

A B C D E F G H I J K L M N O P Q R S T U V W X Y Z



كلية العلوم

القسم : الكيمياء

السنة : الثانية

اسئلة ودراس محلولة

كيمياء كمومية

A 2 Z LIBRARY

مكتبة A to Z : Facebook Group

كلية العلوم (فيزياء ، كيمياء ، رياضيات ، علم الحياة)

يمكنكم طلب المحاضرات برسالة نصية (SMS) أو عبر (What's app) على الرقم 0931497960 TEL:

A B C D E F G H I J K L M N O P Q R S T U V W X Y Z

الطالب: الرقم الجامعي: المدة: ساعتان العلامة: 100 درجة	امتحان مقرر الكيمياء الكوموية طلاب السنة الثانية - الفصل الدراسي الأول 2024-2025 تمهل في إجابتك ولا تتسرع، نحن معك فثق بنفسك	جامعة طرطوس كلية العلوم قسم الكيمياء
نموذج A		

(40) درجة

السؤال الأول:

اختر الإجابة الصحيحة مما يلي وسجلها في دفتر الإجابة (سجل رقم الإجابة فقط):

1	شرط تكون أمواج مستقرة في حبل مشدود بين نقطتين طولهما L هو: حيث n عدد طبيعي.	A	$\lambda = L/n$	B	$\lambda = L/2n$	C	$\lambda = L$	D	$\lambda = 2L/n$
2	علاقة ديبرولي لطول موجة الإلكترون هي:	A	$\lambda = 1/2hc$	B	$\lambda = 2hc$	C	$\lambda = h/P^2$	D	$\lambda = h/P$
3	أحد هذه التوابع هو تابع موجي مقبول فيزيائياً هو:	A	$\Psi_4 = 1/2 X$	B	$\Psi_3 = 5x^2$	C	$\Psi_2 = \exp(-3x)$	D	$\Psi_1 = \exp(-x^2)$
4	أحد هذه التوابع هو تابع خاص للمؤثر d/dx :	A	$\Psi_4 = \cos x$	B	$\Psi_3 = 5x^2$	C	$\Psi_2 = \exp(x)$	D	$\Psi_1 = \ln 1/x$
5	القيم الخاصة لطاقة جسيم كتلته (m) ويتحرك بصندوق وحيد البعد طولها (a) وطاقته الكامنة تساوي الصفر هي:	A	$E_n = nh/8ma$	B	$E_n = n^2h^2/8ma^2$	C	$E_n = 1/2(n+h)$	D	$E_n = T+V/2$
6	طاقة جسيم كتلته m يتحرك على محيط دائرة الكمون عليها يساوي الصفر هي:	A	$E_4 = k^2 h^2 / 2l$	B	$E_3 = k^2 h^2 / 2m$	C	$E_2 = k^2 h^2 / 2r$	D	$E_1 = k h / 2r^2$
7	إن توالد سوية الطاقة ذات العدد الكوموي $(j=5)$ لجسيم متحرك على سطح كروي يساوي:	A	12	B	13	C	11	D	42
8	إن القيمة العظمى للمركبة Z للعزم المداري الزاوي من أجل ذرة الهيدروجين في الحالة $n=4$ تساوي:	A	$2h$	B	$3h$	C	$\sqrt{12}h$	D	$\sqrt{6}h$
9	تتمتع معادلة شرودنجر المستقلة عن الزمن لجسيم:	A	بتابع خاص غير منظم	B	طاقة كامنة مستقلة	C	بطول موجة دي بروي	D	بطاقة كلية مستقلة عن
10	يتمتع الهزاز التوافقي الكوموي:	A	بالخاصة $\Psi=0$ عند نقاط التقاطع التقليدية	B	بسويات طاقة متعددة مرتين	C	بسويات طاقة متناسبة مع مربع العدد الكوموي	D	بسويات طاقة متساوية البعد بين بعضها
11	عدد العقد السطحية الذي يتمتع بها المدار $4d$.	A	2	B	4	C	3	D	1
12	عدد العقد القطرية للمدار $4d$.	A	1	B	2	C	3	D	5
13	أحد الأطوال التالية ليس لطول موجة مستقرة في حبل مشدود بين نقطتين طولهما $L = 15 \text{ cm}$.	A	30	B	15	C	10	D	25
14	إن الطاقة الالكترونية للشاردة Li^{2+} في الحالة $2S$ تمثل:	A	الطاقة نفسها للهيدروجين في الحالة $1S$	B	ثمانية أضعاف طاقة الهيدروجين في الحالة $1S$	C	ربع طاقة الهيدروجين في الحالة $1S$	D	9/4 من طاقة الهيدروجين في الحالة $1S$
15	البعد المتوسط للإلكترون عن النواة في الحالة الأساسية لذرة الهيدروجين هو:	A	$r = 1.5 \text{ a.u}$	B	$r = 3 \text{ a.u}$	C	$r = 2/3 \text{ a.u}$	D	$r = \text{a.u}$
16	الطاقة الكامنة في ذرة الهيدروجين عندما يبتعد الإلكترون عن النواة بمقدار (0.5 a.u) هو:	A	$-1/4 \text{ a.u}$	B	$-1/2 \text{ a.u}$	C	-2 a.u	D	-1 a.u
17	إن القيمة العظمى للمركبة Z للعزم الزاوي المداري من أجل ذرة الهيدروجين في الحالة $n = 2$ هي:	A	$3h$	B	$2h$	C	$\sqrt{6}h$	D	$\sqrt{2}h$
18	عدد العقد الكلية للفلك $3d$ في ذرة الهيدروجين هي:	A	3	B	1	C	2	D	5
19	تعدد مستوي الطاقة $n=3$ في ذرة الهيدروجين هو:	A	3	B	1	C	2	D	4
20	طاقة ذرة الهيدروجين في الوضع $2S$ هو:	A	$-1/2 \text{ a.u}$	B	-2 a.u	C	$-1/8 \text{ a.u}$	D	$-3/4 \text{ a.u}$

$n=2$

يُرجع الصفحة الثانية





حل المسائل الأربعة الآتية

- المسألة الأولى: تتمتع ذرة الحديد (Fe) غير المثارة بالتركيب الالكتروني $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^6$. ما قيمة التوالد السبيني .
- المسألة الثانية:

تتمتع شاردة شبيهة بالهيدروجين بمركبة للعزم الزاوي تساوي $-2 a.u$. والمطلوب :

- ما القيمة الممكنة لطول متجهة العزم الزاوي لهذه الحالة .
- ما الرمز الذي يصف الحالة الموافقة بالجواب السابق .

• المسألة الثالثة:

ادرس حركة جسيم حر كتلته m في صندوق ثنائي البعد ذي الطولين L_x و L_y ، إذا كانت $L_x = 2L_y$ و $V = 0$ داخل الصندوق و $V = \infty$ خارجه .

- (a) اكتب عبارة سوياات الطاقة المسموح لها لهذه الجملة
(b) احسب طااقات ودرجة توالد أخفض أربع سوياات طاقة لهذه الجملة .

لفترض أن $V = 10$. ما تأثير هذا في القيم الخاصة والتوابع الموجية

• المسألة الرابعة:

ليكن لدينا ذرة البيريليوم ($Be (Z = 4)$) ، والمطلوب :

١- ما هو المؤثر الهاملتوني للذرة .

٢- ما هو التابع الموجي الذي يحقق مبدأ الاستبعاد لباولي .

٣- احسب طاقة الذرة وفقا للشحنة النووية الفعالة .

٤- احسب طاقة الذرة وفقا لتقريب الالكترونات المستقلة . لماذا تكون قيمة هذه الطاقة المحسوبة وفقا لهذا التقريب أقل من القيمة الحقيقية .

— انتهت الأسئلة —

مع تمنياتي لكم بالنجاح والتوفيق

مدرس المقرر

الاثنين : ٢٠٢٥/٢/٣

د. سليمان يوسف محمد

الطالب: الرقم الجامعي: المدة: ساعتان العلامة: 100 درجة	سلم تصحيح امتحان مقرر الكيمياء الكمومية طلاب السنة الثانية - الفصل الدراسي الأول 2024-2025 تمهل في إجابتك ولا تتسرع، نحن معك فتق بنفسك	 جامعة طرابلس كلية العلوم قسم الكيمياء
نموذج B		

(40) درجة

السؤال الأول:

اختر الإجابة الصحيحة مما يلي وسجلها في دفتر الإجابة (سجل رقم الإجابة فقط):

1	عدد العقد السطحية الذي يتمتع بها المدار 4d.	A	2	عدد العقد القطرية للمدار 4d.	A
2	أحد الأطوال التالية ليس لطول موجة مستقرة في حبل مشدود بين نقطتين طولهما $L = 15 \text{ CM}$.	A	3	إن الطاقة الإلكترونية للشاردة Li^{2+} في الحالة 2S تمثل:	A
3	الطاقة نفسها للهيدروجين في الحالة 1S	A	4	ربع طاقة الهيدروجين في الحالة 1S	C
4	البعد المتوسط للإلكترون عن النواة في الحالة الأساسية لذرة الهيدروجين هو:	A	5	الطاقة الكامنة في ذرة الهيدروجين عندما يبتعد الإلكترون عن النواة بمقدار (0.5 a.u) هو:	A
5	إن القيمة العظمى للمركبة Z للعزم الزاوي المداري من أجل ذرة الهيدروجين في الحالة $n = 2$ هي:	A	6	علاقة ديبرولي لطول موجة الإلكترون هي:	A
6	عدد العقد الكلية للفلك 3d في ذرة الهيدروجين هي:	A	7	أحد هذه التوابع هو تابع موجي مقبول فيزيائياً هو:	A
7	تعدد مستوي الطاقة $n = 2$ في ذرة الهيدروجين هو:	A	8	أحد هذه التوابع هو تابع خاص للمؤثر d/dx :	A
8	طاقة ذرة الهيدروجين في الوضع 2S هو:	A	9	القيم الخاصة لطاقة جسيم كتلته (m) ويتحرك بصندوق وحيد البعد طوله (a) وطاقته الكامنة تساوي الصفر هي:	A
9	شرط تكون أمواج مستقرة في حبل مشدود بين نقطتين طولهما L هو: حيث n عدد طبيعي.	A	10	طاقة جسيم كتلته m يتحرك على محيط دائرة الكمون عليها يساوي الصفر هي:	A
10	علاقة ديبرولي لطول موجة الإلكترون هي:	A	11	إن توالد سوية الطاقة ذات العدد الكمومي (j=5) لجسيم متحرك على سطح كروي يساوي:	A
11	أحد هذه التوابع هو تابع موجي مقبول فيزيائياً هو:	A	12	إن القيمة العظمى للمركبة Z للعزم المداري الزاوي من أجل ذرة الهيدروجين في الحالة $n=4$ تساوي:	A
12	علاقة ديبرولي لطول موجة الإلكترون هي:	A	13	تتمتع معادلة شرودنجر المستقلة عن الزمن لجسيم:	A
13	أحد هذه التوابع هو تابع خاص للمؤثر d/dx :	A	14	بإمتنع الهزاز التوافقي الكمومي:	A
14	القيم الخاصة لطاقة جسيم كتلته (m) ويتحرك بصندوق وحيد البعد طوله (a) وطاقته الكامنة تساوي الصفر هي:	A	15	بالخاصة $\psi=0$ عند نقاط التقاطع التقليدية	A
15	طاقة جسيم كتلته m يتحرك على محيط دائرة الكمون عليها يساوي الصفر هي:	A	16	بإمتنع الهزاز التوافقي الكمومي:	A
16	إن توالد سوية الطاقة ذات العدد الكمومي (j=5) لجسيم متحرك على سطح كروي يساوي:	A	17	بإمتنع الهزاز التوافقي الكمومي:	A
17	إن القيمة العظمى للمركبة Z للعزم المداري الزاوي من أجل ذرة الهيدروجين في الحالة $n=4$ تساوي:	A	18	بإمتنع الهزاز التوافقي الكمومي:	A
18	تتمتع معادلة شرودنجر المستقلة عن الزمن لجسيم:	A	19	بإمتنع الهزاز التوافقي الكمومي:	A
19	بإمتنع الهزاز التوافقي الكمومي:	A	20	بإمتنع الهزاز التوافقي الكمومي:	A



حل المسائل الأربعة الآتية

- **المسألة الأولى:** تتمتع ذرة الحديد (Fe) غير المثارة بالتركيب الإلكتروني $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^6$ ما قيمة التوالد السبيني .

٥- جميع الإلكترونات قبل $3d^6$ متزاوجة بالسبين في مداراتها ولا تشارك في القيمة العظمى M_s ، وفي $3d^6$ يوجد أربع إلكترونات فردية
٥- وتكون سبينات الإلكترونات الأربعة متساوية ، وتكون القيمة العظمى M_s هي : $M_s = \frac{1}{2} \times 4 = 2$ و $2s+1=5$ والتوالد خماسي
إذا كتب الطالب التوالد خماسي دون حساب بأحد عند درجا 2

- **المسألة الثانية:**

تتمتع شاردة شبيهة بالهيدروجين بمركبة للعزم الزاوي تساوي $-2 a.u$. والمطلوب :

- ما القيمة الممكنة لطول متجهة العزم الزاوي لهذه الحالة .
- بالرمز الذي يصف الحالة الموافقة بالجواب السابق .

٥- القيمة الممكنة لطول متجهة العزم الزاوي لهذه الحالة هو $\sqrt{6} a.u$ أو $\sqrt{6} \hbar$
٥- ويرمز للحالة $d-2$

- **المسألة الثالثة:**

ادرس حركة جسيم حر كتلته m في صندوق ثنائي البعد ذي الطولين L_x و L_y ، إذا كانت $L_x = 2L_y$ و $V=0$ داخل الصندوق و $V=\infty$ خارجه .

- (a) اكتب عبارة سويات الطاقة المسموح لها لهذه الجملة
- (b) احسب طاقات ودرجة توالد أخفض أربع سويات طاقة لهذه الجملة .

لنفترض أن $V=10$. ماتأثير هذا في القيم الخاصة والتوابع الموجية

الجواب :

- $E_{x,y} = n_x^2 \hbar^2 / 8mL_x^2 + n_y^2 \hbar^2 / 8mL_y^2$ - a
- وبما أن $L_y = L_x/2$ نعوض $L_x = 2L_y$
- فنحصل على $E_{x,y} = \hbar^2 / 8m (n_x^2 / L_x^2 + 4n_y^2 / L_x^2)$ خمس درجات

- -b طاقة نقطة الصفر هي عندما $n_x = n_y = 1$ فتكون طاقة نقطة الصفر هي
- $E_{1,1} = \hbar^2 / 8m (1/L_x^2 + 4/L_x^2) = 5\hbar^2 / 8mL_x^2$ خمس درجات



- C - طاقات أخفض أربع سويات لهذه الجملة . ثمان درجات درجات
- $E_{1,1} = 5h^2/8mL^2$, $E_{2,1} = 8h^2/8mL^2$, $E_{3,1} = 13h^2/8mL^2$, $E_{1,2} = 17h^2/8mL^2$
- تتغير جميع القيم الخاصة للطاقة بالمقدار 10 ولا تؤثر في التوابع الخاصة درجتان

المسألة الرابعة:

- ليكن لدينا ذرة البيريليوم ($Z=4$) ، والمطلوب :
- ١- ماهو المؤثر الهاملتوني للذرة .
- ٢- ماهو التابع الموجي الذي يحقق مبدأ الاستبعاد لباولي .
- ٣- احسب طاقة الذرة وفقاً للشحنة النووية الفعالة .
- ٤ - احسب طاقة الذرة وفقاً لتقريب الالكترونات المستقلة . لماذا تكون قيمة هذه الطاقة المحسوبة وفقاً لهذا التقريب أقل من القيمة الحقيقية .

$$\hat{H}(1,2,3,4) = \sum_{i=1}^{n=4} -\frac{1}{2} \nabla_i^2 - \frac{Z}{r_i} + \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=i+1}^n \frac{1}{r_{ij}}$$

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{4!}} \begin{vmatrix} \psi_1 & \psi_2 & \psi_3 & \psi_4 \\ \bar{\psi}_1 & \bar{\psi}_2 & \bar{\psi}_3 & \bar{\psi}_4 \\ \psi_1 & \psi_2 & \psi_3 & \psi_4 \\ \bar{\psi}_1 & \bar{\psi}_2 & \bar{\psi}_3 & \bar{\psi}_4 \end{vmatrix}$$

٣ - حسب طاقة الذرة وفق الشحنة النووية الفعالة . لذلك يجب حساب الشحنة النووية

$$E = -\frac{1}{2} Z^2 \left(\frac{e_1}{n_1} \right)^2 + \frac{1}{2} \left[-Z \left(\frac{e_2}{n_2} \right)^2 \right] = \dots$$

انتهت الأسئلة -

مع تمنياتي لكم بالنجاح والتوفيق

مدرس المقرر

د. سليمان يوسف محمد

س

اللاتين : ٢٠٢٥ / ٢ / ٣

و تكون الطاقة المحسوبة بتأثير الشحنة النووية الفعالة وكذلك
طاقة الذرة وفقاً للالكترونات المستقلة
وهي من الطاقة التجريبية بسبب إهمال طاقته تدفع بين
الالكترونات حوصية

الطالب: الرقم الجامعي: المدة: ساعتان العلامة: 100 درجة	امتحان مقرر الكيمياء الكوموية طلاب السنة الثانية - الدورة التكميلية للعام الدراسي 2024 - 2023 تمهل في إجابتك ولا تتسرع، نحن معك فثق بنفسك	جامعة طرطوس كلية العلوم قسم الكيمياء 
---	--	---

السؤال الأول: (٣٠) درجة

- اختر الإجابة الصحيحة مما يلي وسجلها في دفتر الإجابة (سجل رقم الإجابة فقط):
- (1) أحد الأطوال التالية ليس لموجة مستقرة في حبل مشدود بين نقطتين طولهما $L=15\text{cm}$.
 25 cm D 10 cm C 15 cm B 30 cm A
- (2) إن القيمة العظمى للمركبة Z للجزء الزاوي المداري من أجل ذرة الهيدروجين في الحالة $n=3$.
 $\sqrt{6}h$ D $\sqrt{12}h$ C $3h$ B $2h$ A
- (3) أحد هذه التوابع هو تابع موجي مقبول فيزيائياً هو:
 $\psi_1 = \exp(-ax^2)$ D $\psi_2 = \exp(-ix)$ C $\psi_3 = x^2$ B $\psi_4 = 5x$ A
- (4) أحد هذه التوابع هو تابع خاص للمؤثر d^2/dx^2 :
 $\psi_1 = \ln 1/x$ D $\psi_2 = \exp(-x^2)$ C $\psi_3 = 5x^2$ B $\psi_4 = \sin x$ A
- (5) القيم الخاصة لطاقة جسيم كتلته (m) ويتحرك بصندوق وحيد البعد طوله (a) وطاقته الـ تساوي الصفر هي:
 $E_n = T+V/2$ D $E_n = 1/2(n+h)$ C $E_n = n^2h^2/8ma^2$ B $E_n = nh/8ma$ A
- (6) طاقة جسيم كتلته m يتحرك على محيط دائرة الكمون عليها يساوي الصفر هي:
 $E_1 = k\hbar^2/2r^2$ D $E_2 = k^2\hbar^2/2r$ C $E_3 = k^2\hbar^2/2m$ B $E_4 = k^2\hbar^2/2l$ A
- (7) إن توالد سوية الطاقة ذات العدد الكوموي ($j=6$) لجسيم متحرك على سطح كروي يساوي:
 42 D 15 C 13 B 12 A
- (8) إن الطاقة الإلكترونية للشاردة Li^{2+} في الحالة 2S هي:
 4/9 a.u. B 2 a.u. A
 9/4 a.u. D 9/8 a.u. C
- (9) البعد المتوسط للإلكترون عن النواة في الحالة الأساسية لذرة الهيدروجين هو:
 $r = a.u$ D $r = 2/3 a.u$ C $r = 3 a.u$ B $r = 1.5 a.u$ A
- (10) الطاقة الكامنة في ذرة الهيدروجين عندما يبتعد الإلكترون عن النواة بمقدار (0.5 a.u) هو:
 $-1 a.u$ D $-2 a.u$ C $-1/2 a.u$ B $-1/4 a.u$ A
- (11) طاقة ذرة الهيدروجين في الوضع 2S هو:
 $-1/8 a.u$ D $-2 a.u$ C $-a.u$ B $-1/2 a.u$ A
- (12) طاقة تأين الشاردة C^{+5} في حالتها الأساسية بوحدة الإلكترون (فولت)
 68.29 eV D 81.63 eV C 244.904 eV B $IE = 489.808 \text{ eV}$ A
- (13) طاقة He^+ عندما $n=2$ هي:
 $-4 a.u$ D $-a.u$ C $-2 a.u$ B $-1/2 a.u$ A
- (14) تعدد مستوي الطاقة $n=3$ في ذرة الهيدروجين هو:
 5 D 16 C 9 B 8 A
- (15) عدد العقد الكلية للفلك 3d في ذرة الهيدروجين هي:
 1 D 2 C 3 B 4 A

السؤال الثاني:

(٢٠) درجة للمسألة الأولى (٢٠) درجة للمسألة الثانية (٣٠) درجة للمسألة الثالثة



حل المسائل الثلاثة التالية :

• المسألة الأولى:

احسب الطاقة التقريبية لذرة الليتيوم حيث التركيب الالكتروني هو ($1S^2 2S^1$) اعتمادا على نظرية الالكترونات المستقلة، واحسب القيمة التجريبية للطاقة إذا كانت طاقة التشرد الأولى والثانية على الترتيب هي:

$$2.778 \text{ a.u.}, 0.198 \text{ a.u.}$$

هل تفاجئك النتيجة، علل ذلك.

• المسألة الثانية:

أجب عما يلي:

- ما الطاقة الكامنة المتوسطة والطاقة الحركية المتوسطة من أجل الهزاز التوافقي عند $(n=4)$.
- ما هو تواتر الضوء اللازم لإثارة جسيم كتلته m يتحرك في صندوق أحادي البعد طوله $2L$ من $(n_1=1)$ الى $(n_2=2)$ إذا كان تواتر الضوء اللازم لإثارة الجسيم نفسه في صندوق طوله L هو ν

• المسألة الثالثة:

ادرس حركة جسيم حر كتلته m في صندوق ثنائي البعد ذي الطولين L_x و L_y ، إذا كانت $L_y = 2L_x$ و $V=0$ داخل الصندوق و $V=\infty$ خارجه .

- (a) اكتب عبارة سويات الطاقة المسموح لها لهذه الجملة .
- (b) ما طاقة نقطة الصفر لهذه الجملة .
- (c) احسب طاقات ودرجة توالد أخفض أربع سويات طاقة لهذه الجملة .

