = D_e \left[1 - e^{-a(R-R_e)} \right]^2 \quad \text{Morse בשנת 1929: כאשר } R \text{ הנו המרחק בין הגרעינים.}$$

- א. מהו מרחק שווי המשקל של המולקולה תחת פוטנציאל זה?
- ב. מהי אנרגיית הדיסוציאציה של המולקולה (בהזנחת אנרגיית מצב הייסוד)?
- ג. קרבו את $V(R)$ לטור טיילור עד סדר שני סביב מרחק שיווי המשקל ומצאו את תדירות הויברציה באנרגיות נמוכות.
- ד. מהי אנרגיית מצב הייסוד הויברציונית?
- ה. מהי אנרגיית הדיסוציאציה של המולקולה בהתחשב במצב הייסוד?

2. אינטגרל חפיפה (33 נק') .2

כשמנחשים קומבינציה לינארית של אורביטלים אטומיים (LCAO) ע"מ לפתור את פונקציית

הגל של אלקטרון במולקולה אנחנו משתמשים באינטגרל החפיפה $S_{jk} = \langle f_j | f_k \rangle$ כאשר f_j ו

f_k הינן פונקציות עצמיות של אלקטרון מסביב לאטום.

- א. הסבירו מדוע האינטגרל לא שווה לפונקציית דלתא כמו שקיבלנו בעבר.
- ב. מה המשמעות של S . מה ערכו המקסימלי? מה מבטא S קטן? ומה מבטא S גדול?
- ג. רשמו את אינטגרל החפיפה מפורשות (כלומר פונקציות הגל המלאות וגורם האינטגרציה אך אל תבצעו אותו) עבור קומבינציה לינארית של אורביטל $1s$ באטום ליתיום (נסמנו α), ואורביטל $2s$ באטום מימן (נסמנו β).

3. אינטגרל החפיפה במולקולת H_2^+ (34 נק') .3

אינטגרל החפיפה במולקולת H_2^+ עבור שני מצבי יסוד פתיר (ע"י החלפת משתנים לקואורדינטות

$$S = [1 + R/a_0 + R^2/3a_0^2] e^{-R/a_0} \quad \text{אליפטיות) וניתן ע"י הביטוי:}$$

- א. מה מסמל R בביטוי זה?
- ב. עבור איזה ערך של R הביטוי מקסימלי? הסבירו?
- ג. עבור איזה ערך של R הביטוי מינימלי? הסבירו?
- ד. מה מידת החפיפה בין האורביטלים האטומיים כאשר המרחק בין הגרעינים הוא $2a_0$?

כימיה פיזיקלית 2 - תרגיל כיתה מספר 10

LCAO - H₂⁺ 1.

במהלך פיתוח ה-LCAO עבור מולקולת המימן המיוננת חיובית תחת קירוב בורן אופנהיימר

מתקבל הביטוי הבא עבור אנרגיית מצב הייסוד: $E_g = E_{1s} + \frac{J+K}{1+s}$ כאשר: $J = e^{-2R} \left(1 + \frac{1}{R}\right)$

$$S = e^{-R} \left(1 + R + \frac{R^2}{3}\right) \quad \text{ו-} \quad K = \frac{S}{R} - e^{-R}(1+R)$$

- א. מהו מרחק שווי המשקל של המולקולה תחת פוטנציאל זה?
- ב. מהי אנרגיית הדיסוציאציה של המולקולה (בהזנחת אנרגיית מצב הייסוד)?
- ג. קרבו את $V(R)$ לטור טיילור עד סדר שני סביב מרחק שיווי המשקל ומצאו את תדירות הויברציה באנרגיות נמוכות.
- ד. מהי אנרגיית מצב הייסוד הויברציונית?
- ה. מהי אנרגיית הדיסוציאציה של המולקולה בהתחשב במצב הייסוד?

פוטנציאל לנרד-ג'ונס 2.

אחד התאורים לפונקציית הפוטנציאל בין שני אטומים תחת קירוב בורן אופנהיימר ניתן ע"י

$$V(r) = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^6 \right]$$

- א. מהו מרחק שווי המשקל של המולקולה תחת פוטנציאל זה?
- ב. מהי אנרגיית הדיסוציאציה של המולקולה (בהזנחת אנרגיית מצב הייסוד)?
- ג. קרבו את $V(R)$ לטור טיילור עד סדר שני סביב מרחק שיווי המשקל ומצאו את תדירות הויברציה באנרגיות נמוכות.
- ד. מהי אנרגיית מצב הייסוד הויברציונית?
- ה. מהי אנרגיית הדיסוציאציה של המולקולה בהתחשב במצב הייסוד?