

מועד ב' סמסטר ב' תשס"ה

31.7.05

אוניברסיטת תל אביב

הפקולטה למדעים מדויקים

ע"ש ריימונד ובברלי סקלר

כימיה פיזיקלית 2

לתלמידי שנה ב', ביה"ס לכימיה

המרצים: ד"ר חיים דימנט ופרופ' 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. חלקיק בעל מסה m נמצא בתוך טבעת ברדיוס R . מישור הטבעת ניצב לציר z . מפעילים שדה מגנטי חיצוני B בכיוון z . השדה מוסיף לחלקיק אנרגיה בשיעור gBL_z , כאשר L_z הוא התנע הזוויתי של החלקיק ו- g קבוע.

א. רשמו את משוואת שרדינגר עבור החלקיק. (10 נק)

ב. האם האיבר בהמילטוניאן התלוי ב- B חילופי עם ההמילטוניאן שבו $B=0$? (10 נק)

ג. חשבו את ספקטרום האנרגיה של החלקיק. (15 נק)

2. חלקיק בעל מסה m נמצא בקופסא חד-ממדית התופסת את התחום $0 \leq x \leq a$. בנוסף פועל עליו

$$V(x) = \frac{1}{2} m \omega^2 \left(x - \frac{a}{2} \right)^2$$

פוטנציאל חד-ממדי

א. האם הפוטנציאל V מעלה או מוריד את הערכים בספקטרום האנרגיה של החלקיק? (8 נק)

ב. השתמשו בתורת הפרעות כדי לחשב את ספקטרום האנרגיה. (15 נק)

ג. מה תרומת הפרעה לאנרגיה של החלקיק בגבול הקלאסי? (12 נק)

$$\int \sin^2(bx) dx = \frac{x}{2} - \frac{\sin(2bx)}{4b}$$

$$\int x \sin^2(bx) dx = \frac{x^2}{4} - \frac{\cos(2bx)}{8b^2} - \frac{x \sin(2bx)}{4b}$$

$$\int x^2 \sin^2(bx) dx = \frac{x^3}{6} - \frac{x \cos(2bx)}{4b^2} + \frac{(1 - 2b^2 x^2) \sin(2bx)}{8b^3}$$

3. להלן טבלה המייצגת מעברים ויברציונים-רוטציונים במולקולות $H^{35}Cl$ ו- $D^{35}Cl$:

$H^{35}Cl$	$D^{35}Cl$
2906.25	2101.60
2944.99	2058.02
2865.14	2111.94
2821.59	2122.05
2925.92	2080.26
2963.35	2131.91
2843.63	2069.24

- א. שייכו כל קו למעבר המתאים. (3 נק')
 ב. חשבו את B_0 ו- B_1 עבור שני האיזוטופים. (5 נק')
 ג. חשבו את מרחק שיווי המשקל בכל רמה ויברציונית עבור שני האיזוטופים. (3 נק')
 ד. חשבו את α_e , B_e ו- R_e עבור כל איזוטופ. (3 נק')
 ה. חשבו את מיקום המעבר בעל העוצמה המקסימלית בשני הענפים עבור $T=300K$. (4 נק')
 ו. חשבו את תדירות המעבר הויברציוני הטהור $1 \rightarrow 0$ עבור כל איזוטופ. (4 נק')
 ז. חשבו את ω_e ו- $\omega_e x_e$ עבור $H^{35}Cl$ ו- $D^{35}Cl$. (5 נק')
 ח. מה תהיה תדירות המעבר הויברציוני הטהור $2 \rightarrow 0$ עבור כל איזוטופ. (4 נק')
 ט. מהי אנרגיית הדיסוציאציה של $H^{35}Cl$ ו- $D^{35}Cl$? (3 נק')

4. נתונה המולקולה המישורית C_2H_4 . נתונים אלמנטי המטריצה הבאים עבור

$$\langle 2p_1 | H | 2p_1 \rangle = \langle 2p_2 | H | 2p_2 \rangle = \alpha$$

$$\langle 2p_1 | H | 2p_2 \rangle = \langle 2p_2 | H | 2p_1 \rangle = \beta \cos(\theta)$$

אורביטלי ה-p: α ו- β קבועים. הזווית θ הינה הזווית בין שני המישורים הנוצרים ע"י

המשולשים $H-C-H$.

- א. רשמו את המשוואה הסקולרית עבור אורביטלי ה-p בלבד. (10 נק)
 ב. חשבו את הערכים העצמיים כפונקציה של הזווית θ . (12 נק)
 ג. מהו מחסום הפוטנציאל לסיבוב סביב ציר הקשר. רמז: חשבו את הפרש האנרגיה בין המצב המישורי למצב בו $\theta = \frac{\pi}{2}$. (12 נק)

בהצלחה!

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