لنفترض أن $V=10$. ماتأثير هذا في القيم الخاصة والتوابع الموجية

— انتهت الأسئلة —

مع تمنياتي لكم بالنجاح والتوفيق

مدرس المقرر

د. سليمان يوسف محمد

الاسم: ٢٠١٤/٩/١١

الأرياء

١١/٩/٢٠١٤

الطالب: الرقم الجامعي: المدة: ساعتان العلامة: ١٠٠ درجة	سلم تصحيح امتحان مقرر الكيمياء الكمومية لطلاب السنة الثانية - الفصل الدراسي الثاني 2023-2024 تمهل في إجابتك ولا تتسرع، نحن معك مثق بنفسك	جامعة طرطوس كلية العلوم قسم الكيمياء 
---	---	---

(٣٠) درجة

السؤال الأول:

اختر الإجابة الصحيحة مما يلي وسجلها في دفتر الإجابة (سجل رقم الإجابة فقط):

(1)	أحد الأطوال التالية ليس لموجة مستقرة في حبل مشدود بين نقطتين طولها $L=15\text{cm}$.	A	30 cm	B	15 cm	C	10 cm	D	25 cm
(2)	إن القيمة العظمى للمركبة Z للعزم الزاوي المداري من أجل ذرة الهيدروجين في الحالة $n=3$ هي:	A	2 h	B	3 h	C	$\sqrt{12} h$	D	$\sqrt{6} h$
(3)	أحد هذه التوابع هو تابع موجي مقبول فيزيائياً هو:	A	$\Psi_4 = 5x$	B	$\Psi_3 = x^2$	C	$\Psi_2 = \exp(-x)$	D	$\Psi_1 = \exp(-ax^2)$
(4)	أحد هذه التوابع هو تابع خاص للمؤثر d^2/dx^2 :	A	$\Psi_4 = \sin x$	B	$\Psi_3 = 5x^2$	C	$\Psi_2 = \exp(-x^2)$	D	$\Psi_1 = \ln 1/x$
(5)	القيم الخاصة لطاقة جسيم كتلته (m) ويتحرك بصندوق وحيد البعد طولها (a) وطاقته الكامنة تساوي الصفر هي:	A	$E_n = nh/8ma$	B	$E_n = n^2h^2/8ma^2$	C	$E_n = 1/2(n+h)$	D	$E_n = T+V/2$
(6)	طاقة جسيم كتلته m يتحرك على محيط دائرة الكمون عليها يساوي الصفر هي:	A	$E_4 = k^2 h^2 / 2l$	B	$E_3 = k^2 h^2 / 2m$	C	$E_2 = k^2 h^2 / 2r$	D	$E_1 = k h^2 / 2r^2$
(7)	إن توالد سوية الطاقة ذات العدد الكمومي ($j=6$) لجسيم متحرك على سطح كروي يساوي:	A	12	B	13	C	15	D	42
(8)	إن الطاقة الالكترونية للشاردة Li^{2+} في الحالة 2S هي:	A	2 a.u	B	4/9 a.u	C	9/4 a.u	D	4/9 a.u
(9)	البعد المتوسط للإلكترون عن النواة في الحالة الأساسية لذرة الهيدروجين هو:	A	$r=1.5 \text{ a.u}$	B	$r=3 \text{ a.u}$	C	$r=2/3 \text{ a.u}$	D	$r= \text{a.u}$
(10)	الطاقة الكامنة في ذرة الهيدروجين عندما يتبعد الإلكترون عن النواة بمقدار (0.5 a.u) هو:	A	-1/4 a.u	B	-1/2 a.u	C	-2 a.u	D	-1 a.u
(11)	طاقة ذرة الهيدروجين في الوضع 2S هو:	A	-1/2 a.u	B	-a.u	C	-2 a.u	D	-1/8 a.u
(12)	طاقة تأين الشاردة C^{+5} في حالتها الأساسية بوحدة الالكترون (فولت)	A	IE=489.808 e v	B	244.904 e v	C	81.63 e v	D	68.29 e v
(13)	طاقة He^+ عندما $n=2$ هي:	A	-1/2 a u	B	-2 a u	C	-a u	D	-4 a.u
(14)	تعدد مستوي الطاقة $n=3$ في ذرة الهيدروجين هو:	A	8	B	9	C	16	D	5
(15)	عدد العقد الكلية للفلك 3d في ذرة الهيدروجين هي:	A	4	B	3	C	2	D	1

لكل عبارة صحيحة ينال الطالب درجتان

مجموع درجات السؤال الأول هي ٣٠ درجة



السؤال الثاني: درجة للمسألة الأولى (٢٠) درجة للمسألة الثانية (٢٠) درجة للمسألة الثالثة (٣٠)

حل المسائل الثلاث الآتية

• المسألة الأولى:

احسب الطاقة التقريبية لذرة الليثيوم اعتماداً على نظرية الاكترونات المستقلة حيث التركيب الألكتروني هو $(1s^2 2s^1)$. واحسب القيمة التجريبية للطاقة اذا كانت طاقة التشرذ الأولى والثانية على الترتيب هي 0.198 a.u , 2.778 a.u . هل تفاجئك النتيجة علل ذلك .

نصيب الطاقة وفقاً للتوزيع الإلكتروني نظرياً وفق نظرية التقريب المستقل .

$$E = \sum_i g_i E_i = 2E_{1s} - E_{2s} = -\frac{1}{2} \left[2 \left(\frac{Z}{n_1} \right)^2 + \left(\frac{Z}{n_2} \right)^2 \right]$$

$$= -\frac{1}{2} \left[2 \left(\frac{3}{1} \right)^2 + \left(\frac{3}{2} \right)^2 \right] = -10.125 \text{ a.u.}$$

القيمة التجريبية يجب ان تساوي القيمة السالبة لمجموع طاقة التشرذ الثلاثة ولكن نحسب الى القيمة السالبة طاقة التشرذ الى نص نظرياً على النحو الآتي

$$IE_3 = -E_{Li} = -\frac{1}{2} \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{Z}{n_2} \right)^2 \right] = \frac{1}{2} \left(\frac{3}{1} \right)^2 = 4.5 \text{ a.u.}$$

وهكذا نأخذ $E = -(IE_1 + IE_2 + IE_3) = -(0.198 + 2.778 + 4.500) = -7.46 \text{ a.u.}$

• المسألة الثانية:

أجب عما يلي:

• ما الطاقة الكامنة المتوسطة والطاقة الحركية المتوسطة من أجل الهزاز التوافقي عند $(n=4)$.

• ما هو تواتر الضوء اللازم لإثارة جسيم كتلته m يتحرك في صندوق أحادي البعد طوله $2L$ من $(n_1=1)$ الى $(n_2=2)$ إذا كان تواتر الضوء اللازم لإثارة الجسيم نفسه في صندوق طوله L هو ν

$$\bar{T} = \bar{V} = \frac{1}{2} E \text{ ; } E = \left(n + \frac{1}{2} \right) h \nu = \frac{9}{2} \text{ a.u.}$$

$$\bar{T} = \bar{V} = \frac{9}{4} \text{ a.u.}$$

$$E = \frac{n^2 h^2}{8mL^2}$$

نصيب طاقة الجسيم وفق العلاقة

$$\Delta E = E_2 - E_1 = \frac{4h^2}{8mL^2} - \frac{h^2}{8mL^2} = \frac{3h^2}{8mL^2}$$

$$\Delta E = h \nu \text{ وهو يساوي } \frac{3h^2}{8mL^2} \text{ ونقوم بوضع الحايات}$$

$$\nu = \frac{\Delta E}{h} \text{ و } L = 2L \text{ وبالحاي نجد ان } \nu = \frac{\nu}{4}$$



• المسألة الثالثة:

ادرس حركة جسيم حر كتلته m في صندوق ثنائي البعد ذي الطولين L_x و L_y ، إذا كانت $L_x = 2 L_y$ و $V = 0$ داخل الصندوق و $V = \infty$ خارجه .

- (a) اكتب عبارة سويا ت الطاقة المسموح لها لهذه الجملة .
(b) ما طاقة نقطة الصفر لهذه الجملة .
(c) احسب طاقات ودرجة توالد أخفض أربع سويا ت طاقة لهذه الجملة .
(d) لنفترض أن $V = 10$. ما تأثير هذا في القيم الخاصة والتوابع الموجية .

الجواب :

$$E_{x,y} = n_x^2 \frac{h^2}{8mL_x^2} + n_y^2 \frac{h^2}{8mL_y^2} \quad - a$$

وبما أن $L_x = 2 L_y$ نعوض $L_y = L_x/2$

$$E_{x,y} = \frac{h^2}{8m} \left(n_x^2/L_x^2 + 4n_y^2/L_x^2 \right)$$

عشر درجات

-b- طاقة نقطة الصفر هي عندما $n_x = n_y = 1$ فتكون طاقة نقطة الصفر هي

خمس درجات

$$E_{1,1} = \frac{h^2}{8m} \left(1/L_x^2 + 4/L_x^2 \right) = 5h^2 / 8mL_x^2$$

عشر درجات

- c - طاقات أخفض أربع سويا ت لهذه الجملة .

$$E_{1,1} = 5h^2/8mL_x^2 \quad , \quad E_{2,1} = 8h^2/8mL_x^2 \quad , \quad E_{3,1} = 13h^2/8mL_x^2 \quad , \quad E_{1,2} = 17h^2/8mL_x^2$$

تتغير جميع القيم الخاصة للطاقة بالمقدار 10 ولا تؤثر في التوابع الخاصة . خمس درجات

الأربعاء ١١/٩/٢٠٢٤

مدرس المقرر

د. سليمان يوسف محمد

الطالب: الرقم الجامعي: المدة: ساعتان العلامة: ١٠٠ درجة	امتحان مقرر الكيمياء الكمومية طلاب السنة الثانية - الفصل الدراسي الثاني 2023-2024 تمهل في إجابتك ولا تتسرع، نحن معك فائق بنفيسك	جامعة طرطوس كلية العلوم قسم الكيمياء 
---	--	---

درجة (٣٠)

السؤال الأول:

اختر الإجابة الصحيحة مما يلي وسجلها في دفتر الإجابة (سجل رقم الإجابة فقط):

(1) أحد الأطوال التالية ليس لموجة مستقرة في حبل مشدود بين نقطتين طوله $L=15\text{Cm}$.	A	30 Cm	B	15 Cm	C	10 Cm	D	25 Cm
(2) إن القيمة العظمى للمركبة Z للعزم الزاوي المداري من أجل ذرة الهيدروجين في الحالة $n=3$ هي:	A	2 h	B	3 h	C	$\sqrt{12} h$	D	$\sqrt{6} h$
(3) أحد هذه التوابع هو تابع موجي مقبول فيزيائياً هو:	A	$\Psi_4 = 5x$	B	$\Psi_3 = x^2$	C	$\Psi_2 = \exp(-x)$	D	$\Psi_1 = \exp(-ax^2)$
(4) أحد هذه التوابع هو تابع خاص للمؤثر d^2/dx^2 :	A	$\Psi_4 = \sin x$	B	$\Psi_3 = 5x^2$	C	$\Psi_2 = \exp(-x^2)$	D	$\Psi_1 = \ln 1/x$
(5) القيم الخاصة لطاقة جسيم كتلته (m) ويتحرك بصندوق وحيد البعد طوله (a) وطاقته الكامنة تساوي الصفر هي:	A	$E_n = nh/8ma$	B	$E_n = n^2h^2/8ma^2$	C	$E_n = 1/2(n+h)$	D	$E_n = T+V$
(6) طاقة جسيم كتلته m يتحرك على محيط دائرة الكمون عليها يساوي الصفر هي:	A	$E_4 = k^2 h^2 / 2l$	B	$E_3 = k^2 h^2 / 2m$	C	$E_2 = k^2 h^2 / 2r$	D	$E_1 = k h / 2r^2$
(7) إن توالد سوية الطاقة ذات العدد الكمومي ($j=6$) لجسيم متحرك على سطح كروي يساوي:	A	12	B	13	C	15	D	42
(8) إن الطاقة الالكترونية للشاردة Li^{2+} في الحالة 2S هي:	A	2 a.u	B	4/9 a.u	C	9/4 a.u	D	4/9 a.u
(9) البعد المتوسط للالكترون عن النواة في الحالة الأساسية لذرة الهيدروجين هو:	A	r=1.5 a.u	B	r=3 a.u	C	r=2/3 a.u	D	r=a.u
(10) الطاقة الكامنة في ذرة الهيدروجين عندما يبتعد الالكترون عن النواة بمقدار (0.5 a.u) هو:	A	-1/4 a.u	B	-1/2 a.u	C	-2 a.u	D	-1 a.u
(11) طاقة ذرة الهيدروجين في الوضع 2S هو:	A	-1/2 a.u	B	-a.u	C	-2 a.u	D	-1/8 a.u
(12) طاقة تأين الشاردة C^{+5} في حالتها الأساسية بوحدة الالكترون (فولط)	A	IE=489.808 eV	B	244.904 eV	C	81.63 eV	D	68.29 eV
(13) طاقة He^+ عندما $n=2$ هي:	A	-1/2 a.u	B	-2 a.u	C	-a.u	D	-4 a.u
(14) تعدد مستوي الطاقة $n=3$ في ذرة الهيدروجين هو:	A	8	B	9	C	16	D	5
(15) عدد العقد الكلية للفلك 3d في ذرة الهيدروجين هي:	A	4	B	3	C	2	D	1

درجة للمسألة الأولى (١٥) درجة للمسألة الثانية (٢٠) درجة للمسألة الثالثة (١٥) درجة للمسألة الرابعة (٢٠)

السؤال الثاني:

حل المسائل الأربعة الآتية

• المسألة الأولى:

احسب طول موجة دبرولي من أجل كرة صغيرة وزنها 5 g تنطلق بسرعة 400 m.s^{-1} . علماً أن

$$h = 6.62 \times 10^{-34} \text{ J.s}^{-1}$$



• المسألة الثانية:

ادرس حركة جسيم حر كتلته m في صندوق ثنائي البعد ذي الطولين L_x و L_y ، إذا كانت $L_y = 2L_x$ و $V = 0$ داخل الصندوق و $V = \infty$ خارجه .

- (a) اكتب عبارة سويات الطاقة المسموح لها لهذه الجملة .
- (b) ما طاقة نقطة الصفر لهذه الجملة .
- (c) احسب طاقات ودرجة توالد أخفض أربع سويات طاقة لهذه الجملة .
- (d) لنفترض أن $V = 10$. ماتأثير هذا في القيم الخاصة والتوابع الموجية .

• المسألة الثالثة:

ماهي عبارة الطاقة للهاز التوافقي الكمومي، وماهي قيمة الطاقة الكلية والطاقة الكامنة المتوسطة والطاقة الحركية المتوسطة عند $n = 5$. ماهي طاقة نقطة الصفر للهاز E_0 .

• المسألة الرابعة:

ليكن لدينا ذرة الليتيوم ($Z = 3$) ، والمطلوب :

١- ماهو المؤثر الهاملتوني للذرة .

٢- ماهو التابع الموجي الذي يحقق مبدأ الاستبعاد لباولي .

٣- احسب طاقة الذرة وفقاً للشحنة النووية الفعالة .

٤ - احسب طاقة الذرة وفقاً لتقريب الالكترونات المستقلة . لماذا تكون قيمة هذه الطاقة المحسوبة وفقاً لهذا التقريب أقل من القيمة الحقيقية .

... انتهت الأسئلة -

مع تمنياتي لكم بالنجاح والتوفيق

الأحد: ٢٠٢٤/٧/١٦

مدرس المقرر

د. سليمان يوسف محمد

الطالب: الرقم الجامعي: المدة: ساعتان العلامة: ١٠٠ درجة	سلم تصحيح امتحان مقرر الكيمياء الكمومية لطلاب السنة الثانية - الفصل الدراسي الثاني 2023-2024 تمهل في إجابتك ولا تتسرع، نحن معك فثق بنفسك	 جامعة طرابلس كلية العلوم قسم الكيمياء
--	--	--

(٣٠) درجة

السؤال الأول:

اختر الإجابة الصحيحة مما يلي وسجلها في دفتر الإجابة (سجل رقم الإجابة فقط):

(1)	أحد الأطوال التالية ليس لموجة مستقرة في حبل مشدود بين نقطتين طولها $L=15\text{cm}$.	A	30 cm	B	15 cm	C	10 cm	D	25 cm
(2)	إن القيمة العظمى للمركبة Z للزخم الزاوي المداري من أجل ذرة الهيدروجين في الحالة $n=3$ هي:	A	2 h	B	3 h	C	$\sqrt{12} h$	D	$\sqrt{6} h$
(3)	أحد هذه التوابع هو تابع موجي مقبول فيزيائياً هو:	A	$\Psi_4 = 5x$	B	$\Psi_3 = x^2$	C	$\Psi_2 = \exp(-x)$	D	$\Psi_1 = \exp(-ax^2)$
(4)	أحد هذه التوابع هو تابع خاص للمؤثر d^2/dx^2 :	A	$\Psi_4 = \sin x$	B	$\Psi_3 = 5x^2$	C	$\Psi_2 = \exp(-x^2)$	D	$\Psi_1 = \ln 1/x$
(5)	القيم الخاصة لطاقة جسيم كتلته (m) ويتحرك بصندوق وحيد البعد طولها (a) وطاقته الكامنة تساوي الصفر هي:	A	$E_n = nh/8ma$	B	$E_n = n^2h^2/8ma^2$	C	$E_n = 1/2(n+h)$	D	$E_n = T+V/2$
(6)	طاقة جسيم كتلته m يتحرك على محيط دائرة الكمون عليها يساوي الصفر هي:	A	$E_4 = k^2 h^2 / 2l$	B	$E_3 = k^2 h^2 / 2m$	C	$E_2 = k^2 h^2 / 2r$	D	$E_1 = k h / 2r^2$
(7)	إن توالد سوية الطاقة ذات العدد الكمومي ($j=6$) لجسيم متحرك على سطح كروي يساوي:	A	12	B	13	C	15	D	42
(8)	إن الطاقة الإلكترونية للشاردة Li^{2+} في الحالة 2S هي:	A	2 a.u	B	4/9 a.u	C	9/4 a.u	D	9/8 a.u
(9)	البعد المتوسط للإلكترون عن النواة في الحالة الأساسية لذرة الهيدروجين هو:	A	$r=1.5 \text{ a.u}$	B	$r=3 \text{ a.u}$	C	$r=2/3 \text{ a.u}$	D	$r= \text{a.u}$
(10)	الطاقة الكامنة في ذرة الهيدروجين عندما يتبعد الإلكترون عن النواة بمقدار (0.5 a.u) هو:	A	-1/4 a.u	B	-1/2 a.u	C	-2 a.u	D	-1 a.u
(11)	طاقة ذرة الهيدروجين في الوضع 2S هو:	A	-1/2 a.u	B	-a.u	C	-2 a.u	D	-1/8 a.u
(12)	طاقة تأين الشاردة C^{+5} في حالتها الأساسية بوحدة الإلكترون (فولط)	A	$IE = 489.808 \text{ eV}$	B	244.904 eV	C	81.63 eV	D	68.29 eV
(13)	طاقة He^+ عندما $n=2$ هي:	A	-1/2 a.u	B	-2 a.u	C	-a.u	D	-4 a.u
(14)	تعدد مستوي الطاقة $n=3$ في ذرة الهيدروجين هو:	A	8	B	9	C	16	D	5
(15)	عدد العقد الكلية للفلك 3d في ذرة الهيدروجين هي:	A	4	B	3	C	2	D	1

لكل عبارة صحيحة ينال الطالب درجتان

مجموع درجات السؤال الأول هي ٣٠ درجة



السؤال الثاني: درجة للمسألة الأولى (١٥) درجة للمسألة الثانية (٢٠) درجة للمسألة الثالثة (١٥) درجة للمسألة الرابعة (٢٠)

حل المسائل الأربعة الآتية

• المسألة الأولى: ١٥ درجة

احسب طول موجة دبرولي من أجل كرة صغيرة وزنها 5 g تنطلق بسرعة 400 m.s^{-1} . علما أن

$$h = 6.62 \times 10^{-34} \text{ J.s}^{-1}$$

$$\lambda = 6.62 \times 10^{-34} \text{ J.s}^{-1} / 5 \cdot 10^{-3} \text{ (K.g)} \times 400 \text{ m s}^{-1}$$

$$= 3.31 \times 10^{-25} \text{ nm}$$

- التعويض في علاقة دبرولي ١٠ درجات والحصول على الجواب بشكل صحيح بالنانو متر ٥ درجة
- كتابة علاقة دبرولي بدون تعويض ٥ درجة

• المسألة الثانية: ٢٥ درجة

ادرس حركة جسيم حر كتلته m في صندوق ثنائي البعد ذي الطولين L_x و L_y ، إذا كانت $V = 0$ داخل الصندوق و $V = \infty$ خارجه .

- اكتب عبارة سويات الطاقة المسموح لها لهذه الجملة .
- ما طاقة نقطة الصفر لهذه الجملة .
- احسب طاقات ودرجة توالد أخفض أربع سويات طاقة لهذه الجملة .
- لنفترض أن $V = 10$. ما تأثير هذا في القيم الخاصة والتوابع الموجية .

الجواب :

$$E_{x,y} = n_x^2 h^2 / 8mL_x^2 + n_y^2 h^2 / 8mL_y^2 \quad - a$$

$$L_x = 2 L_y \quad \text{نعوض} \quad L_y = L_x / 2$$

$$\text{فنحصل على } E_{x,y} = h^2 / 8m (n_x^2 / L_x^2 + 4n_y^2 / L_x^2)$$

خمس درجات

-b طاقة نقطة الصفر هي عندما $n_x = n_y = 1$ فتكون طاقة نقطة الصفر هي

$$E_{1,1} = h^2 / 8m (1/L_x^2 + 4/L_x^2) = 5h^2 / 8mL_x^2$$

خمس درجات

- c طاقات أخفض أربع سويات لهذه الجملة .

$$E_{1,1} = 5h^2 / 8mL_x^2 \quad , \quad E_{2,1} = 8h^2 / 8mL_x^2 \quad , \quad E_{3,1} = 13h^2 / 8mL_x^2 \quad , \quad E_{1,2} = 17h^2 / 8mL_x^2$$

أربع درجات



تتغير جميع القيم الخاصة للطاقة بالمقدار 10 ولا تؤثر في التوابع الخاصة .

ستة درجات

المسألة الثالثة: ١٥ درجة

ماهي عبارة الطاقة للهزاز التوافقي الكمومي، وماهي قيمة الطاقة الكلية والطاقة الكامنة المتوسطة والطاقة الحركية المتوسطة عند $n = 5$. ماهي طاقة نقطة الصفر للهزاز E_0 .

الجواب :

$$E = (m + 1/2) h\nu$$

خمس درجات

$$E_5 = (5 + 1/2) h\nu = (11/2) h\nu$$

١ درجات

$$E_v = (11/4) h\nu$$

٢ درجات

$$E_T = (11/4) h\nu$$

درجتان

$$E_0 = 1/2 h\nu$$

ثلاث درجات

المسألة الرابعة: ٢٥ درجة

ليكن لدينا ذرة الليتيوم ($Z = 3$) ، والمطلوب :

١- ماهو المؤثر الهاملتوني للذرة .

٢- ماهو التابع الموجي الذي يحقق مبدأ الاستبعاد لباولي .

٣- احسب طاقة الذرة وفقا للشحنة النووية الفعالة .

٤ - احسب طاقة الذرة وفقا لتقريب الالترونات المستقلة . لماذا تكون قيمة هذه الطاقة المحسوبة وفقا لهذا التقريب أقل من القيمة الحقيقية .

