

מועד א' סמסטר ב' תשס"ה
8.6.05

אוניברסיטת תל אביב
הפקולטה למדעים מדויקים
ע"ש ריימונד ובברלי סקלר

כימיה פיזיקלית 2

לתלמידי שנה ב', ביה"ס ל כימיה

מרצים: ד"ר חיים דימנט, פרופ' ערן רבני

משך הבחינה 3 שעות.

מותר להכניס מחברות, רשימות ומחשבוניס.

יש לענות **בפרוט** על 3 מתוך 4 השאלות הבאות.

יש להסביר ולנמק את התשובות.

1. האינטראקציה בין שני חלקיקים בעלי מסות m_1 ו- m_2 ומטענים חשמליים $(+e)$ ו- $(-e)$ ניתנת על-ידי

פוטנציאל הרמוני חד-ממדי, $V(x_1, x_2) = \frac{1}{2} k(x_1 - x_2)^2$, כאשר x_1 ו- x_2 הן קואורדינטות המיקום של

שני החלקיקים. מפעילים פוטנציאל חשמלי חיצוני $\Phi(x) = Ex$ כאשר E קבוע. (תזכורת: האנרגיה הפוטנציאלית של חלקיק בעל מטען q המצוי בפוטנציאל חשמלי Φ היא $q\Phi$).

א. רשמו את ההמילטוניאן הדו-חלקיקי כפונקציה של שתי הקואורדינטות. (5 נק)

ב. רשמו ההמילטוניאן המתאר את התנועה היחסית של שני החלקיקים (פונקציה של קואורדינטה אחת). (15 נק)

ג. חשבו את ספקטרום האנרגיה. (15 נק)

2. פונקצית הגל (הלא מנורמלת) של חלקיק חופשי בעל מסה m היא $\psi(x) = (x^2 + a^2)^{-1/2}$.

א. מה ההסתברות למצוא את החלקיק בתחום $x > 0$? (5 נק)

ב. מה ההסתברות למצוא אותו בתחום $-a < x < a$? (7 נק)

ג. מהו ערך התצפית של התנע? (7 נק)

ד. מהי אי-הוודאות בתנע? (10 נק)

ה. מהו ערך התצפית של האנרגיה? (6 נק)

$$\int \frac{dx}{(x^2 + a^2)^2} = \frac{1}{a} \arctan \frac{x}{a} \quad \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{(x^2 + a^2)^3} = \frac{3\pi}{8a^5} \quad \int_{-\infty}^{\infty} \frac{x^2 dx}{(x^2 + a^2)^3} = \frac{\pi}{8a^3}$$

3. להלן טבלה המייצגת מעברים ויברציוניים-רוטציוניים במולקולה CO :

$v = 0 \rightarrow 1$	$v = 0 \rightarrow 2$
2158.3016	4263.8396
2147.0831	4278.2365
2161.9700	4267.5445
2150.8579	4274.7430
2154.3016	4271.1790
2135.5482	4244.2659
2127.6844	4256.2196
2139.4281	4252.3047
2131.6336	4248.3201

א. שייכו כל קו למעבר המתאים עבור המעברים $v = 0 \rightarrow 1$ ו- $v = 0 \rightarrow 2$. (3 נק')

ב. חשבו את B_0 , B_1 ו- B_2 . (5 נק')

ג. חשבו את מרחק שיווי המשקל בכל רמה ויברציונית. (3 נק')

ד. חשבו את α_e , B_e ו- R_e . (3 נק')

ה. חשבו את מיקום המעבר בעל העוצמה המקסימלית בשני הענפים עבור $T=300K$

עבור שני המעברים הויברציוניים. (4 נק')

ו. האם ניתן לראות את תופעת ה-bandhead במולקולה זו ב- $T=300K$? (4 נק')

ז. חשבו את תדירות המעבר הויברציוני הטהור $v = 0 \rightarrow 1$ ו- $v = 0 \rightarrow 2$. (4 נק')

ח. חשבו את ω_e ו- $\omega_e x_e$. (5 נק')

ט. מהי אנרגיית הדיסוציאציה של המולקולה D_e ? האם הערך שקבלתם נמוך או

גבוה מהערך האמיתי? (4 נק')

4. נתון היון LiH^{++} .

א. כתבו ביחידות אטומיות את ההמילטוניאן האלקטרוני בקירוב בורן-אופנהיימר. (5 נק)

ב. רשמו את פונקציית הגל הוריאציונית עבור היון כולל ספין. אין צורך לקבוע את מקדמי הוריאציה. (6 נק)

ג. מהו ערוץ הפירוק הסביר יותר של היון : $Li^+ + H^+$ או $Li^{++} + H$? רמז: יש להשתמש בעקרון הוריאציה עבור היון Li^+ . (10 נק)

ד. מה תהיה אנרגיית הוריאציה האלקטרונית לא כולל הדחיה הבין גרעינית עבור מרחק בין גרעיני אפס? (7 נק)

ה. מהי פונקציית הגל של המצב המעורר של המערכת כולל ספין? (7 נק)

בהצלחה !

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