جواب السؤال الثاني المسألة الرابعة :

1 - يكتب المؤثرات التي تؤثر في لذرة الليثيوم ($Z=3$) على النحو التالي :

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^3 \left(-\frac{1}{2} \nabla_i^2 - \frac{Z}{r_i} \right) + \frac{1}{r_{12}} + \frac{1}{r_{23}} + \frac{1}{r_{13}} = \hat{h}_{(1)} + \hat{h}_{(2)} + \hat{h}_{(3)} + \hat{h}'$$

$$h_{(i)} = -\frac{1}{2} \nabla_i^2 - \frac{Z}{r_i} \quad \hat{h}' = \frac{1}{r_{12}} + \frac{1}{r_{23}} + \frac{1}{r_{13}}$$

2 - التابع الموجبي الذي يحقق مبدأ الاستبعاد لباولي هو : يكتب بأحداث كلين

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{3!}} \begin{vmatrix} 1s(1) & 1s(2) & 2s(1) \\ 1s(3) & 1s(2) & 2s(2) \\ 1s(3) & 1s(3) & 2s(3) \end{vmatrix} \quad \psi = \frac{1}{\sqrt{3!}} \begin{vmatrix} 1s(1) & 1s(2) & 1s(3) \\ 1s(1) & 1s(2) & 1s(3) \\ 2s(1) & 2s(2) & 2s(3) \end{vmatrix}$$

3 - حسب طاقته الذرة وفقاً للنسبة النووية الفعالة من العلاقة :

$$E = 2 E_{1s} + E_{2s} = -\frac{1}{2} \left[2 \left(\frac{Z_{1s}}{n_1} \right)^2 + \left(\frac{Z_{2s}}{n_2} \right)^2 \right]$$

ويطلب تطبيق هذه العلاقة ومعرفة قيمة كل من Z_{1s} و Z_{2s} من العلاقات

$$Z = Z - \sigma = Z - [(n-1) \times 0.35 + 9_1 \times 0.85 + 9_2 \times 1.0]$$

! إذا احتل n عدد الإلكترونات في المجموعة المدروسة و 9_1 عدد الإلكترونات المجاورة 9_2 عدد الإلكترونات الأخرى إلى النواة والحساب

$$Z_{1s} = Z - \sigma = 3 - (1 \times 0.35) = 2.7$$

$$Z_{2s} = Z - \sigma = 3 - (0 \times 0.35 + 2 \times 0.85) = 1.3$$

وبالتعويض نحصل على الأتي :

$$E = -\frac{1}{2} \left[2 \left(\frac{Z_{1s}}{n_1} \right)^2 + \left(\frac{Z_{2s}}{n_2} \right)^2 \right] = -7.5013 \text{ ا.ط.ا.}$$

4 - حسب الطاقة حسب الإلكترونات المستقلة :

$$E_{ap} = \sum 9_i E_i = 2 E_{1s} + E_{2s}$$

$$= -\frac{1}{2} \left[2 \left(\frac{Z}{n_1} \right)^2 + \left(\frac{Z}{n_2} \right)^2 \right] = -\frac{1}{2} \left[2 \left(\frac{3}{1} \right)^2 + \left(\frac{3}{2} \right)^2 \right] = -15.12$$

والطاقة المحسوبة وفقاً لهذا التقريب تكون أعلى من القيمة الحقيقية

بسبب إهمال طاقة التداخل وهي قيمة موجبة .

الطالب: الرقم الجامعي: المدة: ساعتان العلامة: ١٠ درجة	امتحان مقرر الكيمياء الكوموية طلاب السنة الثانية - الفصل الدراسي الأول 2024-2023 تمهل في إجابتك ولا تتسرع، نحن معك فثق بنفسك	 جامعة طرابلس كلية العلوم قسم الكيمياء
---	--	--

درجة (30)

السؤال الأول:

اختر الإجابة الصحيحة مما يلي وسجلها في دفتر الإجابة (سجل رقم الإجابة فقط):

- (1) شرط تكون أمواج مستقرة في حبل مشدود بين نقطتين طولهما L ، حيث n عدد طبيعي هو:
- A $\lambda = L/n$ B $\lambda = L/2n$ C $\lambda = L$ D $\lambda = 2L/n$
- (2) إن القيمة العظمى للمركبة Z للعزم الزاوي المداري من أجل ذرة الهيدروجين في الحالة $n=4$ هي:
- A $2\hbar$ B $3\hbar$ C $\sqrt{12}\hbar$ D $\sqrt{6}\hbar$
- (3) أحد هذه التوابع هو تابع موجي مقبول فيزيائياً هو:
- A $\psi_4 = x$ B $\psi_3 = 5x^2$ C $\psi_2 = e^{x(-3x)}$ D $\psi_1 = \exp(-x^2)$
- (4) أحد هذه التوابع هو تابع خاص للمؤثر d/dx :
- A $\psi_4 = \sin x$ B $\psi_3 = 5x^2$ C $\psi_2 = \exp(x)$ D $\psi_1 = \cos x$
- (5) القيم الخاصة لطاقة جسيم كتلته (m) ويتحرك بصندوق وحيد البعد طولها (a) وطاقته الكامنة تساوي الصفر هي:
- A $E_n = nh/8ma$ B $E_n = n^2h^2/8ma^2$ C $E_n = 1/2(n+h)$ D $E_n = (T+V)/2$
- (6) يشير تابع التوزيع القطري $\psi_{1s}^2 4\pi r^2$ من أجل الحالة $1s$ في ذرة الهيدروجين إلى أن:
- A $r_{mp} = 0$ B $r_{mp} = r$ C $r_{mp} > r$ D $r_{mp} < r$
- (7) إن توالد سوية الطاقة ذات العدد الكوموي $(j=5)$ لجسيم متحرك على سطح كروي يساوي:
- A 14 B 11 C 15 D 42
- (8) إن الطاقة الإلكترونية للشاردة Li^{2+} في الحالة $2S$ هي:
- A $-8/9 \text{ a.u.}$ B $-9/18 \text{ a.u.}$ C -2 a.u. D $-9/8 \text{ a.u.}$
- (9) البعد المتوسط للإلكترون عن النواة في الحالة الأساسية لذرة الهيدروجين هو:
- A $r = 1.5 \text{ a.u.}$ B $r = 3 \text{ a.u.}$ C $r = 2/3 \text{ a.u.}$ D $r = a.u.$
- (10) الطاقة الكامنة في ذرة الهيدروجين عندما يتبعد الإلكترون عن النواة بمقدار (0.5 a.u.) هو:
- A $-1/4 \text{ a.u.}$ B $-1/2 \text{ a.u.}$ C -2 a.u. D -1 a.u.
- (11) طاقة الوضع الصفري للهزاز التوافقي هي:
- A $5 h\nu$ B $3/2 h\nu$ C $1/2 h\nu$ D $h\nu$
- (12) ماقيمة التوالد السبيني للحديد في الوضع الأساسي إذا كان التركيب الإلكتروني هو $1S^2/2S^2/2P^6/3S^2/3P^6/4S^2/3d^6$:
- A ثلاثي التوالد B خماسي التوالد C رباعي التوالد D أحادي التوالد
- (13) إذا كان المقدارين a و b مترافقين فيزيائياً، فإنه حسب مبدأ الارتباب لهايزنبرغ فإن:
- A $\Delta a \cdot \Delta b \geq h$ B $\Delta a \cdot \Delta b \geq 2h$ C $\Delta a \cdot \Delta b \geq h/4\pi$ D $\Delta a \cdot \Delta b \geq h/2\pi$
- (14) يحقق التابع الموجي ψ شرط التابع القابل للتكامل برربعياً إذا:
- A إذا كان مستمراً B إذا كان وحيد القيمة C تكامل ψ^2 على جميع الفراغ لايساوي الصفر ولا مالانهاية D جميع الإجابات السابقة خاطئة
- (15) إذا كان تواتر الضوء لازم ليثار الجسيم الحر في صندوق وحيد البعد طولها L من الحالة $n=1$ إلى الحالة $n=2$ هو u فإن التواتر لازم للآثارة إذا كان طول الصندوق مضاعفاً:
- A $u/4$ B $u/2$ C $2u$ D $4u$



(25) درجة للمسألة الأولى (25) درجة للمسألة الثانية (10) درجة للمسألة الثالثة (10) درجة للمسألة الرابعة

السؤال الثاني : حل

المسائل الآتية

حل المسائل الأربعة الآتية.

• المسألة الأولى:

ليكن لدينا جسيم كتلته m يتحرك في صندوق أحادي البعد طوله L . والمد الموب:

- 1- ماهي عبارة الدفاعة لهذه الجملة. 6
- 2- بفرض أن هذا الجسيم هو الكترون وطول الصندوق هو 258pm ، ماهي طاقة نقطة الصفر (Z. P. E)، وماهي الطاقة من أجل مول لهذه الجملة. 7
- 3- ما طول موجة دبرولي للالكترون الموافقة. 6
- 4- ما السرعة الالكترونية الموافقة تقليديا لهذه الطاقة (Z. P. E)، ما هي سرعة الضوء. 6

• المسألة الثانية:

أحب عن الأسئلة الآتية مستخدما الواحدات الذرية.

- 1- ما طاقة ذرة الهيدروجين في الوضع 3S. 5
- 2- ما طاقة He^+ عندما $n=2$. 5
- 3- ما درجة تعدد سوية الطاقة $n=4$ للهيدروجين. 5
- 4- ما عدد العقد الزاوية الذي يمتلكه المدار $4d_{xz}$ وما عدد العقد القطرية. 5
- 5- ما لطاقة الكامنة في ذرة الهيدروجين عندما يبتعد الالكترون عن النواة بمقدار $(2a.u)$. 5

• المسألة الثالثة:

من أجل ذرة الهيدروجين ذات $n=3$ ، $l=2$ ما قيم l الممكنة، وما عدد إز'حالات الممكنة بين أطوال المتجهات l في الواحدة $a.u$ وما رموز الحدود الموافقة.

• المسألة الرابعة:

ينطلق هزاز توافقي ذو كتلة 1.00g ، وثابت قوة مساوية 2.0 من السكون عند $t=0$ و $x=0.1\text{m}$. والطلوب:

- 1- ما التابع الموجي الذي يصف سلوك الهزاز.
- 2- ما الطاقة الكلية للهزاز.
- 3- ما الطاقة الكامنة الوسطية.
- 4- ما الطاقة الحركية الوسطية.

الثوابت

$$h = 6.626 \cdot 10^{-34} \text{ J.s} , m_e = 9.11 \cdot 10^{-31} \text{ K.g}$$

...انتهت الأسئلة...

مع تمنياتي لكم بالنجاح والتوفيق

الأحد: ٢٠٢٤/٣/٣٥

مدرس المقرر

د. سليمان يوسف محمد

سليم نصحي لمقر الكيمياء الكمية سر / كيمياء

السؤال الأول: لكل اختيار صحيح درجتان .

1 ← D ($\lambda = 2L/n$)

2 ← C ($\sqrt{1/2} \hbar$)

3 ← D ($\psi = \exp(-x^2)$)

4 ← C ($\psi_2 = \exp(x)$)

5 ← B ($E_n = n^2 \hbar^2 / 8ma^2$)

6 ← D ($v_{mp} < \bar{v}$)

7 ← C (15)

8 ← D ($-\frac{9}{8} a.u$)

9 ← A ($r = 1.5 a.u$)

10 ← C ($-2 a.u$)

11 ← C ($\frac{1}{2} h \nu$)

12 ← B (رخاسي التوالد)

13 ← C ($\Delta a \Delta b \geq \frac{\hbar}{4\pi}$)

14 ← C (تكامل ψ^2 على جميع الفراغ لا يساوي الصفر ولا مالا لانه)

15 ← A ($\nu/4$)

السؤال الثاني : 1- $E_n = \frac{n^2 \hbar^2}{8mL^2}$ حيث n عدد صحيح و L طول الصندوق

$$E_{2,p,e} = \frac{(11)^2 (6.626 \cdot 10^{-34} \text{ J.s})^2}{8(9.11 \times 10^{-31} \text{ Kg})(258 \cdot 10^{-12} \text{ m})^2}$$

$$= 9.05 \times 10^{-19} \text{ J} \quad (5)$$

2- طاقة الوضع الصفري ($E_{2,p,e}$)

أما من أجل طول هذه الجمل فيكون E شاي (2)

$$E = (9.05 \times 10^{-19}) (6.022 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}) (1 \text{ Kg} / 10^3) = 54.6 \text{ KJ mol}^{-1}$$

3- طول موجة ديروجي شاي $\lambda = \frac{h}{p}$ ونسب فيه p من العلاقة

$$E = \frac{p^2}{2m} \Rightarrow p = \sqrt{E \cdot 2m} = \sqrt{164 \times 10^{-25}} \Rightarrow \lambda = \frac{6.62 \cdot 10^{-34}}{\sqrt{164 \times 10^{-25}}} = 0.5169 \cdot 10^{-9} \text{ m}$$

1- يتبع بالصيغة الشا

ملحظة A to Z

تابع للسؤال الأولي .

4- تمثل E الطاقة الحركية لأن $v=0$ في داخل الصندوق لذلك فإن

$$E = \frac{mv^2}{2} \Rightarrow v = \left[\frac{2E}{m} \right]^{\frac{1}{2}} = \left[\frac{2(9.05 \times 10^{-19} \text{ J})}{9.11 \times 10^{-31} \text{ Kg}} \right]^{\frac{1}{2}} = 1.41 \times 10^6 \text{ m.s}^{-1}$$

نؤدق مقارنة هذه السرعة مع سرعة الضوء إلى النتيجة

$$\frac{1.41 \times 10^6 \text{ m.s}^{-1}}{2.998 \times 10^8 \text{ m.s}^{-1}} = 0.0047$$

أي نحو 0.5% من سرعة الضوء .

السؤال الثاني

2- 1- طاقة ذرة الهيدروجين في الوضع 3S هو

$$E_{3S} = -\frac{1}{9} = -\frac{1}{18} \text{ a.u.}$$

$$2- \text{ طاقة } H^+ \text{ عند } n=2 \text{ هو } E_{H^+} = -\frac{1}{2} \left(\frac{4}{4} \right) = -\frac{1}{2} \text{ a.u.}$$

3- درجة التعدد للوضع $n=4$ هو $n^2 = 16$

4- عدد العقد الزاوية الذي يميزه المدار $4dxy$ هو قيمة l للمدار وهو 2

إذا عدد العقد الزاوية [2] وبما أن عدد العقد الكلية هو $n-1 = 4-1 = 3$

إذا عدد العقد الخطية هو $n-1-l = 4-1-2 = 1$

5- الطاقة الكامنة هي $E = -\frac{1}{n}$ وهي شاذية $E = -\frac{1}{2} \text{ a.u.}$

السؤال الثالث

إذا كان $n=3$ و $l=2$: إذا وصف الحالات (d) وهي من مدارات d وبجانبها

والعدد الكلي هو 10. ما هي هذه الحالات

إن القيم العظمى الممكنة للمركبة l للعرض الزاوي من أجل المدار البيني

شاذي 1/2 و 1/2 إلى الترتيب، وبالتالي القيمة العظمى شاذي (5/2)

ونعطي طول متجهة قدرها $\sqrt{35/4} \text{ a.u.}$ وست صاف $l=2$ ، لا $2l+1=6$

بناء على ذلك شاذي 6 حالات ومرتبط هو $5/2$

والقيم المتبقية 3 وطول متجهة شاذي $\sqrt{15/4} \text{ a.u.}$

وأربع حالات ممكنة ومرتبط هو $3/2$

المسألة الرابعة :

1 - $X(t) = 100 \cos(\sqrt{2} t)$

2 - الطاقة الكلية $E = \frac{1}{2} K L^2$

وهنا $x = L$ وبالتالي $E = \frac{1}{2} K X^2$

نجد $E = \frac{1}{2} 2 \times (0.1)^2 = 10^{-3} \text{ ج}$

3 - الطاقة الكامنة الوسطية = الطاقة الحركية الوسطية = $\frac{E}{2}$

نجد $\bar{E} = \bar{E}(\text{الحركية}) = \frac{E}{2} = \frac{1}{2} = 5 \cdot 10^{-3} \text{ ج}$

مكتبة
A to Z

الطالب: الرقم الجامعي: المدة: ساعتان العلامة: 100 درجة	الامتحان النظري الكيمياء الكمومية طلاب السنة الثانية الفصل الدراسي الثاني 2022-2023	 جامعة طرابلس كلية العلوم قسم الكيمياء
--	---	---

السؤال الأول:

أجب عن السؤالين التاليين: 15 درجة لكل سؤال

- 1- ماهي علاقة العدد الموجي $\bar{\nu}$ بالطاقة E . احسب العدد الموجي لفوتون طاقته $E = 1 \text{ J}$.
علما أن ثابت بلانك $h = 6.626 \cdot 10^{-34} \text{ J.s}$ وسرعة الضوء $C = 2.998 \cdot 10^{10} \text{ cm/s}$.
- 2- ليكن لدينا جسيم كتلته m في صندوق أحادي البعد طوله L .
والمطلوب :

1. ما طاقة نقطة الصفر ($E.P.z$) لهذه الجملة .
2. بفرض أن الجسيم هو الكترون كتلته $m = 9.11 \cdot 10^{-31} \text{ Kg}$ وطول الصندوق $L = 258 \text{ pm}$. ماهي قيمة طاقة نقطة الصفر للإلكترون.
3. ما لسرعة الإلكترونية الموافقة تقليديا لهذه الطاقة، قارنها مع سرعة الضوء.

السؤال الثاني : أجب عن الأسئلة التالية : (20 + 25 + 25) درجة

- 1- إذا كانت طاقة الهزاز التوافقي الكمومي تعطى بالعلاقة $E_n = (n + 1/2) h \nu$ حيث $n = 0, 1, 2, \dots$.
بين أن سويات الطاقة لهذه الجملة غير متوالة . ماهي طاقة الوضع الصفري .
- 2- أحب عن الأسئلة التالية (مستخدما الواحدات الذرية)
a- ماهي طاقة ذرة الهيدروجين في الوضع $2S$.
b- ما طاقة Li^{+2} في الوضع $n=1$ و $n=2$.
c- ما درجة تعدد سوية الطاقة $n=3$ للهيدروجين .
d- ما عدد العقد السطحية الذي يمتلكه المدار $4d$ ، وما عدد العقد القطرية .
e- ما الطاقة الكامنة في ذرة الهيدروجين عندما يبتعد الإلكترون عن النواة بمقدار $2.a.u$.
- 3- ما الطاقة الالكترونية بحسب تقريب الالكترونات المستقلة لذرة الليثيوم $Z=3$ في الحالة الأساسية، وما القيمة التجريبية للطاقة الالكترونية إذا كانت طاقة كل من التشرذ الأول والثاني هي $0.198a.u$ و $2.778a.u$ على الترتيب، أيهما أكبر وضح السبب.

طرابلس في 25 / 7 / 2023

مدرس المقرر:

د. سليمان يوسف محمد

س

سلام نصيحه وفكر الكيمياء الكمومية لطلاب السنة الثانية كيمياء
الدورة الفصلية الثانية للعام الدراسي 2022/2023

جواب السؤال الأول: 15 + 15

1- علاقة العدد الموجب بالطاقة ① $E = h \cdot \nu = h \cdot c / \lambda = h \cdot c \cdot \bar{\nu}$

5 درجات

نحسب $\bar{\nu}$ من العلاقة ① $\bar{\nu} = \frac{E}{h \cdot c}$ ②

5 درجات

نحوض في العلاقة ② فنحصل على:

$$\bar{\nu} = \frac{1}{(6.626 \times 10^{-34} \text{ J.s}) \times (2.998 \times 10^{10} \text{ cm/s})}$$

5 درجات

$$= 5.034 \times 10^{22} \text{ cm}^{-1}$$

من الواضح أن هذا الضوء يقع بطول موجة قصير جداً

2- 1- يعبر عن طاقة نقطة الصفر (Z.P.E) بالعلاقة $E_{n=1} = \frac{11^2 h^2}{8mL^2}$ 5 درجات

2- من أجل الإلكترون نجد أن $E_{n=1}$ (طاقة نقطة الصفر حسب كاليب

5 درجات

$$E = \frac{11^2 (6.626 \times 10^{-34} \text{ J.s})^2}{8(9.11 \times 10^{-31} \text{ kg})(258 \times 10^{-12} \text{ m})^2} = 9.05 \times 10^{-19} \text{ J}$$

5 درجات

3- تمثل E الطاقة الحركية لأن $v=0$ في الصندوق. لذلك $E = \frac{m \cdot v^2}{2}$

عندئذ $v = \left[\frac{2E}{m} \right]^{\frac{1}{2}} = \left[\frac{2(9.05 \times 10^{-19} \text{ J})}{9.11 \times 10^{-31} \text{ kg}} \right]^{\frac{1}{2}}$

5 درجات

$$= 1.41 \times 10^6 \text{ m.s}^{-1}$$

نؤدي مقارنة هذه السرعة مع سرعة الضوء إلى النتيجة:

$$\frac{1.41 \times 10^6 \text{ m.s}^{-1}}{2.998 \times 10^8 \text{ m.s}^{-1}} = 0.0047$$

أي هو 0.5% من سرعة الضوء

ينبع

1- طاقة الوضع الكهروستاتيكية $E_1 = \frac{1}{2} h \nu$ 15 درجاً

ومن الصلة العامة $E_n = (n + \frac{1}{2}) h \nu$ واضح أن E تتبع n ونقصية
فيمتد وحيدة E من أجل أية قيمة n وهذا يعني أن قيمة الطاقة E_n
غير متوالية.

15 درجاً

2- $E_{2s} = -\frac{Z^2}{2n^2} = -\frac{1}{2(2)^2} \cdot a.u = -\frac{1}{8} a.u$ 25 درجاً

همن درجاً

b- $E_{Li^{2+}} : E_1 = -(\frac{3}{2})^2 = \frac{9}{2} a.u$ همن درجاً

$E_{Li^{2+}} : E_2 = -\frac{9}{8} a.u$ همن درجاً

c. $n^2 = 9$ همن درجاً

d. عدد طوري = 1، عدد قطبي = 2

e. $E = (-\frac{1}{n}) a.u = -\frac{1}{2} a.u$ همن درجاً

3- $E = 2 \epsilon_{1s} + \epsilon_{2s} = -\frac{1}{2} (\frac{Z^2}{n_1^2} + \frac{Z^2}{n_2^2})$ 25 درجاً

همن درجاً $= -\frac{Z^2}{2} (\frac{2}{n_1^2} + \frac{1}{n_2^2}) = -10.125 \cdot a.u$

إن القيمة التجريبية يجب أن تساوي القيمة الثالثة لمجموع طاقات المركز
الذرات. ولكن فنناجى إلى القيمة الثالثة لطاقة المركز التجريبية.

على السؤال الأخير

همن درجاً $I E_3 = -E_{Li^{2+}} = -[-\frac{1}{2} (\frac{Z^2}{n_2^2})] = \frac{1}{2} (\frac{3^2}{1}) = 4.5 \cdot a.u$

وهذا ما -

همن درجاً $E = -(I E_1 + I E_2 + I E_3) = -7.47 \cdot a.u$

واضح أن القيمة التجريبية يجب أن تكون القيمة التجريبية وذلك
بسبب إهمال حدود التدافع، التي تمثل في حد ذاتها خطأ حوسبي

همن درجاً

جامعة طرطوس كلية العلوم قسم الكيمياء	امتحان مقرر الكيمياء الكمومية طلاب السنة الثانية - الفصل الدراسي الأول 2023-2022	الطالب: الرقم الجامعي: المدة: ساعتان العلامة: 70 درجة
---	---	--



درجة (30)

السؤال الأول:

اختر الإجابة الصحيحة مما يلي وسجلها في دفتر الإجابة (سجل رقم الإجابة فقط):

(1)	شرط تكون أمواج مستقرة في جبل مشدود بين نقطتين طولها L هو: حيث n عدد طبيعي.	A $\lambda = L/n$	B $\lambda = L/2n$	C $\lambda = L$	D $\lambda = 2L/n$
(2)	علاقة ديبرولي لطول موجة الالكترون هي:	A $\lambda = 1/2hc$	B $\lambda = 2hc$	C $\lambda = h/p^2$	D $\lambda = h/p$
(3)	أحد هذه التوابع هو تابع موجي مقبول فيزيائيا هو:	A $\Psi_4 = x$	B $\Psi_3 = x^2$	C $\Psi_2 = \exp(-x)$	D $\Psi_1 = \exp(-x^2)$
(4)	أحد هذه التوابع هو تابع خاص للمؤثر d/dx :	A $\Psi_4 = \sin x$	B $\Psi_3 = 5x^2$	C $\Psi_2 = \exp(x)$	D $\Psi_1 = \ln 1/x$
(5)	القيم الخاصة لطاقة جسيم كتلته (m) ويتحرك بصندوق وحيد البعد طولها (a) وطاقته الكامنة تساوي الصفر هي:	A $E_n = nh/8ma$	B $E_n = n^2h^2/8ma^2$	C $E_n = 1/2(n+h)$	D $E_n = T+V/2$
(6)	طاقة جسيم كتلته m يتحرك على محيط دائرة الكمون عليها يساوي الصفر هي:	A $E_4 = k^2h^2/2l$	B $E_3 = k^2h^2/2m$	C $E_2 = k^2h^2/2r$	D $E_1 = k^2h^2/2r^2$
(7)	إن توالد سوية الطاقة ذات العدد الكمومي $(j=6)$ لجسيم متحرك على سطح كروي يساوي:	A 12	B 13	C 15	D 42
(8)	إن الطاقة الالكترونية للشاردة Li^{2+} في الحالة $2S$ تمثل:	A الطاقة نفسها للهيدروجين في الحالة $1S$	B ثمانية أضعاف طاقة الهيدروجين في الحالة $1S$	C ربع طاقة الهيدروجين في الحالة $1S$	D 9/4 من طاقة الهيدروجين في الحالة $1S$
(9)	البعد المتوسط للإلكترون عن النواة في الحالة الأساسية لذرة الهيدروجين هو:	A $r = 1.5 a.u$	B $r = 3 a.u$	C $r = 2/3 a.u$	D $r = a.u$
(10)	الطاقة الكامنة في ذرة الهيدروجين عندما يبتعد الالكترون عن النواة بمقدار $(0.5 a.u)$ هو:	A $-1/4 a.u$	B $-1/2 a.u$	C $-2 a.u$	D $-1 a.u$

(20) درجة للمسألة الأولى (20) درجة للمسألة الثانية (15) درجة للمسألة الثالثة (15) درجة للمسألة الرابعة

السؤال الثاني:

حل المسائل الأربعة الآتية

• المسألة الأولى:

احسب الطاقة التقريبية لذرة الليثيوم حيث التركيب الالكتروني هو $(1s^2 2s^1)$ اعتمادا على نظرية الالكترونات المستقلة، واحسب القيمة التجريبية للطاقة إذا كانت طاقة التشرد الأولى والثانية على الترتيب هي:

$2.778 a.u$, $0.198 a.u$

هل تفاجئك النتيجة، علل ذلك.

• المسألة الثانية:

حدد ما هو التركيب الالكتروني المفضل لذرة البوتاسيوم (K^{19}) في الوضع الأساسي اعتمادا على الشحنة النووية الفعالة وقواعد الحجب، استعن بالنموذجين:

• $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^1$

• $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^1$



• المسألة الثالثة:

أجب عما يلي:

- ما الطاقة الكامنة المتوسطة والطاقة الحركية المتوسطة من أجل الهزاز التوافقي عند $(n=4)$.
- ما هو تواتر الضوء اللازم لإثارة جسيم كتلته m يتحرك في صندوق أحادي البعد طوله $2L$ من $(n_1=1)$ الى $(n_2=2)$ إذا كان تواتر الضوء اللازم لإثارة الجسيم نفسه في صندوق طوله L هو ν

• المسألة الرابعة:

عند استخدام ضوء بتواتر قدره $(\nu = 1.13 \times 10^{15} s^{-1})$ يتحرر الكترونات من البوتاسيوم بطاقة حركية تساوي (2.38 e.v.s) ، احسب W للبوتاسيوم مستخدماً ثابت بلانك $(h = 4.136 \times 10^{-15} \text{ e.v.s})$

— انتهت الأسئلة —

مع تمنياتي لكم بالنجاح والتوفيق

الأحد: 2023/2/19

مدرس المقرر

د. سليمان يوسف محمد

30 درجة لكل إجابة صحيحة ثلاث درجات

$$E = \frac{K^2 h^2}{2I} \quad -6 \quad \text{حيث } K: \text{ عدد صحيح}$$

$$\lambda = \frac{2L}{n} \quad -1$$

$$\lambda = \frac{h}{p} \quad -2$$

$$\frac{9}{4} \text{ من طاقة } H \text{ في الحالة } 1S \quad -8$$

$$\psi_4 = \exp(-x^2) \quad -3$$

$$\psi_3 = \exp(x) \quad -4$$

$$E_n = \frac{n^2 h^2}{8ma^2} \quad -5$$

$$1.5 a.u \quad -9$$

$$-2 a.u \quad -10$$

$$30^\circ \quad \text{المجموع}$$

المألة الثانية: النشاط:

اعتماداً على التئمة النووية الفعالة

$$Z - \sigma$$

حدد طاقة التوزيع الإلكتروني ① و ② وتكون الطاقة الأقل هي الوضع المفصل.

نسب طاقة الوضع $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^4$ بنظر في قواعد سلاير تحديد

$$E_{1s} \quad 1s: Z - \sigma = 19 - (0.3 \times 1) = 18.7$$

$$E_{2s2p} \quad 2s2p: Z - \sigma = 19 - (0.35 \times 7 + 0.85 \times 2) = 14.85$$

$$E_{3s3p} \quad 3s3p: Z - \sigma = 19 - (0.35 \times 7 + 0.85 \times 8 + 1 \times 2) = 7.75$$

$$E_{4s} \quad 4s: Z - \sigma = 19 - (0.85 \times 8 + 1 \times 10) = 2.2$$

يؤدي تجميع هذه القيم في عبارة الطاقة إلى النتيجة.

$$E_n = -\frac{1}{2} \left(\frac{2(18.7)^2}{(1)^2} + \frac{8(14.85)^2}{(2)^2} + \frac{8(7.75)^2}{(3)^2} + \frac{(2.2)^2}{4^2} \right) a.u$$

$$= -597.058 a.u.$$

تابع سلم تصفيع الكيمياء الكمية ستة ثانية

الحالة $1s^2 2s^2 2p^3 3s^2 3p^3$

نفس طريقة الحساب السابقة نجد قيم موجبة باستثناء $3d$

$$E_{3d} = 2 - 6 = 19 - (1 \times 18) = 1$$

ومن القيم السابقة نحصل على طاعة الوضع.

$$E_n = -\frac{1}{2} \left(\frac{2(18.7)^2}{1^2} + \frac{8(14.85)^2}{2^2} + \frac{8(7.75)^2}{3^2} + \frac{(1)^2}{3^2} \right) \text{ a.u.}$$

$$= -596.938 \text{ a.u.}$$

وذلك طاعة الوضع الأول دقل ولذلك هو الوضع المفضل للذرة.

أي أن التركيب هو $1s^2 2s^2 2p^3 3s^2 3p^3 4s^1$

● سؤال الأول: الحل: بما أن التركيب الإلكتروني للذرة اللينوم هو $1s^2 2s^1$

نحسب القيمة التقريبية اعتماداً على التعريب المنقل.

$$E_{approx} = 2E_{1s} + E_{2s} = -\frac{1}{2} \left(\frac{2Z^2}{n_1^2} + \frac{Z^2}{n_2^2} \right) = -\frac{Z^2}{2} \left(\frac{2}{n_1^2} + \frac{1}{n_2^2} \right)$$

$$= -\frac{3^2}{2} \left(\frac{2}{1} + \frac{1}{2^2} \right) = -10.125 \text{ a.u.}$$

✓ أما القيمة التجريبية نحسبها بالحساب طاعة I_3 .

(10)

$$E_{I_3} = -E_{L_i}^{+2} = - \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{Z^2}{n_i^2} \right) \right] = \frac{1}{2} \left(\frac{3}{1} \right)^2 = 4.5 \text{ a.u.}$$

وهكذا فإن

$$E_{exp} = -[2E_1 + E_2 + I_3] = -(0.198 + 2.728 + 4.5)$$

(5)

$$= -7.476 \text{ a.u.}$$

والنتيجة عيرفاضة لأن طاعة القيمة التقريبية دقل من القيمة التجريبية

والسبب إهمال الصلابة بين الإلكترونات وهي طاقة موجبة.

(5)

النتيجة :
 عبارة طاقة الزاوية المتوافقة الكلية هي

$$E_n = (n + \frac{1}{2}) h \nu$$

$$= (4 + \frac{1}{2}) h \cdot \nu = \frac{9}{2} h \cdot \nu$$

(10)

وتكون الطاقة الكلية هي $\frac{9}{2} h \nu$ ، وبما أن الطاقة الكامنة والحرارية هي المتوسط
 متساوية أي أن

$$\bar{V} = \bar{T} = \frac{1}{2} E$$

! إذاً كل منهما تساوي $\frac{9}{4} h \cdot \nu$

! أن عبارة الطاقة تصبح داخل صندوق وحيد البعد هي

$$E_n = \frac{n^2 h^2}{8mL^2} \Rightarrow E_2 - E_1 = \frac{3h^2}{8mL^2} = \Delta E$$

وهي قيمة الضوء $h \cdot \nu$ الناتج لنقل الإلكترون في الحالة $n_1 = 1$ إلى الحالة $n_2 = 2$

$$\nu_1 = \Delta E / h = \frac{3h}{8mL^2}$$

إذاً

أما عندما يكون عرض الصندوق $2L$ نصلح

$$\Delta E = \frac{3h^2}{8m(2L)^2} \Rightarrow \nu_2 = \frac{\Delta E}{h} = \frac{3h}{32mL^2}$$

(11)

وصية ثانياً : $\nu_2 = \frac{\nu_1}{4}$ وهو المطلوب

$$E = \frac{1}{2} h \nu = W + E_T$$

المسألة الرابعة : الحل : لدينا العلاقة

$$\Rightarrow \cancel{\frac{1}{2} h \nu} = h \nu - E_T \quad (5)$$

حيث تمثل E_T الطاقة الحركية للإلكترونات العائدة للبيوتاسيوم ولحساب W
 نحتاج واحدة ملائمة لثابت بلانك فتجد :!

(10)

$$W = (4.136 \times 10^{-15}) \times (1.13 \times 10^{15} \cdot s^{-1}) = 2.38 \cdot eV$$

$$= 2.29 \cdot eV$$

السؤال الأول : اختر الإجابة الصحيحة فيما يلي (مستخدماً الوحدات الذرية) : 30 درجة

ملاحظة : اكتب الأرقام من 1 إلى 10 على دفتر الإجابة بشكل عمودي وضع مقابل الرقم الإجابة الصحيحة دون شرح .

- 1- تعدد سوية الطاقة $n=3$ للهيدروجين هو . 5 , 16 , 9 , 8
- 2- طاقة Li^{2+} في الطبقة $n=1$ هي . $-1/2a.u$, $-2a.u$, $-9/2a.u$, $-4a.u$
- 3- عدد العقد السطحية الذي يمتلكه المدار $4d$ هو . 7 , 6 , 2 , 3
- 4- الطاقة الكامنة في ذرة الهيدروجين عندما يبتعد الإلكترون عن النواة بمقدار $0.5a.u$ هو .
 $-1/4a.u$, $-2a.u$, $-3a.u$, $-1/2a.u$
- 5- طاقة الفلك $1s$ في ذرة الهيدروجين هي . $-1/4a.u$, $-2a.u$, $-1a.u$, $-1/2a.u$
- 6- عدد العقد القطرية في الفلك $4d$ هو . 4 , 5 , 2 , 1
- 7- الطاقة الصفريّة للهزاز التوافقي الكوموي هي : $2h$, $3/2h$, $1h$, $1/2h$
- 8- الطاقة الكامنة المتوسطة للهزاز التوافقي هي : $V=2T$, $V=1/2T$, $V=1/4T$, $V=T$
- 9- طاقة السوية الخامسة للهزاز التوافقي هي : $5/2h$, $3/2h$, $9h$, $11/2h$
- 10- طاقة He^+ في المستوى $n=1$: $-1/2a.u$, $-2a.u$, $-4a.u$, $-a.u$

السؤال الثاني : أجب عن السؤالين التاليين : (30 + 20 + 20)

أولاً : ليكن لدينا جسيم حر كتلته m يتحرك في صندوق احادي البعد طوله L . ولتكن الطاقة الكامنة $V=0$ داخل الصندوق و $V=\infty$ خارجه . والمطلوب :

- 1- ماهي عبارة سويات الطاقة المسموح بها لهذه الجملة ؟
- 2- ما هي قيمة طاقة نقطة الصفر $Z.P.E$ لهذه الجملة ؟
- 3- ماهي قيمة الطاقة عندما $n=1$, هل هذا السوية متوالدة ؟
- 4- بفرض تحول الصندوق الى مربع طول ضلعه a . ماهي عبارة الطاقة للجسيم في الحالة الجديدة .
- 5- احسب قيمة الطاقة في الحالة n_x , n_y احداها تساوي 1 والثانية تساوي 2 . هل قيمة الطاقة متوالدة . وكم توأدها .

ثانياً : أجب عن الأسئلة الآتية .

- 1- اكتب التابع الموجي الذي يحقق مبدأ الاستبعاد لباولي لذرة البيريليوم ($Z=4$) , ثم احسب طاقة الذرة وفقاً للشحنة النووية الفعالة .
- 2- احسب طاقة هذه الذرة وفقاً لتقريب الإلكترونات المستقلة .

ثالثاً : أيا من المؤثرات الآتية ($-1/2\nabla^2 - 3/r$, $-1/2\nabla^2 - 1/r$, $-1/2\nabla^2$) يمثل فيها $3p_x$ تابعا خاصا لذرة $Z=1$. ماهي القيمة الخاصة للتابع بالوحدات الذرية .

مع تمنياتي للجميع بالتوفيق والنجاح

24/2/2022

مدرس المقرر : د . سليمان محمد



سبح مصلح طغرى الكيمياء الموصية لطلاب السنة الثانية
لدورة 2022 - الفصل الأول

- 1- السؤال الأول: 1- تعدد مستويات الطاقة $n=3$ للهيدروجين 9 - (2)
 - 2- طاقة الأيون L^{2+} في الطبقة $n=1$ هي $-\frac{9}{2} a.u$ - (2)
 - 3- عدد العقد الضمنية الذي يمتلكها المدار $4d$ هو 2 عقدة - (2)
 - 4- الطاقة الكامنة في ذرة الهيدروجين عند البعد $r=5a_0$ هي $-2 a.u$ - (2)
 - 5- طاقة الغلاف 1s في ذرة الهيدروجين هي $-\frac{1}{2} a.u$ - (2)
 - 6- عدد العقد القطرية في الغلاف $4d$ هو 4 عقدة - (2)
 - 7- الطاقة الصفرية Z.P.E للهيزالتوافقي $\frac{1}{2} h\nu$ - (2)
 - 8- الطاقة الكامنة المتوسطة للهيزالتوافقي $\bar{V} = \bar{T}$ - (2)
 - 9- طاقة الونية الخاصة للهيزالتوافقي هي $\frac{11}{2} h\nu$ - (2)
 - 10- طاقة He^+ في المستوى $n=1$ هو $-2 a.u$ - (2)
- السؤال الثاني: 20 + 20 + 30 درجة

- أولاً: 1- عبارة مستويات الطاقة $E_n = \frac{n^2 h^2}{8mL^2}$ - (5)
- 2- طاقة ذفلة الصفر Z.P.E تساوي $E_1 = \frac{h^2}{8mL^2}$ - (5)
 - 3- قيمة الطاقة لما $n=1$ هي نظراً E_1 وهي غير صالحة - (6)
 - 4- عندما يتحول الصندوق الى مربع طول ضلعه a تصبح الطاقة $E = \frac{h^2}{8ma^2} (n_x^2 + n_y^2)$ - (5)
 - 5- قيمة الطاقة عندما n_x و n_y احدهما 1 والثانية 2 هي $E = \frac{h^2}{8ma^2} (1+4) = \frac{5h^2}{8ma^2}$ - (5)
- وهذه القيمة للطاقة متوالة لأن نفس القيمة تقابل تابعتين موجبتين مختلفتين، وتعددها 2

ينج بالصيغة الثانية

ثانياً: ١- السطح الموجب الذي يحقق مبدأ الاستبعاد لباولي لذرة الهيدروجين ($Z=4$)

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{4!}} \begin{vmatrix} 1s(1) & \overline{1s}(1) & 2s(1) & \overline{2s}(1) \\ 1s(2) & \overline{1s}(2) & 2s(2) & \overline{2s}(2) \\ 1s(3) & \overline{1s}(3) & 2s(3) & \overline{2s}(3) \\ 1s(4) & \overline{1s}(4) & 2s(4) & \overline{2s}(4) \end{vmatrix}$$

حساب الطاقة وفقاً للنسبة الموجبة الفعالة

$$(2) \quad E = -\frac{1}{2} \left[2 \left(\frac{Z_1}{n_1} \right)^2 + 2 \left(\frac{Z_2}{n_2} \right)^2 \right] \quad \text{و } Z_1, Z_2 \text{ النسبة الفعالة للبروتون } 1 \text{ و } 2$$

وحسب

$$(3) \quad Z_{1s} = Z - (1 \times 0.30) = 4 - 0.3 = 3.7$$

$$(3) \quad Z_{2s} = Z - (1 \times 3.5) + 2(0.85) = 4 - 2.05 = 1.95$$

$$(4) \quad \begin{cases} E = -\frac{1}{2} \left[2 \left(\frac{3.7}{1} \right)^2 + 2 \left(\frac{1.95}{2} \right)^2 \right] \\ = -14.165 \text{ ا.ع.} \end{cases}$$

٢ - حساب الطاقة وفقاً لمبدأ فريب الإلكترونات المستقلة

$$(3) \quad E = -\frac{1}{2} \left[2 \left(\frac{4}{1} \right)^2 + 2 \left(\frac{4}{2} \right)^2 \right] = -20 \text{ ا.ع.}$$

ثالثاً: ١- المؤثر هو $-\frac{1}{2} \nabla^2 - \frac{1}{r}$

$$2 - \text{ بما أن } 3p_x \text{ يمثل تابعاً خاصاً للمؤثر إذاً } H 3p_x = E \cdot p_x$$

والقيمة الخاصة هي قيمة الطاقة على المدار الثالث والطريقة الثالثة

$$(10) \quad E = -\frac{1}{2} \left(\frac{1}{3} \right)^2 = -\frac{1}{18} \text{ ا.ع.} \quad \text{وهي حسب كما يلي}$$

السؤال الأول : أجب عن الأسئلة التالية . 50 درجة

- 1- ماهو شرط حدوث أمواج مستقرة في حبل مشدود طوله L ومثبت من طرفيه .
- 2- افترض دبرولي أن طول الموجة المرافق للجسيمات المجهرية (الأمواج المادية) هو $\lambda = h/p$.
بين كيف توصل دبرولي إلى اثبات هذه الفرضية .
- 3- حدد التابع الذي يحقق شروط التابع الموجي (المقبول فيزيائيا) من التوابع الآتية .
 $\psi_1 = X$, $\psi_2 = X^2$, $\psi_3 = \sin x$, $\psi_4 = \exp (x)$
وكذلك التابع الذي يمثل تابعا خاصا للمؤثر d/dx .

- 4 – ليكن لدينا جسيم حر كتلته m يتحرك في صندوق احادي البعد طوله L . والمطلوب
1- ماهو التابع الموجي الذي يحقق معادلة الحركة لهذا الجسيم .
2- ماهي عبارة الطاقة الخاصة للجسيم .
3- احسب قيمة الطاقة للمستويات الثلاث الأولى .
4- ارسم شكلا يمثل التابعين ψ_1 , ψ_2 اللذين يمثلان حركة الجسيم في الصندوق في المستوى 1 و 2 وبين الخواص التعامدية والتناظرية لهما .

السؤال الثاني : أجب عن السؤالين التاليين : (20 + 30)

أولا : أجب عن الأسئلة الآتية (استخدم الواحدات الذرية)

- 1- ماهي طاقة ذرة الهيدروجين في الوضع $1S$.
- 2- ماهي طاقة He^+ في الميسوي $n = 2$.
- 3- ماذ درجة التعدد لسوية الطاقة $n = 2$ للهيدروجين .
- 4- ماعدد العقد السطحية والقطرية الذي يمتلكها المدار $4d_{xz}$.

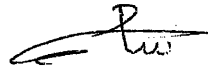
ثانياً : أجب عن الأسئلة الآتية .

- 1- اكتب التابع الموجي الذي يحقق مبدأ الاستبعاد لباولي في ذرة الهليوم $Z = 2$ ، ثم احسب طاقة الذرة وفقا للشحنة النووية الفعالة .
- 2- احسب طاقة هذه الذرة وفقا لتقريب الالكترونات المستقلة .
- 3- احسب طاقة الذرة وفقا لطريقة مبدأ التغير علما ان $E = \zeta^2 - 2Z\zeta + 5/8 \zeta$.

مع تمنياتي للجميع بالتوفيق والنجاح

29/7/2021

مدرس المقرر : د . سليمان محمد



جميع دهر الـ λ الموجة ستة ثانية كيمياء

السؤال الأول: 50 درجة (10 + 10 + 10 + 20)

1- حدث الأمواج المستقرة في حبل ممدود عند يرفق التابع الموجي الشروط الحدودية أعي ينصع التابع الموجي عند

(5) $\psi(L) = A \sin(2\pi L/\lambda) = 0$
 وهذا يحصل إذا كانت $A=0$ أو
 $2\pi L/\lambda = n\pi$ ومنه $2\pi L/\lambda = 0$

(5) ويكون الشرط لحدوث الأمواج المستقرة هو $n=0, 1, 2$ و $\lambda = \frac{2L}{n}$

2- حبل الموصل إلى علاقة برولي

1- نكتب علاقة أينشتاين من أجل الفوتونات بالشكل
 $E = h \cdot \nu$ --- (1)

وهي تنصع بنظام نصلي بدلالة الكتلة النسبية
 $E = mc^2$ --- (2)

ويؤدي صاوة العلاقتين إلى النتيجة
 $E = mc^2 = h \cdot \nu = h \cdot c/\lambda$ --- (3)

أو $mc = h/\lambda$ (5)

أما الجسيم العادي ذوات الكتلة الكونية غير الصفرية فينتقل بسرعة v
 وبالنسبة

$m \cdot v = p = h/\lambda$

ويكون طول موجي ديبرولي
 $\lambda = \frac{h}{p}$

3- 1- $\psi_1 = x$ لا يحقق التابع المقبول فيزيكياً لأنه لا ينشأ عند $x \rightarrow \pm \infty$
 2- $\psi_2 = x^2$

3- $\psi_3 = \sin x$ يحقق التابع الموجي المقبول فيزيكياً (5)

4- $\psi_4 = \exp x$ لا يحقق التابع الموجي المقبول فيزيكياً

2- $\psi_4 = \exp x$ هو تابع خاص للمؤثر d/dx لأن $d/dx \exp x = a \cdot \exp x$ (5)

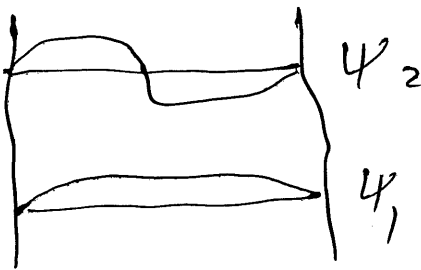
4- 1- التابع الموجي هو $\psi(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin(n\pi x/L)$ و $n=1, 2, \dots$

(5) 2- $E_n = \frac{n^2 h^2}{8mL^2}$ و $n=1, 2$

$E_1 = \frac{h^2}{8mL^2}$, $E_2 = \frac{4h^2}{8mL^2}$

3- الطاقة للوحدات الثلاثة الأولى
 $E_3 = \frac{9h^2}{8mL^2}$ (5)

$\psi_1, \psi_2 = 0$ لأن ψ_1, ψ_2 متناظر و ψ_3 متضاد للتناظر



(5)

منع بالصيغة الثانية

السؤال الثاني : صيغة (20 + 30) تابع سلم مجموع المجموع

(5)

$$E_{1s} = -\frac{1}{2} \left(\frac{Z}{n_1} \right)^2 = -\frac{1}{2} a.u. \quad -1$$

(5)

$$E_2 = -\frac{1}{2} \left(\frac{Z}{2} \right)^2 = -\frac{1}{2} a.u. \quad -2$$

(5)

3 - درجة العقد هي $n^2 = (2)^2 = 4$

4 - عدد العقد السطحية هو l للدائرة $4d \times 7$ وبماوي $l=2$

وعدد العقد القطرية يساوي $3-2=1$ (5)

ثانياً :

(5)

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{21}} \begin{vmatrix} 1s(1) & 1s(2) \\ 1s(1) & 1s(2) \end{vmatrix}$$

نحسب طاقة هذا الأيون Zn^+ وفقاً للخصائص التوافقية المقابلة

$$E = 2E_5 = -\frac{1}{2} \left[2 \left(\frac{Z_5}{n_1} \right)^2 \right]$$

ونحتاج تطبيق هذه العلاقة معرفة قيمة Z_5 في العلاقة العامة السابقة

$$Z_{1s} = Z - \sigma = Z - [(n-1) \times 0.35 + g_1 \times 0.85 + g_2 \times 1.0] \\ = 2 - 1 \times 0.35 = 1.7 \quad (5)$$

$$E = 2E_{1s} = -\frac{1}{2} \left[2 \left(\frac{Z_{1s}}{n_1} \right)^2 \right] = -\frac{1}{2} \left[2 \left(\frac{1.7}{1} \right)^2 \right] \\ = -2.890 a.u. \quad (5)$$

2 - يصعد مبدأ الكمونات المنقولة على إهمال الحد الذي يمثل قوى التفاعل. ونحسب الطاقة استناداً إلى هذا المبدأ لجميع طاقات المدارات الذرية

$$E_{app} = \sum g_i E_i = 2E_5 = -\frac{1}{2} \left[2 \left(\frac{Z}{n_1} \right)^2 \right] = 4 a.u. \quad (10)$$

فكأن قيمة هذه الطاقة أقل من القيمة الحقيقية بسبب إهمال حد التفاعل وهو قيمة موجبة

3 - طريقة مبدأ التغير يجب باضناً تابع يجب بدلالة عامل التغير ψ ثم نحسب الطاقة لقيمة ψ ذرية بأخذ القيمة المتوسطة التي تعطينا العلاقة

$$E = \int \psi^* H \psi d\tau$$

$$\text{فتحسب الطاقة بحسب المعادلة} \quad E = 2 - \frac{1}{16} = 2 - \frac{1}{16} = 1.6875$$

$$E = (1.68)^2 - 2 \times 2 \times 1.6855 = -2.847 a.u. \quad (5)$$

الدرجة : 100

اسم الطالب :

جامعة طرطوس

المدة : ساعتان

كلية العلوم – قسم الكيمياء

امتحان مقرر الكيمياء الكمومية لطلاب السنة الثانية كيمياء الدورة الأولى لعام 2021

السؤال الأول : أجب عن الأسئلة التالية (استخدم الوحدات الذرية) : 25 درجة

- 1- ما طاقة ذرة الهيدروجين في الوضع 2S؟
- 2- ما قيمة مركبة العزم المغناطيسي من أجل الإلكترون في الحالة 3d للهيدروجين ؟ علما ان مغناطيس بور $\beta_e = 9.274078 \times 10^{-24} \text{ J} \cdot \text{T}^{-1}$
- 3- ما درجة تعدد سوية الطاقة $n=4$ للهيدروجين ؟
- 4- ما عدد العقد السطحية الذي يمتلكه المدار 4d ؟ وما عدد العقد القطرية ؟
- 5- ما الطاقة الكامنة في ذرة الهيدروجين عندما يبتعد الإلكترون عن النواة بمقدار 2 . a.u .

السؤال الثاني : أجب عن السؤالين التاليين : (20 + 15 + 40) درجة

أولا : وجد أن الجسم الحر في صندوق وحيد البعد طوله L يمكن أن يثار من الحالة $n=1$ إلى $n=2$ بواسطة ضوء تواتره ν . فما هو التواتر الضروري لحدوث الانتقال من $n=1$ إلى $n=2$ عندما يكون طول الصندوق 2L .

ثانياً : يبدي H^{35}Cl امتصاصاً قوياً في الطيف تحت الأحمر عند 2992cm^{-1} ، الموافق لطاقة قدرها $5.941 \times 10^{-20} \text{ J}$. فإذا كانت طاقة هذا الضوء E تمتص ليثار HCl من السوية $n=0$ إلى السوية $n=1$. ما قيمة ثابت القوة K في HCl . علما أن عدد أفوكادرو $N_a = 6.022 \times 10^{23}$ ، $h = 6.626 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$.

ثالثاً : أجب عن الأسئلة التالية :

1- اكتب المؤثر الهاملتوني لذرة الهيدروجين ، وعبارة الطاقة الموافقة بالجملة الذرية ، ثم أجب عن الأسئلة الآتية .

أ – ما طاقة تأين كل من الأيونات الآتية : Li^{+2} ، Be^{+3} وذرة الهيدروجين H .

ب- ما الطاقة اللازمة لانتقال الإلكترون من السوية 1S إلى السوية 2S في ذرة الهيدروجين .

2- اكتب التابع الموجي المضاد للتناظر لذرة البيريليوم ($\text{Be}(Z=4)$ ، ثم احسب طاقة هذه الذرة وفقاً للشحنة النووية الفعالة .

مع تمنياتي للجميع بالتوفيق والنجاح

24 / 2 / 2021

مدرس المقرر : د . سليمان محمد



1- طاقة ذرة الهيدروجين في الوضع 2S هي :

$$E_{2S} = -\frac{1}{2} \left(\frac{Z}{n} \right)^2 a.u = -\frac{1}{2} \frac{1}{4} = -\frac{1}{8} a.u \quad (5)$$

2- قيمة كثافة العزم المغناطيسي من أجل الإلكترون في الحالة 3d للهيدروجين :

$$|M| = \mu_B \cdot \sqrt{l(l+1)} = \sqrt{6} \cdot \mu_B = 9.274078 \times 10^{-24} \times \sqrt{6} \quad (5)$$

$$= 2.27 \times 10^{-23} \text{ J} \cdot \text{T}^{-1}$$

(5)

3- درجة تعدد مستويات الطاقة $n=4$ هو $h^2=16$

4- عدد العقد السطحية هو 2 وعدد العقد القطرية هو 1

$$r = -\frac{a_0 n^2}{Z} \quad (5)$$

5- الطاقة الكامنة في ذرة الهيدروجين هي :

$$V = -\frac{1}{r} \cdot a.u$$

$$= -\frac{1}{1/a.u} \cdot a.u = -1 \cdot a.u \quad (5)$$

السؤال الثاني :

أولاً : نحسب قيمة الطاقة في المستوى n وفق القانون ①

$$E_n = \frac{n^2 h^2}{8mL^2} \dots \dots \dots (1)$$

من قانون الطاقة ① : نحسب فرق الطاقة ΔE

$$\Delta E = E_2 - E_1 = \frac{3h^2}{8mL^2} = h\nu \quad (2) \quad (5)$$

وهذا الفرق هو طاقة الضوء التي تنبع من الانتقال من الحالة $n=1$ إلى الحالة $n=2$!

$$\nu = \frac{\Delta E}{h} = \frac{3h}{8mL^2} \quad (5)$$

وعند حساب لا تطبق نفس العلاقات ① و ② . بعدئذ $L = 2L$

$$\nu = \frac{\Delta E}{h} = \frac{3h}{32mL^2} \dots \dots \dots (3) \quad (5)$$

$$\nu = \frac{\nu}{4}$$

ثانياً : من القانون $\nu = \frac{1}{2\pi} \cdot \sqrt{K/m}$ نحسب قيمة K فنجد

$$K = 4\pi^2 E^2 \cdot m / h^2 \quad (1) \quad (5)$$

$$m = \frac{m_H \cdot m_{Cl}}{m_H + m_{Cl}} \times \frac{1}{N_A} = \frac{1 \times 35}{1 + 35} \times \frac{1}{6.022 \times 10^{23}} = 1.614 \cdot 10^{-24} \text{ kg}$$

$$= 1.614 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$$

يتبع في الصفحة الثانية

تابع لحل نصيحي وفقر الجيباء الموصية

دعوى فية مر في العلاقة ① فتوصل على .

$$K = \frac{4\pi^2 E^2}{h^2} = \frac{4\pi^2 (5.941 \times 10^{20} \text{ J})^2 (1.614 \times 10^{27} \text{ Kg})}{(6.626 \times 10^{-34} \text{ J.s})^2} = 512 \cdot \text{m}^{-1}$$

تالشا : يعطى المؤثر الهاتسوفى لذرته الهيدروجين بالوحدة الذرية

$$H = -\frac{1}{2} \nabla^2 - \frac{1}{r} \quad E = -\frac{1}{2} \left(\frac{1}{n}\right)^2$$

و يعطى طاقتها بالعلاقة

$$I E = -E = \frac{1}{2} \left(\frac{Z}{n}\right)^2 = \frac{1}{2} \left(\frac{4}{1}\right)^2 = 8 \text{ a.u.}$$

طاقة تأييد L^{2+} هي E - طاقة السارد .

$$I E = -E = \frac{1}{2} \left(\frac{Z}{n}\right)^2 = \frac{1}{2} \left(\frac{3}{1}\right)^2 = 4.5 \text{ a.u.}$$

$$I E = -E = \frac{1}{2} \text{ a.u.}$$

$$\Delta E = E_2 - E_1 = -\frac{1}{2} \left(\frac{1}{2}\right)^2 - \left(-\frac{1}{2} \left(\frac{1}{1}\right)^2\right) = \frac{3}{8} \text{ a.u.}$$

2 - التابع الموجب المضاد للتناظر

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{4!}} \begin{vmatrix} 1s(1) & \bar{1}s(1) & 2s(1) & \bar{2}s(1) \\ 1s(2) & \bar{1}s(2) & 2s(2) & \bar{2}s(2) \\ 1s(3) & \bar{1}s(3) & 2s(3) & \bar{2}s(3) \\ 1s(4) & \bar{1}s(4) & 2s(4) & \bar{2}s(4) \end{vmatrix}$$

فحسب الطاقة وفق الشحنة النووية الفعالة من العلاقة .

$$E = -\frac{1}{2} \left[2 \left(\frac{Z_{1s}}{n_1}\right)^2 + \left(\frac{Z_{2s}}{n_2}\right)^2 \right]$$

حسب الشحنة النووية الفعالة من العلاقة الأسية

$$Z = Z - \sigma = Z - [(n-1) \times 0.35 + 9_1 \times 0.35 + 9_2 \times 1]$$

$$Z_{1s} = Z - (1 \times 0.35) = 4 - 0.35 = 3.7$$

$$Z_{2s} = Z - (1 \times 0.35 + 2 \times 0.85) = 4 - 0.205 = 1.95$$

$$E = -\frac{1}{2} \left[2 \left(\frac{Z_{1s}}{n_1}\right)^2 + 2 \left(\frac{Z_{2s}}{n_2}\right)^2 \right] = -14.165 \text{ a.u.}$$

د. هاشم محمد

الم

الدرجة : 100

اسم الطالب :

جامعة طرطوس

المدة : ساعتان

كلية العلوم - قسم الكيمياء

امتحان مقرر الكيمياء الكمومية لطلاب السنة الثانية كيمياء الفصل الثاني لعام 2020

السؤال الأول : اختر الإجابة الصحيحة فيما يلي (مستخدماً الواحدات الذرية) : 40 درجة

ملاحظة : اكتب الأرقام من 1 إلى 10 على دفتر الإجابة بشكل عمودي وضع مقابل الرقم الإجابة الصحيحة دون شرح .

- 1- تعدد سوية الطاقة $n=3$ للهيدروجين هو . 5 ، 16 ، 9 ، 8
- 2- طاقة Li^{2+} في الطبقة $n=1$ هي . $-1/2a.u$ ، $-2a.u$ ، $-9/2a.u$ ، $-4a.u$
- 3- عدد العقد السطحية الذي يمتلكه المدار $4d$ هو . 7 ، 6 ، 2 ، 3
- 4- الطاقة الكامنة في ذرة الهيدروجين عندما يبتعد الإلكترون عن النواة بمقدار $0.5a.u$ هو .
 $-1/4a.u$ ، $-2a.u$ ، $-3a.u$ ، $-1/2a.u$
- 5- طاقة الفلك $1s$ في ذرة الهيدروجين هي . $-1/4a.u$ ، $-2a.u$ ، $-1a.u$ ، $-1/2a.u$
- 6- عدد العقد القطرية في الفلك $4d$ هو . 4 ، 5 ، 2 ، 1
- 7- الطاقة الصفرية للهزاز التوافقي الكمومي هي : $1/2h\nu$ ، $1h\nu$ ، $3/2h\nu$ ، $2h\nu$
- 8- الطاقة الكامنة المتوسطة للهزاز التوافقي هي : $\bar{V} = 2\bar{T}$ ، $\bar{V} = 1/2\bar{T}$ ، $\bar{V} = 1/4\bar{T}$ ، $\bar{V} = \bar{T}$
- 9- طاقة السوية الخامسة للهزاز التوافقي هي : $11/2h\nu$ ، $9h\nu$ ، $3/2h\nu$ ، $5/2h\nu$
- 10- طاقة He^+ في المستوى $n=1$: $-1/2a.u$ ، $-2a.u$ ، $-4a.u$ ، $-a.u$

السؤال الثاني : أجب عن السؤالين التاليين : (30 + 30)

أولاً : ليكن لدينا جسيم حر كتلته m يتحرك في صندوق ثنائي البعد مستطيل الشكل $L_x=L_y$. ولتكن الطاقة الكامنة $V=0$ داخل الصندوق و $V=\infty$ خارجه . والمطلوب :

- 1- ماهي عبارة سويات الطاقة المسموح بها لهذه الجملة بدلالة L_x ؟
- 2- ما هي قيمة طاقة نقطة الصفر Z, P, E لهذه الجملة ؟
- 3- ماهي قيمة الطاقة عندما $n_x=2, n_y=1$ ، هل هذه السوية متوالدة ؟
- 4- بفرض أن المستطيل أصبح مربعاً طول ضلعه L . ماهي عبارة الطاقة للجسيم في الحالة الجديدة .
- 5- احسب قيمة الطاقة في الحالة $n_x = n_y = 2$.

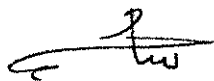
ثانياً : اكتب المؤثر الهاملتوني لذرة الهليوم ($Z=2$) He ، ثم أجب عن الأسئلة الآتية .

- 1- اكتب التابع الموجي الذي يحقق مبدأ الاستبعاد لباولي ، ثم احسب طاقة الذرة وفقاً للشحنة النووية الفعالة .
- 2- احسب طاقة هذه الذرة وفقاً لتقريب الإلكترونات المستقلة .
- 3- احسب طاقة الذرة وفقاً لطريقة مبدأ التغير علماً أن $E = \zeta^2 - 2Z\zeta + 5/8\zeta$.

مع تمنياتي للجميع بالتوفيق والنجاح

1/9/2020

مدرس المقرر : د . سليمان محمد



بسم الله الرحمن الرحيم
لطلاب السنة الثامنة الأولى الشافعي

السؤال الأول: لكل رقم من ١ - ١٥ أجب درجات. إذا كان الاختيار صحيحاً

- 1	9
- 2	$-\frac{9}{2} a.u$
- 3	2
- 4	$-2 a.u$
- 5	$-\frac{1}{2} a.u$
- 6	1
- 7	$\frac{1}{2} h.u$
- 8	$\bar{V} = \bar{T}$
- 9	$\frac{1}{2} h.u$
- 10	$-2 a.u$

40

السؤال الثاني: ثلاثون درجة من كل فرع ست درجات

١- عبارة طاقة المجموع هي ... ①

$$E = \frac{n_x^2 h^2}{8mL_x^2} + \frac{n_y^2 h^2}{8mL_y}$$

وبما أن $L_y = \frac{L_x}{2}$ نعوض في ① فنجد:

$$E = \frac{n_x^2 h^2}{8mL_x^2} + \frac{4n_y^2 h^2}{8mL_x^2} = \frac{h^2}{8mL_x^2} (n_x^2 + 4n_y^2) \dots ②$$

٢- قيمة طاقة نقطة الصفر

نعوض في العلاقة ② $n_x = n_y = 1$ ←

$$E_{1,1} = \frac{h^2}{8mL_x^2} (1 + 4) = \frac{5h^2}{8mL_x^2}$$

٣- قيمة طاقة عند $n_x = 2, n_y = 1$

$$E_{2,1} = \frac{h^2}{8mL_x^2} (4 + 4) = \frac{8h^2}{8mL_x^2} = \frac{h^2}{mL_x^2}$$

وهذه القيمة غير متوالدة

تابع المسحوب . الكيمياء الكمية .

4- إذا أصبح المستطيل مربعا . يصبح $L_x = L_y = L$ وبالنسبة .

$$E = \frac{n_x^2 h^2}{8mL^2} + \frac{n_y^2 h^2}{8mL^2} = \frac{h^2}{8mL^2} (n_x^2 + n_y^2)$$

5- قيمة الطاقة في الحالة $n_x = n_y = 2$

$$E_{2,2} = \frac{h^2}{8mL^2} (4 + 4) = \frac{h^2}{mL^2}$$

ثانياً : إذا طول درجتي .

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^2 \left(-\frac{1}{2} \nabla_i^2 - \frac{Z}{r_i} \right) + \frac{1}{r_{12}} = \hat{h}(1) + \hat{h}(2) + \hat{h}$$

$$= -\frac{1}{2} \nabla_1^2 - \frac{1}{2} \nabla_2^2 - \frac{Z}{r_1} - \frac{Z}{r_2} + \frac{1}{r_{12}}$$

$$1- \text{ المتابع الموجبي الذي يحقق حيز الاستيعاب . } \psi = \frac{1}{\sqrt{2!}} \begin{vmatrix} \psi_{10} & \psi_{20} \\ \psi_{11} & \psi_{21} \end{vmatrix}$$

وطاقة ذرة الهيليوم وفقاً للنسبة النووية الفعالة حسب

$$E = Z E_{\text{H}} = -\frac{1}{2} \left[Z \left(\frac{Z}{n_1} \right)^2 \right] \quad Z = 2 \quad E_{\text{H}} = -13.6 \text{ eV} = -2.18 \times 10^{-18} \text{ J}$$

$$= 2 \times 1 \times 0.30 = 1.7$$

$$E = -\frac{1}{2} \left[2 \left(\frac{1.7}{1} \right)^2 \right] = -2.89 \text{ a.u.}$$

2 طاقة ذرة الهيليوم وفقاً لتقريب الإلكترونات المستقلة .

$$E_{\text{app}} = \sum g_i E_i = 2 E_{\text{H}} = -\frac{1}{2} \left[2 \left(\frac{Z}{n_1} \right)^2 \right] = -4.00 \text{ a.u.}$$

و تكون هذه الطاقة أقل في الحقيقة الحقيقية بسبب إهمال عدساتها .
وهو قيمة عوصية

تابع لـ ψ الصحيح الكيمياء الكمية

$$\bar{E} = \frac{5}{8} \epsilon - 2\epsilon + \frac{3}{2} \epsilon$$

نحسب $\bar{E}$ من خلال شفاف للولادة وللملة باوي الكهف

فقط على $\psi = 1.6875$ ونضوي جـ (الملة) E

$$\bar{E} = (1.6875)^2 - 2 \times 2 \times 1.6875 + \frac{5}{8} \times 1.6875$$

$$= -2.8476 \text{ a.u.}$$

الدرجة : 100

اسم الطالب :

جامعة طرطوس

المدة : ساعتان

كلية العلوم – قسم الكيمياء

امتحان مقرر الكيمياء الكمومية لطلاب السنة الثانية كيمياء الدورة الأولى لعام 2020

35 درجة

السؤال الأول : أجب عن الأسئلة التالية (استخدم الواحدات الذرية) :

- 1- ما طاقة ذرة الهيدروجين في الوضع 2S؟
- 2- ما قيمة مركبة العزم المغناطيسي من أجل الإلكترون في الحالة 3d للهيدروجين ؟ علما ان مغناطيس بور $\beta_e = 9.274078 \times 10^{-24} \text{ J} \cdot \text{T}^{-1}$
- 3- ما درجة تعدد سوية الطاقة $n=4$ للهيدروجين ؟
- 4- ما عدد العقد السطحية الذي يمتلكه المدار 4d ؟ وما عدد العقد القطرية ؟
- 5- ما الطاقة الكامنة في ذرة الهيدروجين عندما يبتعد الإلكترون عن النواة بمقدار 2 . a.u .

(30 + 35)

السؤال الثاني : أجب عن السوائين التاليين :

أولا : ليكن لدينا جسيم حر كتلته m في صندوق احادي البعد طوله L ولتكن الطاقة الكامنة $V=0$ داخل الصندوق و $V = \infty$ خارجه . والمطلوب :

- 1- اكتب عبارة سويات الطاقة المسموح بها لهذه الجملة .
- 2- ما طاقة السوية الأرضية أو الأساسية؟
- 3- احسب قيمة طاقة السوية $n=2$ بدلالة L
- 4- بفرض ان الجسيم اصبح يتحرك في صندوق ثلاثي الأبعاد طول ضلعه L وبنفس شروط الطاقة الكامنة. ماهي عبارة الطاقة للجسيم في الحالة الجديدة .
- 5- احسب قيمة الطاقة في الحالة $n_x = n_y = n_z = 2$.
- 6- هل قيمة الطاقة المحسوبة في الطلب 5 متعددة وماذا يعني التعدد فيزيائيا .

ثانيا : اكتب المؤثر الها ملتوني لذرة الهليوم ($Z=2$) He ، ثم أجب عن الأسئلة الآتية .

- 1- اكتب التابع الموجي الذي يحقق مبدأ الاستبعاد لباولي ، ثم احسب طاقة الذرة وفقا للشحنة النووية الفعالة .
- 2- احسب طاقة هذه الذرة وفقا لتقريب الإلكترونات المستقلة .
- 3- احسب طاقة الذرة وفقا لطريقة مبدأ التغير علما ان $E = \zeta^2 - 2Z\zeta + 5/8 \zeta$.

مع تمنياتي للجميع بالتوفيق والنجاح

19 /2 /2020

مدرس المقرر : د . سليمان محمد



سليم نصير وقدر الكيمياء الكمومية سنة ثالثة كيمياء - الفصل الأول
للعام الدراسي ٢٠١٩ - ٢٠٢٠

السؤال الأول: يفتح السؤال إلى خمس بنود لكل بند سبع درجات

جواب السؤال الأول:

١ - طاقة ذرة الهيدروجين في الوصف 2S هي:

$$E_{2s} = -\frac{1}{2} \frac{(Z)^2}{(n)^2} \cdot a.u. = -\frac{1}{2} \frac{1}{4} = -\frac{1}{8} a.u.$$

درا ٧

٢ - قيمة مركبة العزم المغناطيسي من أجل الإلكترون في الحالة 3d للهيدروجين:

$$|\mu| = \mu_B \cdot \sqrt{l(l+1)} = \sqrt{6} \cdot \mu_B = 9.274078 \times 10^{-24} \times \sqrt{6}$$

$$= 2.27 \times 10^{-23} \text{ J.T}^{-1}$$

درا ٧

٣ - درجة تردد سوية الطاقة $n=4$ هو $n^2=16$ درا ٧

٤ - عدد العقد الطولية الذي يمتلكها المدار 4d هو l عقدة أي 2

عدد العقد القطرية بحسب من قانون $n-1-l=4-1-2=1$

٥ - الطاقة الكامنة في ذرة الهيدروجين هي

$$V = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

درا ٧

وفي الوحدات الذرية تصبح

$$V = -\frac{1}{r} a.u. = -\frac{1}{2} a.u.$$

درا ٧

السؤال الثاني: فكون من فالتين (الأولى 5 درجات والثانية 3 درجات)

أولاً: ١ - عبارة سويات الطاقة هي ① $E_n = \frac{n^2 h^2}{8mL^2}$... 6 درا

٢ - طاقة السوية الأرضية أو الأمالية هي قيمة الطاقة عندما $n=1$ نعوض

$$E_1 = \frac{h^2}{8mL^2}$$

درا 6

٣ - طاقة السوية $n=2$ نعوض في العلاقة ① فنحصل على

$$E_2 = \frac{4L^2}{8mL^2}$$

درا 6

٤ - بما أن الجسيم أصبح يتحرك في صندوق ثلاثي الأبعاد طول ضلعه L

$$E_{n_1, n_2, n_3} = \frac{h^2}{8mL^2} (n_1^2 + n_2^2 + n_3^2)$$

ويمكن استبدال n_1, n_2, n_3 بـ n_x, n_y, n_z

يذبح في الصفحة الثانية

تابع لـ ψ صحيح الكمية

الطاقة في الحالة

$$n_x = n_y = n_z = 2$$

جواب 2

$$E_{2,2,2} = \frac{h^2}{8mL^2} (2^2 + 2^2 + 2^2) = \frac{12h^2}{8mL^2} = \frac{3}{2} \frac{h^2}{8mL^2}$$

6. قيمة الطاقة المحسوبة في الطلب 5 طاقة غير معددة، لأنها تقابل تابع موجي واحد والمضرب العزيماني للمعددة. هو وجود قيمة واحدة للطاقة تقابل أكثر من تابع موجي أو تقابل توابع موجية مختلفة.

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^2 \left(-\frac{1}{2} \nabla_i^2 - \frac{Z}{r_i} \right) + \frac{1}{r_{12}} = \hat{h}(1) + \hat{h}(2) + \hat{h}$$

$$= -\frac{1}{2} \nabla_1^2 - \frac{1}{2} \nabla_2^2 - \frac{Z}{r_1} - \frac{Z}{r_2} + \frac{1}{r_{12}}$$

7. التابع الموجي الذي يحقق مبدأ الاستبعاد لباولي هو

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{2!}} \begin{vmatrix} \psi_{11} & \psi_{12} \\ \psi_{12} & \psi_{11} \end{vmatrix}$$

وطاقة ذرة الهيليوم وفقاً للشحنة النووية الفعالة هي

$$E = 2E_{1s} = -\frac{1}{2} \left[2 \left(\frac{Z_{eff}}{n_1} \right)^2 \right] \text{ و } Z_{eff} = Z - \sigma = Z - [(n-1) \times 0.35 + 9_1 \times 0.85 + 9_2 \times 1]$$

$$= Z - 1 \times 0.30 = 1.7$$

وبالتعويض نحصل على

$$E = -\frac{1}{2} \left[2 \left(\frac{1.7}{1} \right)^2 \right] = -2.89 \text{ a.u.}$$

جواب 5 -

2 - طاقة ذرة الهيليوم وفقاً لتقريب الإلكترونات المستقلة

$$E_{app} = \sum g_i E_i = 2E_{1s} = -\frac{1}{2} \left[2 \left(\frac{Z}{n_1} \right)^2 \right] = -4.00 \text{ a.u.}$$

وتكون هذه الطاقة أقل من القيمة الحقيقية بسبب إهمال حد التنافر وهو قيمة موجبة

جواب 10 -

3 - حساب الطاقة

$$\bar{E} = \bar{E} - 2Z\bar{E} + \frac{5}{8}\bar{E}$$

نحسب $\bar{E}$ من الاستنفاف للعلاقة ونجعله يساوي الصفر

فنحصل على $\bar{E} = 1.6875$ ونعوض في العلاقة

$$\bar{E} = (1.6875)^2 - 2 \times 2 \times 1.6875 + \frac{5}{8} \times 1.6875$$

$$= -2.8476 \text{ a.u.}$$

جواب 2 -

د. سليمان محمد

في 17/11/2017

30 درجة

السؤال الأول :

- 1- ليكن لدينا التوابع $\psi_1 = x$, $\psi_2 = x^2$, $\psi_3 = \cos x$, $\psi_4 = \exp(-x)$, $\psi_5 = \exp(-x^2)$ والمطلوب :
- أ - سمي التوابع التي تحقق شروط التابع الموجي (المقبول فيزيائيا) فيما سبق .
- ب- ماهي التوابع التي لا تحقق شروط التابع الموجي وما هو السبب .
- ج - أشر إلى كل تابع يمثل تابعا خاصا للمؤثر d/dx وماهي القيمة الخاصة له .
- د- أشر إلى كل تابع يمثل تابعا خاصا للمؤثر d^2/dx^2 , وماهي القيمة الخاصة .
- 2- اختر الإجابة الصحيحة مما يلي :
- أ - كم التعدد لسوية الطاقة $n=3$ في ذرة الهيدروجين . 1 , 3 , 6 , 9
- ب- الطاقة الكامنة في ذرة الهيدروجين عندما نبتعد عن النواة بمقدار 0.5 au .
-2au , -4au , -au , 1/2 au

30 درجة

السؤال الثاني :

- ليكن لدينا جسيم حر كتلته m يتحرك في صندوق ثلاثي البعد L_x , L_y , L_z و $v=0$ داخل الصندوق و $v=\infty$ خارج الصندوق والمطلوب :
- 1- اكتب العبارة العامة لسويات الطاقة المسموح بها لهذه الجملة .
- 2- بفرض $L_x = L_y = L_z = L$ ماهي عبارة الطاقة في هذه الحالة بدلالة L .
- 3- ماهي قيمة طاقة نقطة الصفر Z.P.E أو الطاقة الأرضية للجملة السابقة .
- 4- ماهي قيمة الطاقة بدلالة L عندما تكون $n_x = n_y = n_z = 2$.
- 5- هل قيمة الطاقة المحسوبة في الطلب الرابع متعددة , وما هو المعنى الفيزيائي للتعدد .

40 درجة

السؤال الثالث : أجب عن السؤالين التاليين .

الأول : أجب عن الأسئلة التالية .

- 1- ماهي عبارة الطاقة للهزاز التوافقي الكمي .
- 2- احسب قيمة الطاقة الكلية E_n في السوية $n=5$ للهزاز التوافقي .
- 3- ماهي قيمة الطاقة الكامنة المتوسطة والطاقة الحركية المتوسطة المحسوبة في الطلب الثاني .

الثاني :

- 1 - ماهو التابع الموجي لذرة الليثيوم في الحالة المستقرة حسب مبدأ الاستبعاد لباولي .
- 2- اكتب عبارة مؤثر الطاقة (الهملتوني) لذرة الليثيوم بفرض النواة ثابتة في مركز الاحداثيات .
- 3- بفرض أن $\hat{H} = \hat{H}^0 + \hat{H}^1$, ماهي قيمة مؤثر الاضطراب في ذرة الليثيوم .
- 4- احسب طاقة ذرة الليثيوم معدلة للترتبة صفر . حيث $H=27.2 \text{ ev}$ و $Z=3$.
- 5- احسب الطاقة الكلية للحالة المستقرة لذرة الليثيوم معدلة للترتبة الأولى. إذا كان $E^1 = 83.5 \text{ ev}$ قارن النتيجة مع القيمة الفعلية لطاقة الحالة المستقرة $E = -203.5 \text{ ev}$

سليم نصيحي لمقرر الكيمياء الكمومية لطلاب السنة الثانية

السؤال الأول: $\bar{m}$ - ψ_3 ، ψ_5 هي توابع تحقق شروط التابع الموجبي
 8 { ψ_1 ، ψ_2 ، ψ_4 لا تحقق شروط التابع الموجبي لأنها غير منتهية عندما $x \rightarrow \pm \infty$.

12 { ψ_4 - 5 : يمثل تابعا خاصا للمؤثر d/dx و قيمته الخاصة -1
 ψ_4 - 6 : يمثل تابعا خاصا للمؤثر d^2/dx^2 و قيمته الخاصة +1
 ψ_3 : تابعا خاصا للمؤثر d^2/dx^2 و قيمته الخاصة -1

2 $\bar{m}$ - العدد الكمية الطامة $n=3$ في ذرة الهيدروجين هو 4
 10 { n - الطاقة الكمية في ذرة الهيدروجين هي -2.0 eV

السؤال الثاني: 30 درجة

1 - العبارة العامة لويات الطاقة للجسيم

$$E_{n_x, n_y, n_z} = \frac{n_x^2 h^2}{8mL_x^2} + \frac{n_y^2 h^2}{8mL_y^2} + \frac{n_z^2 h^2}{8mL_z^2}$$

2 - $E_{n_x, n_y, n_z} = \frac{h^2}{8mL^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)$

3 - طاقة نقطة الصفر هي الطاقة في المستوى الأول عند $n_x = n_y = n_z = 1$

نصوص في علاقة الطاقة المستوية في الطلب الثاني فتصل إلى

$$E_{1,1,1} = \frac{h^2}{8mL^2} [(1)^2 + (1)^2 + (1)^2] = \frac{3h^2}{8mL^2}$$

4 - قيمة الطاقة بدلالة L عند ما $n_x = n_y = n_z = 2$ هي

$$E_{2,2,2} = \frac{h^2}{8mL^2} (4 + 4 + 4) = \frac{12h^2}{8mL^2} = \frac{3h^2}{2mL^2}$$

5 - ان القيمة $E = \frac{3h^2}{2mL^2}$ هي قيمة غير متعدد فهي قيمة وحيدة وقابل

تابع موجبي وحيد

المفاتيح الغير ياتي للعدد هو قيمة واحدة للطاقة يقابلها مجموعة توابع موجبي مختلفة

$$E_n = (n + \frac{1}{2}) h \nu$$

السؤال الثالث: 1 - عبارة الطاقة هي

2 - الطاقة الكلية E_n في السوية $n=5$ للمزار

$$E_5 = (5 + \frac{1}{2}) h \nu = \frac{11}{2} h \nu$$

3 - الطاقة الكمية المتوسطة $\bar{V}$ والطاقة المتوسطة $\bar{T}$

كل منهما ساوي الأخرى وساوي $\frac{E}{2}$ ونسب القيمة

$$\bar{T} = \bar{V} = \frac{E}{2} = \frac{11}{4} h \nu$$

1 - ينبع في الصفحة الثانية

سأ : 2 - 1 - التابع الموصي لذرة الليثيوم في الحالة المستقر . يكتب بأحد التكلين .

$$\psi = 1s(1), 1s(2), 2s(3)$$

$$\psi = \left(\frac{1}{6}\right)^{\frac{1}{2}} \begin{pmatrix} 1s\alpha(1) & 1s\beta(1) & 1s\alpha(1) \\ 1s\alpha(2) & 1s\beta(2) & 1s\alpha(2) \\ 1s\alpha(3) & 1s\beta(3) & 1s\alpha(3) \end{pmatrix} \quad \text{أو} \quad \psi = \left(\frac{1}{6}\right)^{\frac{1}{2}} \begin{pmatrix} 1s\alpha(1) & 1s\beta(1) & 1s\beta(1) \\ 1s\alpha(2) & 1s\beta(2) & 1s\beta(2) \\ 1s\alpha(3) & 1s\beta(3) & 1s\beta(3) \end{pmatrix}$$

$$\hat{H} = -\frac{1}{2} \nabla_1^2 - \frac{1}{2} \nabla_2^2 - \frac{1}{2} \nabla_3^2 - \frac{Z}{r_1} - \frac{Z}{r_2} - \frac{Z}{r_3} + \frac{1}{r_{12}} + \frac{1}{r_{13}} + \frac{1}{r_{23}} \quad \text{2 - مؤثر الطاقة}$$

$$\hat{H} = \hat{H}^0 + \hat{H}' \quad \text{3 -}$$

$$\hat{H} = \left(-\frac{1}{2} \nabla_1^2 - \frac{Z}{r_1}\right) + \left(-\frac{1}{2} \nabla_2^2 - \frac{Z}{r_2}\right) + \left(-\frac{1}{2} \nabla_3^2 - \frac{Z}{r_3}\right) + \frac{1}{r_{12}} + \frac{1}{r_{13}} + \frac{1}{r_{23}}$$

$$E_n = -\frac{Z^2}{2n^2} \quad \text{4 - طاقة ذرة الليثيوم وعدلة للرشة صفر هي}$$

$$E^0 = -\frac{9}{2} - \frac{9}{2} - \frac{9}{8} = -\frac{81}{8} \text{ H} = -275.5 \text{ e.v}$$

5 - الطاقة الكلية للحالة المستقر لذرة الليثيوم وعدلة للرشة الأولى .

$$E = E^0 + E' = -275.5 + 83.5 = -192.0 \text{ e.v}$$

ووفارئة هذه الطاقة مع القيمة الفعلية لطاقة الحالة المستقرة

فبد أن $E < E^0$ من طاقة الحالة المستقرة . وهذا يؤكد طاقة

الحالة المستقرة هي الحالة الأدنى للطاقة .

لكل طلب 5 درجات . د. إيمان محمد

بي 6/6/14

امتحان مقرر الكيمياء الكمومية لطلاب السنة الثانية كيمياء الدورة الأولى للعام الدراسي 2018

30 درجة

السؤال الأول :

1- ليكن لدينا التتابع $\psi_1 = x$, $\psi_2 = x^2$, $\psi_3 = \cos x$, $\psi_4 = \exp(-x)$, $\psi_5 = \exp(-x^2)$ والمطلوب :

- أ - أشر إلى كل تابع يحقق شروط التابع الموجي (المقبول فيزيائياً) فيما سبق.
 - ب- حدد كل تابع لا يحقق شروط التابع الموجي وبين السبب.
 - ج - أشر إلى كل تابع يمثل تابعا خاصا للمؤثر d/dx وماهي القيمة الخاصة له.
 - د- أشر إلى كل تابع يمثل تابعا خاصا للمؤثر d^2/dx^2 وماهي القيمة الخاصة.
- 2- اختر الإجابة الصحيحة فيمايلي :

- أ - كم تعدد سوية الطاقة (1, 2, 3) . 1 , 3 , 6 , 9
- ب- طاقة نقطة الصفر للحركة الاهتزازية التوافقية هي :

$$E = h(v - v_0) , \quad E = h v_0 , \quad E = 1/2 h v_0 , \quad E = 1/2 (h^2 v_0)$$

20 درجة

السؤال الثاني :

ليكن لدينا جسيم كتلته m يتحرك في صندوق ثنائي البعد ذي الطولين L_x , L_y وبفرض أن $L_x = 2 L_y$ و $v = 0$ داخل الصندوق و $v = \infty$ خارج الصندوق والمطلوب :

- 1- اكتب العبارة العامة لسويات الطاقة المسموح بها لهذه الجملة .
- 2- ماهي طاقة نقطة الصفر $Z.P.E$ للجملة السابقة .
- 3- ما هي قيمة الطاقة بدلالة L_x عندما تكون $n_x = n_y = 2$ و $n_x = 4$, $n_y = 1$. هل قيمة الطاقة هذه متعددة , وكم تعددها .
- 4- نفرض أن $V = 10 \text{ J}$ داخل الصندوق , هل يؤثر ذلك ف قيمة الطاقة الخاصة وفي التتابع الموجية

50 درجة

السؤال الثالث : أجب عن السؤالين التاليين .

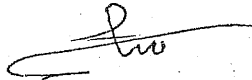
الأول : أجب عن الأسئلة التالية مستخدما الوحدات الذرية .

- 1- ما طاقة ذرة الهيدروجين في الوضع 1S .
- 2- ما طاقة He^+ عند $n=1$ و $n=2$.
- 3- ما درجة تعدد سوية الطاقة $n=4$ للهيدروجين .
- 4- ما عدد العقد السطحية (الزاوية) الذي يمتلكه الفلك $4d_{xz}$, وما عدد العقد القطرية له .
- 5- ما الطاقة الكامنة في ذرة الهيدروجين عندما يتعد عن النواة بمقدار 0.5 au .

الثاني :

- 1 - ماهو التابع الموجي لذرة الليثيوم في الحالة المستقرة حسب مبدأ الاستبعاد لباولي .
- 2- اكتب عبارة مؤثر الطاقة (الهملتوني) لذرة الليثيوم بفرض النواة ثابتة في مركز الاحداثيات .
- 3- بفرض أن $\hat{H} = \hat{H}^0 + \hat{H}^1$, ماهي قيمة مؤثر الاضطراب في ذرة الليثيوم .
- 4- احسب طاقة ذرة الليثيوم معدلة للرتبة صفر . حيث $H = 27.2 \text{ ev}$ و $Z = 3$.
- 5- احسب الطاقة الكلية للحالة المستقرة لذرة الليثيوم معدلة للمرتبة الأولى . إذا كان $E^1 = 83.5 \text{ ev}$

قارن النتيجة مع القيمة الفعلية لطاقة الحالة المستقرة $E = - 203.5 \text{ ev}$



١- ψ_3 و ψ_5

٢- ψ_1 و ψ_2 و ψ_4 . لا تحقق شروط التتابع الموجي لأنها غير متشعبة . عندما $x \rightarrow \pm \infty$

٣- ψ_4 : يمثل تابعاً خاصاً للمؤثر d/dx و قيمته الخاصة -١

٤- ψ_4 : يمثل تابعاً خاصاً للمؤثر d^2/dx^2 و قيمته الخاصة +١

$\psi_3 =$ تابعاً خاصاً للمؤثر d^2/dx^2 و قيمته الخاصة -١

٥- العدد لوني الطاقة (١, ٢, ٣) هو ٦

٦- طاقة نقطة الصفر للحركة الاهتزازية ، التوافقية هي $E = \frac{1}{2} h \nu$

السؤال الثاني :

١- الصيغة العامة لويات الطاقة هي $E = \frac{h^2}{8m} \left(\frac{n_x^2}{L_x^2} + \frac{n_y^2}{L_y^2} \right)$

وحيث $L_x = 2L_y$ $L_y = \frac{L_x}{2}$ وعند التعويض في عبارة الطاقة

نصبح $E_{n_x, n_y} = \frac{h^2}{8mL_x^2} (n_x^2 + 4n_y^2)$

٢- طاقة نقطة الصفر هي $E_{1,1}$ نعوض كما في قيم n_x و n_y بواحد

فنصبح قيمة الطاقة $E_{1,1} = \frac{h^2}{8mL_x^2} (1^2 + 4(1^2))$

$E_{1,1} = \frac{5h^2}{8mL_x^2}$ $n_x=4, n_y=1$

٣- قيمة الطاقة عندما تكون $n_x = n_y = 2$. نعوض في عبارة الطاقة . وكذلك

$E_{2,2} = \frac{h^2}{8mL_x^2} (4 + 16) = \frac{20h^2}{8mL_x^2}$ و $E_{4,1} = \frac{20h^2}{8mL_x^2}$

فجد ان قيمة الطاقة متساوية وبتعدد ياتي -٢-

٤- يؤثر ذلك في قيم الطاقة الخاصة . ولا يؤثر في التتابع الموجية

السؤال الثالث : طاقة ذرة الهيدروجين في الوصل ١٥ هو $E_{15} = -\frac{1}{2} a.u$

٥- طاقة He^+ عند $n=1$ و $n=2$

عند $n=1$ هو $E_{He^+} = -\frac{1}{2} \frac{4}{1^2} = -2 a.u$ وعند $n=2$ هو

$E_{He^+} = -\frac{1}{2} \frac{4}{(2)^2} = -\frac{1}{2} a.u$

٦- درجة لتوالد أو العدد لوني طاقة $n=4$ هو $n^2=16$

٧- عدد العقد الطيفية هو قيمة العدد l وهو $l=2$ في الغلاف d اذا عدد العقد الطيفية ٢ وعدد العقد المدارية هو

$n-1-2 = 4-3 = 1$

٨- الطاقة اللازمة في ذرة الهيدروجين

$E = V = -\frac{1}{r} = -\frac{1}{0.5} = -2 a.u$

القسم الثاني : 1- اكتب الموجب لذرة الليثيوم في الحالة المستقرة

يجب أن يكتب بأحد شكلين $\psi = 1s(1) \cdot 1s(2) \cdot 2s(3)$ أو $\psi =$

$$\psi_1 = \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{vmatrix} 1s\alpha(1) & 1s\beta(1) & 1s\alpha(1) \\ 1s\alpha(2) & 1s\beta(2) & 1s\alpha(2) \\ 1s\alpha(3) & 1s\beta(3) & 1s\alpha(3) \end{vmatrix} , \quad \psi_2 = \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{vmatrix} 1s\alpha(1) & 1s\beta(1) & 1s\beta(1) \\ 1s\alpha(2) & 1s\beta(2) & 1s\beta(2) \\ 1s\alpha(3) & 1s\beta(3) & 1s\beta(3) \end{vmatrix}$$

2- مؤثر الطاقة $\hat{H} = -\frac{1}{2} \nabla_1^2 - \frac{1}{2} \nabla_2^2 - \frac{1}{2} \nabla_3^2 - \frac{Z}{r_1} - \frac{Z}{r_2} - \frac{Z}{r_3} + \frac{1}{r_{12}} + \frac{1}{r_{13}} + \frac{1}{r_{23}}$

3- $\hat{H} = \hat{H}^0 + \hat{H}'$ وبالنسبة $\hat{H} = \hat{H}^0 + \hat{H}'$ $\hat{H} = \hat{H}^0 + \hat{H}'$
 $= (-\frac{1}{2} \nabla_1^2 - \frac{Z}{r_1}) + (-\frac{1}{2} \nabla_2^2 - \frac{Z}{r_2}) + (-\frac{1}{2} \nabla_3^2 - \frac{Z}{r_3}) + \frac{1}{r_{12}} + \frac{1}{r_{13}} + \frac{1}{r_{23}}$

4- طاقة ذرة الليثيوم وعدلة للرئيسية صفر هي $E_n = -\frac{Z^2}{2n^2}$

$E^0 = -\frac{9}{2} - \frac{9}{2} - \frac{9}{8} = -\frac{81}{8} \text{ H} = -275.5 \text{ eV}$

5- الطاقة الكلية للحالة المستقرة لذرة الليثيوم وعدلة للرئيسية الأولى

$E = E^0 + E' = -275.5 + 83.5 = -192.0 \text{ eV}$

ومقارنته هذه الطاقة مع القيمة الفعلية لطاقة الحالة المستقرة

نجد أن E من طاقة الحالة المستقرة وهذا يؤكد طاقة الحالة المستقرة هي الحالة الأدنى للطاقة

د. سليمان محمد

س

دورات تشرين

المدة : ساعتان

الدرجة : 100

جامعة تشرين - كلية العلوم
قسم الكيمياء
امتحان مقرر الكيمياء الكمومية لطلاب السنة الثانية كيمياء / فصل أول 2016

نموذج - B -

السؤال الاول : اختر الإجابة الصحيحة مما يلي (مستخدماً الواحدات النرية)
ملاحظة : اكتب الأرقام من 1 إلى 10 على دفتر الإجابة بشكل عمودي وضع مقابل الرقم الإجابة الصحيحة دون أي شرح .

- 1- تعدد مستوي الطاقة $n=4$ في ذرة الهيدروجين هو .
9 , 8 , 16 , 5
- 2- طاقة He^+ عندما $n=1$ هي .
-1 a.u , -4 a.u , -2 a.u , -1/2 au
- 3- طاقة الفلك S 1 في ذرة الهيدروجين هي .
-1/2 a.u , -1 a.u , -2 a.u , -1/4 a.u
- 4- عدد العقد الكلية للفلك d_{xy} في ذرة الهيدروجين هو .
3 , 2 , 5 , 7
- 5- الطاقة الكامنة في الهيدروجين على بعد من النواة $r = 0.5a.u$.
-1/2a.u , -3a.u , -2a.u , -1/4a.u
- 6- عدد العقد القطرية في الفلك $4d_{xy}$ هو .
1 , 5 , 2 , 7
- 7- عدد العقد السطحية أو الزاوية في الفلك $4d_{xy}$ هو .
1 , 2 , 3 , 5
- 8- الطاقة الصفرية للهزاز التوافقي الكوموي هي .
1/2 h v , 1 h v , 3/2 h v , 2 h v
- 9- الطاقة الكامنة المتوسطة للهزاز التوافقي الكوموي هي .
 $V=T, V=1/2 T, V=1/4 T, V=2 T$
- 10- طاقة السوية الرابعة للهزاز التوافقي الكوموي هي .
10 h v , 9 h v , 3/2 h v , 9/2 h v

السؤال الثاني : 20 درجة

ليكن لدينا جسيم حر كتلته m يتحرك في صندوق ثنائي البعد مستطيل الشكل $L_x = 2L_y$ و
 $V=0$ داخل الصندوق و $V=\infty$ خارجه والمطلوب :

- 1- ماهي عبارة سويات الطاقة المسموح بها لهذه الجملة بدلالة L_x .
- 2- ماهي قيمة طاقة نقطة الصفر Z.P.E . لهذه الجملة .
- 3- ماهي قيمة الطاقة عندما $n_x=2, n_y=1$, هل هذه السوية متوالة .
- 4- بفرض المستطيل أصبح مربعاً طول ضلعه L . كيف تصبح عبارة الطاقة .
- 5- ماهي قيمة الطاقة الجديدة في المربع عندما n_x أو n_y أحدهما تساوي 2 والأخرى 1 , هل هذه السوية متعددة وكم التعدد .

مع تمنياتي للجميع بالتوفيق والنجاح

اللائقية في 18 / 2 / 2016

د سليمان محمد

يتبع في الصفحة الثانية

مس

Agel

السؤال الثالث: (20 درجات): أجب عن الأسئلة الآتية:

يعطى التابع الموجي لأيون البيريليوم $\text{Be}^+ (Z=4)$ بالشكل $\psi = 1s^2 2s^1$ ، المطلوب:

- (a) حساب طاقة هذا الأيون وفقاً للشحنة النووية الفعالة.
 (b) حساب طاقته تبعاً لتقريب الإلكترونات المستقلة. لماذا تعد قيمة هذه الطاقة أقل من القيمة الحقيقية؟
 (c) اكتب المؤثر الهاملتوني، ثم حدد طاقته تبعاً لطريقة الاضطراب علماً أن $J_{1s1s} = \frac{5Z}{8} \text{ a.u.}$

$$J_{1s2s} = \frac{17Z}{81} \text{ a.u. و}$$

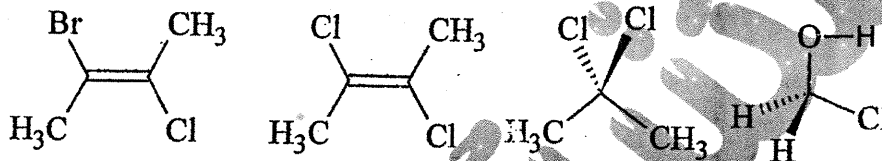
(d) طاقة هذا الأيون تبعاً لطريقة مبدأ التغيير عند استخدام التابع الذري $\phi(i) = \sqrt{\xi^2/\pi} \exp(-\xi r)$ ، علماً أن

$$\bar{E} = \xi^2 - 2Z\xi + \frac{5}{8}\xi - 0.3424$$

(e) هل يعد التابع المستخدم في الطلب d مقبولاً فيزيائياً، علماً أن الطاقة الحقيقية تساوي $E_{\text{exp}} = -14.5 \text{ a.u.}$ ولماذا تكون دقة طريقة الاضطراب أقل من دقة مبدأ التغيير؟

السؤال الرابع: (5 درجة)

حدد عناصر التناظر للجزيئات المبينة أدناه موضحاً بالرسم ما الجزيئات المذكورة أدناه غير قطبية، ولماذا؟



السؤال الخامس: (25 درجة)

1. اكتب المؤثر الهاملتوني لجزيء أيون الهيدروجين H_2^+ ، كيف تعالج طريقة بورن - أوبنهايمر هذا الهاملتون عند حل معادلة شرودينغر؟
 2. اكتب المعادلة التجريدية للجزيء المبين في الجدول أدناه، ثم ارسم مخطط مستويات الطاقة الإلكترونية π .

	g_i	x_i	C1	C2	C3	C4	C5	C6
1 C	2	-1.932	0.325	0.628	0.444	0.230	0.230	0.444
2 C	2	-1.000	0.000	0.000	-0.500	-0.500	0.500	0.500
3 C	2	-0.518	0.628	0.325	-0.230	-0.444	-0.444	-0.230
4 C	0	0.518	-0.628	0.325	0.230	-0.444	-0.444	0.230
5 C	0	1.000	0.000	0.000	0.500	-0.500	0.500	-0.500
6 C	0	1.932	0.325	-0.628	0.444	-0.230	-0.230	0.444

اكتب فقط العلاقات الضرورية لتحديد كل من E_T ، E_d ، E'_T ، q_i ، P_{jk} ، و F_j ، ثم أكمل الجدول الآتي:

	$E_T =$			$E_d =$		
الذرة	C1	C2	C3	C4	C5	C6
q_i	$q_1 =$	$q_2 =$	$q_3 =$	$q_4 =$	$q_5 =$	$q_6 =$
P_{jk}	$P_{12} =$	$P_{23} =$	$P_{34} =$	$P_{56} =$	$P_{62} =$	
F_j	$F_1 =$	$F_2 =$	$F_3 =$	$F_4 =$	$F_5 =$	$F_6 =$

اشرح النتائج. ملاحظة: استند من مفهوم التناظر لاختصار الحسابات.

نتمنى لكم التوفيق والنجاح

2015/01/02

مدرس المقرر

د. محمد عبد الحكيم بدوي

الم تصحيح وقر الكيمياء الكمومية للدورة الأولى عام ٢٠١٥ / ٢٠١٦
 جواب السؤال الأول : يتضمن عشر ذرات من ١٥ إلى ١٠ للخطأ صحيح ثلاث درجات
 وفق نموذجين A و B .

نموذج B -

- 1 - 16
- 2 - $-2a.u$
- 3 - $-\frac{1}{2}a.u$
- 4 - 3
- 5 - $-2a.u$
- 6 - 1
- 7 - 2
- 8 - $\frac{1}{2}h\nu$
- 9 - $\bar{V} = \bar{T}$
- 10 - $\frac{3}{2}h\nu$

نموذج A -

- 1 - $-2a.u$
- 2 - 16
- 3 - 3
- 4 - $-\frac{1}{2}a.u$
- 5 - 1
- 6 - $-2a.u$
- 7 - $\frac{1}{2}h\nu$
- 8 - 2
- 9 - $\frac{3}{2}h\nu$
- 10 - $\bar{V} = \bar{T}$

الجواب الثاني : الطلب ① + ② + ③ أربع درجات لكل جواب صحيح
 الطلب 4 ثلاث درجات، الطلب 5 خمس درجات

١ - عبارة لطاقة الأنظمة للحالة المدروسة هي :
 $E = \frac{h^2}{8mL^2} (n_x^2 + n_y^2)$... ①

ويعويض العلاقة المعطاة بالفرض $L_x = 2L_y$ تصبح العلاقة ①
 $E_{n_x, n_y} = \frac{h^2}{8mL_x^2} (n_x^2 + 4n_y^2)$... ②

لحساب السوية الصفرية Z.P.E. نضع $n_x = n_y = 1$ فنحصل على القيمة
 $E_{1,1} = \frac{h^2}{8mL_x^2} ((1)^2 + 4(1)^2) = \frac{5h^2}{8mL_x^2}$... ③

حساب قيمة الطاقة عند $n_x = 2, n_y = 1$ فنحصل على
 $E_{2,1} = \frac{h^2}{8mL_x^2} ((2)^2 + 4(1)^2) = \frac{8h^2}{8mL_x^2} = \frac{h^2}{mL_x^2}$... ④

وهذه السوية غير متوالة، عندنا تحول المسطيل الى مربع، تصبح عبارة الطاقة
 $E_{n_x, n_y} = \frac{h^2}{8mL^2} (n_x^2 + n_y^2)$... ⑤

٥ - حساب قيمة الطاقة في المربع
 $E_{1,2} = \frac{h^2}{8mL^2} (5) = \frac{5h^2}{8mL^2}$

عند السوية متعددة والتعدد هو 2 يسأل
 الحالة (١, 2) 6 (2, 1) بالسوية (n_x, n_y)

السلم تصحيح مقرر الكيمياء الكوانتية الدورة الأولى للعام الدراسي 2015-2016
جواب السؤال الرابع: 20 درجة

(a). نحدد الشحنة النووية الفعالة من أجل كل مدار بالعلاقة الآتية:

$$\xi_{1s} = 4 - 0.30 = 3.7, \quad \xi_{2s} = 4 - 2 \times 0.85 = 2.3$$

ثم نعوض في عبارة الطاقة:

$$E_{Be} = -\frac{1}{2} \left[2 \left(\frac{\xi_{1s}}{1} \right)^2 + \left(\frac{\xi_{2s}}{2} \right)^2 \right] = -14.351 \text{ a.u.}$$

(b). حسب تقريب الإلكترونات المستقلة تساوي الطاقة طاقة المدارات المشغولة بالإلكترونات، أي أن:

$$E_{app} = 2E_{1s} + E_{2s} = -\frac{1}{2} \left[2 \left(\frac{Z}{1} \right)^2 + \left(\frac{Z}{2} \right)^2 \right] = -18 \text{ a.u.}$$

تعد هذه القيمة أقل من القيمة الحقيقية وذلك بسبب إهمال قوى التنافر بين الإلكترونات.

(c) يكتب المؤثر الهاملتوني على النحو الآتي:

$$\hat{H}_B = \sum_{i=1}^3 \left(-\frac{1}{2} \nabla_i^2 - \frac{Z}{r_i} \right) + \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=i+1}^n \frac{1}{r_{ij}} = \hat{h}_1 + \hat{h}_2 + \hat{h}_3 + \hat{h}' = \hat{h}(i) - \frac{1}{2} \nabla_i^2 - \frac{Z}{r_i} \quad \hat{h}' = \frac{1}{r_{12}} + \frac{1}{r_{13}}$$

وتحسب الطاقة حسب طريقة الاضطراب من العلاقة الآتية:

$$E_{Be^+} = E^0(1) + E^0(2) + E^0(3) + E^{(1)} = 2E_{1s} + E_{2s} + E^{(1)} = E_{app} + J_{1s1s} + 2J_{1s2s}$$

بالتعويض نجد أن:

$$E_{Be^+} = -18 + 2.5 + 0.840 = -13.821 \text{ a.u.}$$

(d) لتحديد الطاقة وفقاً لمبدأ التغير نحسب أولاً قيمة معامل التغير ξ بتطبيق شرط النهاية الصغرى، أي بجعل مشتق الأول لعبارة الطاقة المعطاة في نص المسألة بالنسبة إلى هذا المعامل مساوياً للصفر، أي أن:

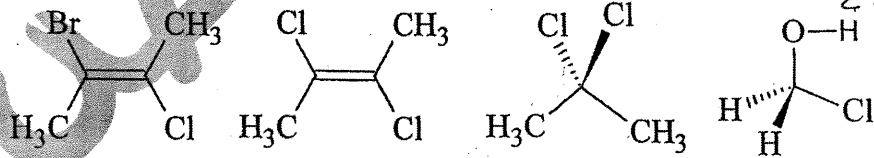
$$\frac{d\bar{E}}{d\xi} = \bar{E} = 2\xi - 2Z + \frac{5}{8} = 0 \Rightarrow \xi = Z - \frac{5}{16} = 4 - \frac{5}{16} = 3.688 \text{ a.u.}$$

ثم نعوض هذه القيمة فنحصل على طاقة الجملة المدروسة:

$$\bar{E} = (3.688)^2 - 2 \times 4 \times 3.688 + \frac{5}{8} \times 3.688 - 0.3424 = -13.904 \text{ a.u.}$$

ولما كانت النتيجة $\bar{E} > E^0$ ، فالتابع المزجي المستخدم يعد مقبولاً فيزيائياً. لأن طريقة الاضطراب تستخدم الشحنة النووية الحقيقية في الحساب.

السؤال السابع: (5 درجة):



إن جميع الجزيئات قطبية ما عدا الجزيء trans-ClCH₃C=CCH₃Cl لأنه يتمتع بمركز تناظر.

السؤال السابع: (25 درجة)

1. يعطى الهاملتون الموافق لجزيء متعدد النوى بالعلاقة الآتية:

$$\hat{H}(r_A, r_B, r) = -\frac{1}{2} \left[\nabla_i^2 + \frac{\nabla_A^2}{1836} + \frac{\nabla_B^2}{1836} \right] - \frac{1}{r_{iA}} - \frac{1}{r_{iB}} + \frac{1}{R_{AB}} + \frac{1}{r_{12}}$$

ينص تقريب بورن - أوينهايمر على أنه لما كانت النوى أثقل بكثير من الإلكترونات، أي أبطأ بكثير من سرعة الإلكترونات، فيمكن دراسة حركة الإلكترونات وحركة النوى بصورة مستقلة وذلك بإهمال جميع الحدود المتعلقة بالنوى في

الهاملتون المذكور أعلاه، فنحصل بذلك على الهاملتون المتعلق بالإلكترونات فقط، ثم نقوم بحل معادلة شرودينغر الموافق لهذا الهاملتون، بعد ضم قوى التدافع بين النوى الذي يمثل الحد الأخير في الهاملتون السابق، للحصول على الطاقة الإلكترونية، والتوابع الموجية. ويمكن تلخيص ذلك بكتابة معادلة شرودينغر بالشكل الآتي:

$$(\hat{H}_{el} + V_{NN})\psi_{el} = U\psi_{el}; \quad \hat{H}(r_A, r_B, r) = -\frac{1}{2}\nabla_i^2 - \frac{1}{r_{iA}} - \frac{1}{r_{iB}} + \frac{1}{R_{AB}} + \frac{1}{r_{12}}$$

وبعد حل الجزء المتعلق بحركة الإلكترونات، نأخذ المتعلق بحركة النوى (الذي أهمل في البداية)، ونقوم بحل معادلة شرودينغر الموافقة، ويضم الحل الطاقة الداخلية للجملية، وهي تمثل الطاقة الاهتزازية والطاقة الدورانية؛ إذ يمكن أيضاً تقسيم الجزء المتعلق بالنوى إلى قسمين: القسم المتعلق بالحركة الاهتزازية، والقسم المتعلق بالحركة الدورانية، ثم يتم حل القسمين بصورة منفصلة، للحصول على الطاقة الاهتزازية والطاقة الدورانية. يمكن تلخيص ما سبق بالعلاقات الآتية:

$$\psi_{total} = \psi_e \psi_v \psi_r$$

$$E_{total} = E_e + E_v + E_r$$

إذ يمثل ψ_{total} و E_{total} التابع الموجي الكلي، والطاقة الكلية للجملية المدروسة.

2. تكتب المعادلة التجريدية والتوزيع الإلكتروني على النحو الآتي:

$$\begin{vmatrix} x & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & x & 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & x & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & x & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & x & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & x \end{vmatrix} = 0$$

-2β
 β
 α
 β
 $+2\beta$

$E_6 = \alpha - 1.932\beta$
 $E_5 = \alpha - 1.000\beta$
 $E_4 = \alpha - 0.518\beta$
 $E_3 = \alpha + 0.518\beta$
 $E_2 = \alpha + 1.000\beta$
 $E_1 = \alpha + 1.932\beta$

تحدد الطاقة الكلية، وطاقة الوضع المثار، وطاقة الثبات الإضافي من العلاقات الآتية:

$$E_T = \sum_{i=1}^3 g_i E_i = 2E_1 + 2E_2 + 2E_3, \quad E_d = E_T - E_l, \quad E_l = n\alpha + 2n'\beta$$

أما علاقات الشحنة المتمركزة ورتب الروابط والدليل التكافؤ الحر للذرات فهي:

$$q_j = \sum_{i=1}^3 g_i c_{ij}^2 = 2c_{1j}^2 + 2c_{2j}^2 + 2c_{3j}^2, \quad P_{kj} = \sum_{i=1}^3 g_i c_{ik} c_{ij} = 2c_{1k} c_{1j} + 2c_{2k} c_{2j} + 2c_{3k} c_{3j}$$

$$F_j = \sqrt{3} - \sum_i P_{ji}$$

نتائج الحسابات:

$E_T = 6\alpha + 6.900\beta$			$E_d = 0.900\beta$			
الذرة	C ₁	C ₂	C ₃	C ₄	C ₅	C ₆
q_j	$q_1 = 1.00$	$q_2 = 1.00$	$q_3 = 1.00$	$q_4 = 1.00$	$q_5 = 1.00$	$q_6 = 1.00$
P_{jk}	$P_{12} = 0.816$	$P_{23} = 0.408$	$P_{34} = 0.908$	$P_{65} = 0.908$	$P_{26} = 0.408$	-
F_j	$F_1 = 0.916$	$F_2 = 0.507$	$F_3 = 0.415$	$F_4 = 0.824$	$F_5 = 0.824$	$F_6 = 0.415$

نلاحظ أن جميع الذرات تتمتع بالشحنة نفسها، ويمكننا تحديد المراكز الفعالة كيميائياً بمقارنة الدليل التكافؤ الحر. نلاحظ أن الذرة التي دليل تكافؤها الحر أكبر ما يمكن هي C₁، وتليها الذرتين C₄ و C₅، وتصبح الدليل أقل عند الذرات المركزية. أما عند مقارنة رتب الروابط فنلاحظ أن للرابطة المضاعفة رتب أكبر مما للرابطة الأحادية، أي أنها أقصر من الروابط الأحادية وهذا يتوافق مع البنية المقترحة.

د. محمد عبد الحكيم بدوي

المدة : ساعتان
الدرجة : 100

جامعة تشرين
كلية العلوم - قسم الكيمياء

امتحان مقرر الكيمياء الكمومية لطلاب السنة الثانية كيمياء الده : الإضافية للعام الدراسي 2015

السؤال الأول : ضع إشارة (✓) أمام العبارة الصحيحة وإشارة (X) أمام العبارة الخاطئة ، ثم صحح العبارات الخاطئة .

- 1- إذا كان التابع الموجي منظم فإن مربعه يساوي الكثافة الاحتمالية (✓) .
2- يتمتع الجسيم في حفرة كمون احادية البعد بسويات طاقة كممة بدون طاقة وضع صفري محددة (X) .

3- يعبر عن طاقة الهزاز التوافقي بالعبارة $E = (n + 1/2) h v$ حيث $n = 0, 1, 2, \dots$ و v تواتر الهزاز . وهذا يعني أن سويات الطاقة متوالدة وطاقة الوضع الصفري هي $h v$ (X) .

4- يتطابق الهزاز الكمومي والهزاز التوافقي البسيط بالنسبة إلى احتمال وجود الجسيم عند نقاط الانعطاف وفي المركز (X) .

5- يتميز كل تابع موجي لحالة مستقرة بثلاثة أعداد كمومية n, l, m وتعد جميعها أعداد صحيحة (✓) .

6- يميز الطيف الذري أو الجزيئي المادة المسببة له (✓) .

7- وجود التواتر المبرج ν_0 في المفعول الكهروضوئي يدعم النظرية الموجية للضوء (X) .

السؤال الثاني : اختر الإجابة الصحيحة فيما يلي موضحاً سبب اختيارك .

1- أحد هذه التوابع يحقق شرط التابع الموجي المقبول فيزيائياً .

$$\psi = \exp(x) , \psi = \sin x , \psi = 1/2 x^2 , \psi = 7x$$

2- أحد هذه التوابع هو تابع خاص للمؤثر d/dx .

$$\psi = \exp(\alpha x) , \psi = \cos x , \psi = \sin x , \psi = x^2$$

3 - إن الهزاز التوافقي الكمومي .

أ - يتمتع بالخاصة $\psi = 0$ عند نقاط التقاطع التقليدية .

ب - يتمتع بسويات طاقة متعددة مرتين .

ج - يتمتع بسويات طاقة متناسبة مع مربع العدد الكمومي .

د - جميع الإجابات السابقة صحيحة .

هـ - لا يوجد جواب صحيح .

4- إن توالد سوية الطاقة ذات العدد الكمومي $l = 3$ هو .

$$11 , 6 , 10 , 25 , \boxed{7}$$

5- إن قيمة التتعدد لسوية الطاقة (1 , 2 , 2) في حفرة كمون ثلاثي الأبعاد هي .

$$14 , 13 , 6 , \boxed{3} , 1$$

السؤال الثالث : أجب عن الأسئلة التالية بالنسبة إلى الحالة $n = 4$ لذرة الهيدروجين . 15 درجة

1- ماهي قيمة الطاقة للحالة $n = 4$ في الواحدات الذرية .

2- ماهي قيمة النعند للحالة السابقة ، وما هو المعنى الفيزيائي للتعدد في هذه الحالة .

3- ماهي العلاقة بين طول متجهة العزم الزاوي وقيمة العدد الكمومي المداري l .

4- ما قيم طولية متجهة العزم الزاوي الممكنة في الواحدات الذرية .

يتبع في الصفحة الثانية

د. سليمان محمد

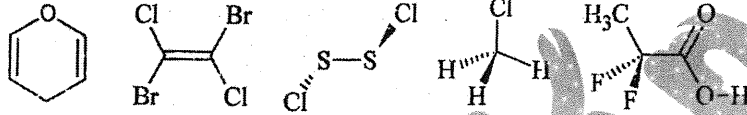
سليمان

تسليم

- السؤال الرابع: (20 درجات): أجب عن الأسئلة الآتية:
- اكتب المؤثر الهاملتوني والتابع الموجي الموافق لذرة الليثيوم $\text{Li}(Z=3)$. المطلوب:
1. حساب الطاقة الإلكترونية التجريبية لهذه الذرة إذ علمت أن طاقتي التآين الأول والثاني تساويان 0.198 و 2.778 بالوحدة الذرية (a.u.) على الترتيب.
 2. حساب الطاقة الإلكترونية للذرة نفسها والخطأ المنوي المطلق بالطرائق الآتية:
 - (a) تقريب الإلكترونات المستقلة (التقريب الصفري).
 - (b) طريقة الشحنة النووية الفعالة.
 - (c) طريقة مبدأ التغيير علماً أن $\bar{E} = \xi^2 - 2Z\xi + \frac{5}{8}\xi - 0.198$.
 - (d) طريقة الاضطراب علماً أن $J_{1s1s} = \frac{5Z}{8} \text{ a.u.}$, $J_{1s2s} = \frac{17Z}{81} \text{ a.u.}$, $E^{(1)} = W^{(1)} = J_{1s1s} + 2J_{1s2s}$.

السؤال الخامس: (5 درجة)

حدد عناصر التناظر للجزيئات المبينة أدناه موضحاً بالرسم.



السؤال السادس: (25 درجة)

1. عند دراسة جزيء شاردة الهيدروجين H_2^+ يستخدم التابع $\psi = c_A 1s_A + c_B 1s_B$ في طريقة التركيب الخطي للمدارات الذرية، والمطلوب استنتاج طاقتي المدارين الرابط والمضاد للربط E_+ ، والتابعين الموجبين الموافقين ψ_+ ؟
2. اكتب المعادلة التجريبية للجزيء المبين في الجدول أدناه، ثم ارسم مخطط سويات الطاقة الإلكترونية π :

	g_i	x_i	C1	C2	C3	C4
4	2	-2.170	0.612	0.523	0.523	0.282
1	2	-0.311	0.254	-0.368	-0.368	0.815
3	0	1.000	0.000	0.707	-0.707	0.000
2	0	1.481	0.749	-0.302	-0.302	-0.506

اكتب فقط العلاقات الضرورية لتحديد كل من E_x ، و E_d ، و q_i ، و P_{jk} ، و F_j ، ثم أكمل الجدول الآتي:

الذرة	$E_x =$		$E_d =$	
	C1	C2	C3	C4
q_i	$q_1 =$	$q_2 =$	$q_3 =$	$q_4 =$
P_{jk}	$P_{12} =$	$P_{23} =$	$P_{31} =$	$P_{14} =$
F_j	$F_1 =$	$F_2 =$	$F_3 =$	$F_4 =$

ناقش النتائج.

نتمنى لكم التوفيق والنجاح

2015/09/03

مدرس المقرر
د. محمد عبد الحكيم بدوي

سليم تصحيح وقرر الكيمياء الحكومية
لطلاب السنة الثامنة الدورة الإضافية 2015

السؤال الأول:

- ١- العبارات ① + ⑤ + ⑥ صحيحة
- ٢- العبارات ② + ④ + ③ + ⑦ خاطئة
- ٣- لكل عبارة عدديتان لتحديد إشارة الصع والخطأ
- ٤- تصحيح العبارة الثامنة والسابعة درجة واحدة لكل تصحيح
- ٥- تصحيح العبارات ③ + ④ درجتان لكل تصحيح
- ٦- إذا صحى الطالب العبارة وكتب معلومات متناقضة
لا ينال علامة التصحيح المذكورة أعلاه

السؤال الثاني:

- ١- التابع : $\psi = \sin x$ هو تابع موجب يحقق شروط التابع
المعقول فيزيائياً. فهو وصف القيمة ومحدد القيمة
ومستقر

- ٢- التابع : $\psi = \exp(\alpha x)$ هو تابع خاص للمؤثر d/dx
لأن $d/dx \psi = \alpha \cdot \psi$

فهو يحقق شروط التابع الخاص

- ٣- لا يوجد جواب صحيح لأن جميع الاحتمالية غير موجبة
حي الهزاز التوافقي

4. - عندما $J = 3$ ، توارد السوية الطاقية $J = 2, J + 1 = 7$.
 5. - قيمة التعداد السوية الطاقية $(1, 2, 2)$ في مفردة الكمون تساوي
 3 لأن $(1, 2, 2)$ ، $(2, 1, 2)$ ، $(2, 2, 1)$.

السؤال الثالث :

① - قيمة الطاقة عندما $n = 4$

$$E = -\frac{1}{2} \left(\frac{Z}{n} \right)^2$$

$$\frac{Z}{H} = 1$$

$$n = 4$$

$$E = -\frac{1}{2} \left(\frac{1}{4} \right)^2 = -\frac{1}{32} \text{ au}$$

$$\textcircled{2} \text{ - قيمة التعداد } = h^2 = (4)^2 = 16$$

التعداد معروف حين يأتي عدد للمدارات القريبة التي تقابل قيمة واحدة للطاقة

$$\textcircled{3} \text{ - طول فتحة الغزير الزاوي } \sqrt{l(l+1)} \hbar$$

$$n = 4 \rightarrow L = 3, 2, 1, 0$$

$$\textcircled{4} \text{ - } 0, \sqrt{2}, \sqrt{6}, \sqrt{12}$$

نحلل على القيم أعلاه بتعويض قيم L في العلاقة

$$\sqrt{l(l+1)} \hbar$$

سلم تصحيح مقرر الكيمياء الكوانتية الدورة الإضافية للعام الدراسي 2014-2015

جواب السؤال الرابع: 20 درجات

يكتب المؤثر الهاملتوني والتابع الموجي على النحو الآتي:

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^3 \left(-\frac{1}{2} \nabla_i^2 - \frac{1}{r_i} \right) + \frac{1}{r_{12}} + \frac{2}{r_{13}}, \quad \psi = 1s(1)1s(2)2s(3)$$

1. تحسب طاقة الذرة التجريبية بالعلاقة الآتية:

$$E_{\text{exp}} = -(IE_1 + IE_2 + IE_3)$$

يتطلب تطبيق هذه العلاقة معرفة طاقة التآين الثالث الذي يمثل القيمة السالبة لطاقة الأيون Li^{2+} ، أي أن:

$$IE_3 = -\left[-\frac{1}{2} \left(\frac{Z}{n_3} \right)^2 \right] = -\left[-\frac{1}{2} \left(\frac{3}{1} \right)^2 \right] = 4.5 \text{ a.u.}$$

وبالتعويض في العلاقة السابقة نجد أن:

$$E_{\text{exp}} = -(0.198 + 2.778 + 4.500) = -7.476 \text{ a.u.}$$

2. (a) تحسب طاقة الذرة حسب تقريب الإلكترونات المستقلة بالعلاقة الآتية:

$$E_{\text{app}} = -\frac{1}{2} \left[2 \left(\frac{Z}{n_1} \right)^2 + \left(\frac{Z}{n_2} \right)^2 \right] = -\frac{9}{2} \left[2 \left(\frac{1}{1} \right)^2 + \left(\frac{1}{2} \right)^2 \right] = -10.125 \text{ a.u.}$$

ويبلغ الخطأ المئوي المطلق للقيمة:

$$\%E = \left| \frac{E_{\text{exp}} - E_{\text{cal}}}{E_{\text{exp}}} \right| 100\% = \left| \frac{-7.476 + 10.125}{-7.476} \right| 100\% = 35.43\%$$

(b) تحسب الطاقة حسب الشحنة النووية الفعالة على النحو الآتي:

$$\xi_{1s} = Z - \sigma = 3 - 0.30 = 2.70, \quad \xi_{1s} = Z - \sigma = 3 - 2 \times 0.85 = 1.30$$

$$E_{\text{app}} = -\frac{1}{2} \left[2 \left(\frac{\xi_{1s}}{n_1} \right)^2 + \left(\frac{\xi_{2s}}{n_2} \right)^2 \right] = -\frac{1}{2} \left[2 \left(\frac{2.7}{1} \right)^2 + \left(\frac{1.3}{2} \right)^2 \right] = -7.501 \text{ a.u.}$$

ويبلغ الخطأ المئوي المطلق للقيمة $\%E = 0.33\%$.

(c) تحسب الطاقة حسب مبدأ التغيير بحساب معامل التغيير وذلك باخذ المشتق الأول لعبارة الطاقة، ثم نعوض قيمته في العبارة نفسها للطاقة:

$$\frac{d\bar{E}}{d\xi} = \bar{E} = 2\xi - 2Z + \frac{5}{8} = 0 \Rightarrow \xi = Z - \frac{5}{16} = 3 - \frac{5}{16} = 2.6875 \text{ a.u.}$$

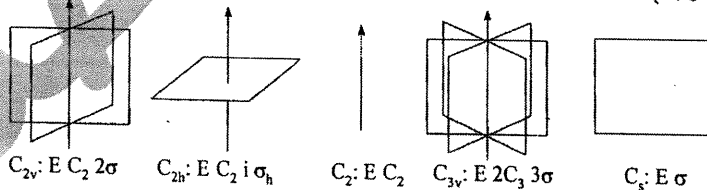
وبالتعويض في عبارة الطاقة المعطاة في نص المسألة نجد أن $\bar{E} = -7.0247 \text{ a.u.}$ و $\%E = 6.04\%$.

(d) تحسب الطاقة حسب طريقة الاضطراب بالعلاقة الآتية:

$$E = E_{\text{appr}} + E^{(1)} = E_{\text{appr}} + J_{1s1s} + 2J_{1s2s} = -10.125 + 1.875 + 1.259 = -6.990 \text{ a.u.}$$

والخطأ المطلق المئوي يساوي $\%E = 6.49\%$

السؤال الخامس: (5 درجة):



السؤال السادس: (26 درجة)

1. يمكن استنتاج عبارة الطاقة والمدارات الجزيئية باستخدام العلاقة الآتية:

$$\sum (H_{ij} - ES_{ij}) = 0$$

ولما كان التركيب الخطي لمدارين ذريين فإن:

$$\begin{vmatrix} H_{AA} - ES_{AA} & H_{AB} - ES_{AB} \\ H_{BA} - ES_{BA} & H_{BB} - ES_{BB} \end{vmatrix} = 0$$

وإن $S_{AB} = S_{BA}$ و $S_{AA} = S_{BB} = 1$ ، و $H_{AB} = H_{BA}$ ، وبذلك يصبح المعين السابق على النحو الآتي:

$$\begin{vmatrix} H_{AA} - E & H_{AB} - ES_{AB} \\ H_{AB} - ES_{AB} & H_{AA} - E \end{vmatrix} = 0$$

$$H_{AA} - E = \pm (H_{AB} - ES_{AB})$$

$$E_+ = \frac{H_{AA} + H_{AB}}{1 + S_{AB}}$$

$$E_- = \frac{H_{AA} - H_{AB}}{1 - S_{AB}}$$

$$\psi_+ = \frac{1}{\sqrt{2(1+S_{AB})}} (1S_A + 1S_B)$$

$$\psi_- = \frac{1}{\sqrt{2(1-S_{AB})}} (1S_A - 1S_B)$$

٥ المعادلة التجريدية

$$\begin{vmatrix} \alpha - E & \beta & \beta & \beta \\ \beta & \alpha - E & \beta & 0 \\ \beta & \beta & \alpha - E & 0 \\ \beta & 0 & 0 & \alpha - E \end{vmatrix} = 0$$

$$x = \frac{\alpha - E}{\beta} \quad \text{نقسم على } \beta \text{ ثم نفرض أن}$$

$$\begin{vmatrix} X & 1 & 1 & 1 \\ 1 & X & 1 & 0 \\ 1 & 1 & X & 0 \\ 1 & 0 & 0 & X \end{vmatrix} = 0$$

$$E = \alpha - X\beta$$

$$E_1 = \alpha + 2.17\beta$$

$$E_2 = \alpha + 0.311\beta$$

$$E_4 = \alpha - \beta$$

$$E_5 = \alpha - 1.481\beta$$

$$E_{Tot} = \sum_{i=1}^2 g E$$

$$= 2E_1 + 2E_2 = 2(\alpha + 2.17\beta) + 2(\alpha + 0.311\beta)$$

$$E_{Tot} = 4\alpha + 4.962\beta$$

$$E_L = n\alpha + 2n\beta$$

n عدد خلايا الحلقة

n عدد الروابط المضافة

$$E_L = 4\alpha + 4\beta$$

$$E_J = E_{TOT} - E_L = 0,962\beta$$

$$q_{ji} = \sum_{i=1}^2 g_{ji} C_{ji}^2$$

$$q_{11} = 2C_{11}^2 + 2C_{12}^2 = 2(0,6116)^2 + 2(0,253)^2 = 0,876$$

$$q_{12} = 2C_{21}^2 + 2C_{22}^2 = 2(0,522)^2 + 2(-0,368)^2 = 0,8176$$

$$q_{13} = 2C_{31}^2 + 2C_{32}^2 = 2(0,522)^2 + 2(-0,368)^2 = 0,817$$

$$q_{14} = 2C_{41}^2 + 2C_{42}^2 = 2(0,281)^2 + 2(0,815)^2 = 1,488$$

$$P_{ijk} = \sum_{i=1}^2 g_{ij} C_{ij} C_{ik}$$

$$P_{12} = 2C_{11}C_{21} + 2C_{12}C_{22}$$

$$P_{12} = 2(0,6116)(0,5227) + 2(-0,368)(-0,368)$$

$$= 0,452$$

$$P_{13} = 2(0,6116)(0,5227) + 2(-0,368)(0,368)$$

$$= 0,452$$

$$P_{14} = 2(0,6116)(0,2818) + 2(0,2536)(0,815)$$

$$= 0,758$$

$$P_{23} = 2(0,5227)(0,5227) + 2(-0,368)(-0,368)$$

$$= 0,8176$$

$$F_1 = \sqrt{3} - \sum P_i$$

$$F_1 = \sqrt{3} - (P_{12} + P_{13} + P_{14}) = 0,07$$

$$F_2 = \sqrt{3} - (P_{12} + P_{23}) = 0,463$$

$$F_3 = \sqrt{3} - (P_{13} + P_{23}) = 0,463$$

$$F_4 = \sqrt{3} - (P_{14}) = 0,98$$

Asy

الدرجة : 100
المدة : ساعتان

جامعة تشرين-كلية العلوم
قسم الكيمياء

امتحان مقرر الكيمياء الكمومية لطلاب السنة الثانية كيمياء للدورة الثانية 2015

السؤال الأول : (16 درجة)

(أ) أشر الى التوابع التي تحقق شروط التابع الموجي (اي التوابع المقبولة فيزيائيا) من التوابع الاتية. وإذا لم يكن محققاً , وضح السبب :

a) $\Psi_1 = x$, b) $\Psi_2 = x^2$, c) $\Psi_3 = \sin x$, d) $\Psi_4 = \exp(-x^2)$

ب) ما هي التوابع التي تمثل تابعا خاصا للمؤثر d/dx من التوابع الاتية وما هي القيمة الخاصة في حال الاجاب .

a) $\Psi_1 = x^2$, b) $\Psi_2 = \exp(x)$, c) $\Psi_3 = \sin(ax)$, $\Psi_4 = \cos(4x) + i\sin(4x)$

السؤال الثاني : (20 درجة)

ليكن لدينا جسيم حر كتلته m يتحرك داخل صندوق مكعب الشكل طول حرفه L و المطلوب:

(1) ماهي العبارة الأساسية لمستويات الطاقة المسموح بها لهذا الجسيم.

(2) ماهي طاقة نقطة الصفر لهذا الجسيم .

(3) ماهي قيمة الطاقة عندما $n_x=1$, $n_y=1$, $n_z=2$.

(4) هل مستوى الطاقة المحسوب في الطلب السابق متعدد , و كم عدد التعدد , ثم وضح المعنى الفيزيائي لهذا التعدد.

(5) بفرض أن الجسيم السابق وُضع في صندوق متوازي مستطيلات أبعاد

$$L_x = L_y = L_z/2$$

كيف تصبح عبارة الطاقة الأساسية لمستويات الطاقة لهذا الجسيم في هذه الحالة , و كم قيمة

الطاقة بدلالة L_x في حالة $n_x=1$ و $n_y=2$ و $n_z=2$.

السؤال الثالث : (14 درجة)

ليكن لدينا العلاقة $E_n = (n+1/2)h\nu$ و المطلوب :

(1) ماذا تمثل العلاقة السابقة .

(2) ماهي طاقة الوضع الصفري .

(3) هل سويات الطاقة التي تعبر عنها العلاقة السابقة مكتمة , و هل هي متوالة .

(4) احسب قيمة الطاقة الكلية عند $n=2$, و ما هي الطاقة الكامنة المتوسطة و الطاقة الحركية المتوسطة .

$$h\nu = \frac{h^2}{2mL^2}$$

مع تمنياتي لكم بالنجاح

2015/7/14

د. سليمان محمد

يتبع في الصفحة الثانية

س

السؤال الرابع: (14 درجة): أجب عن الأسئلة الآتية:

يعطى التابع الموجي لذرة البور $C(Z=6)$ بالعلاقة $\psi = 1s^2 2s^2 2p_x^2$ ، المطلوب:

- اكتب معين سلايتير، ثم حدد طاقة هذه الذرة وفقاً للشحنة النووية الفعالة. لماذا يعد التابع الموجي المضاد للتناظر بالنسبة إلى استبدال الإحداثيات السببية والمدارية تابعاً حقيقياً للذرة؟
- اكتب المؤثر الهاملتوني الموافق لهذه الذرة، ثم جزء هذا الهاملتون وفقاً لطريقة الإلكترونات المستقلة، واحسب طاقتها وفقاً لهذه الطريقة. لماذا تكون هذه الطاقة أقل من القيمة الحقيقية؟
- كيف يصبح الهاملتون السابق والتابع الموجي إذا قمنا بنزع ثلاثة إلكترونات من الذرة بحيث يصبح تابعها الموجي على النحو $\psi_{C^{3+}(Z=6)} = 1s^2 2s^1$ ؟ ثم أثبت أن $E^{(1)} = W^{(1)} = J_{1s1s} + 2J_{1s2s}$ ، واحسب طاقة هذا

$$J_{1s2s} = \frac{17Z}{81} \text{ a.u.}, J_{1s1s} = \frac{5Z}{8} \text{ a.u.} \text{ علماً أن}$$

السؤال الخامس: (8 درجات)

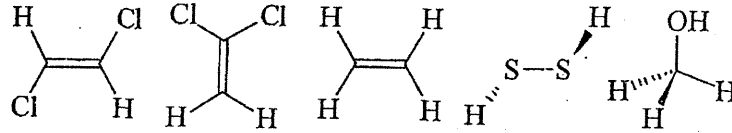
عند اختبار التابعين $\phi = \sqrt{\xi^2/\pi} \exp(-\xi r)$ و $\phi' = \sqrt{\xi^3/\pi} \exp(-\xi r)$ من أجل دراسة أيون الليثيوم

$Li^{2+}(Z=3)$ ، وجد أن $\bar{E} = \xi^2/2 - Z\xi$ و $\bar{E}' = \frac{1}{6}(\xi^2 - 3Z\xi)$ ، والمطلوب:

- احسب طاقة هذا الأيون من أجل كل تابع، أي $\bar{E}$ و $\bar{E}'$.
- احسب طاقة هذا الأيون الحقيقية E_{exp} ، ثم قارنها مع القيمتين المحسوبتين، وحدد الخطأ النسبي المطلق لكل قيمة محسوبة مبيناً التابع المقبول فيزيائياً.

السؤال السادس: (8 درجات)

حدد عناصر التناظر للجزيئات المبينة أدناه موضحاً بالرسم. ما الجزيئات المذكورة أدناه غير قديمة، ولماذا؟



السؤال السابع: (20 درجة)

- اكتب المؤثر الهاملتوني لجزيء شارة الهيدروجين H_2^+ ، مفسراً المعنى الفيزيائي لكل حد. كيف يصبح هذا الهاملتون وفقاً لتقريب بورن - أوبنهايمر مبيناً نص هذا التقريب، ثم احسب طاقة المدار الرابط والمدار المضاد للرابط إذا علمت أن $S_{AB} = 0.586 \text{ a.u.}$, $H_{AB} = -0.699 \text{ a.u.}$, $H_{AA} = -0.972 \text{ a.u.}$. ما المعنى الفيزيائي للمدارين الرابط والمضاد للرابط؟
- اكتب المعادلة التجريدية للجزيء المبين في الجدول أدناه، ثم ارسم مخطط سويات الطاقة الإلكترونية π ، علماً أن

$$k_{CN} = 0.8 \text{ و } h_N = 1.5$$

	g_i	ψ_i	x_i	N1	C2	C3	C4	C5
1	2	1	-2.550	0.7494	0.3934	0.2538	0.2538	0.3934
2	2	2	-1.147	0.5029	-0.0888	-0.6047	-0.6047	-0.0888
3	1	3	-0.618	0.0000	-0.6015	-0.3718	0.3718	0.6015

اكتب فقط العلاقات الضرورية لتحديد كل من E_{tot} ، و E_d ، و q_j ، و P_{jk} ، و F_j ، ثم أكمل الجدول الآتي:

$E_{tot} = ?$		$E_d = ?$	
atoms	q	P_{ij}	F_i
N1	?	$P_{12} = ?$	?
C2	?	$P_{23} = ?$	?
C3	?	$P_{34} = ?$	?
C4	?	$P_{45} = ?$	?
C5	?	$P_{51} = ?$	?

اشرح فقط ما الغاية من تحديد هذه المعاملات.

نتمنى لكم التوفيق والنجاح

2015/07/14

مدرس المقرر

د. محمد عبد الحكيم بدوي

يُبع الجواب الثاني

بما أن $L_y = L_x$ و $L_z = 2L_x$ نصوص في عبارة الطاقة الانكليزية فنصبح الطاقة

$$E_n = \left(\frac{1}{L_x^2} + \frac{4}{L_x^2} + \frac{4}{4L_x^2} \right) \frac{h^2}{8m}$$

نخرج L_x^2 خارج القوس فيصبح عبارة الطاقة الانكليزية في شكلها الأخير

$$E_{1,2,2} = \left(\frac{1}{1} + \frac{4}{1} + \frac{4}{4} \right) \frac{h^2}{8m L_x^2} = \frac{6h^2}{8m L_x^2} = \frac{3h^2}{48L_x^2}$$

3 درجات

المجموع 20 درجة

الجواب الثالث:

① - الصلابة السابقة تحت مستويات الطاقة للهرز التوافقي الكمي.

درجتان

② - طاقة الوضع الصفري هي عندما $n=0$ نعلم:

$$E_n = \left(0 + \frac{1}{2} \right) h \nu = \frac{1}{2} h \nu$$

3 درجات

③ - هي طاقة كمية لأنها تتغير بتغير العدد n الذي يأخذ قيم طبيعية

لكن مستويات الطاقة غير متوالية، لأنه لا يوجد إلا ثمانية موجات وحدة

يقابل قيمة الطاقة للعدد n .

3 درجات

④ - عندما $n=2$ نجمع الطاقة الكلية هي:

$$E_2 = \left(2 + \frac{1}{2} \right) h \nu = \frac{5}{2} h \nu$$

درجتان

وبما أن الالامنة الكلية تساوي مجموع الطاقين الرئيسية واللامنة

وهما متصفيتان بالسنة للطاقة الكلية.

اذك!

$$\bar{T} = \bar{V} = \frac{5}{4} h \nu$$

4 درجات

أو إذا كتب الطالب:

$$\bar{T} = \frac{E_2}{2} = \frac{5}{4} h \nu$$

② درجة

$$\bar{V} = \frac{E_2}{2} = \frac{5}{4} h \nu$$

2 درجة

14 أربع درجات

السؤال الرابع: (أكمل)

أ) يكتب معين سلاسل لذرة الكربون على النحو التالي

	$1s(1)$	$1s(2)$	$1s(3)$	$1s(4)$	$1s(5)$	$1s(6)$
	$1s(1)$	$1s(2)$	$1s(3)$	$1s(4)$	$1s(5)$	$1s(6)$
	$2s(1)$	$2s(2)$	$2s(3)$	$2s(4)$	$2s(5)$	$2s(6)$
$\psi = \frac{1}{\sqrt{61}}$	$2s(1)$	$2s(2)$	$2s(3)$	$2s(4)$	$2s(5)$	$2s(6)$
	$2p_x(1)$	$2p_x(2)$	$2p_x(3)$	$2p_x(4)$	$2p_x(5)$	$2p_x(6)$
	$2p_y(1)$	$2p_y(2)$	$2p_y(3)$	$2p_y(4)$	$2p_y(5)$	$2p_y(6)$

فسيتم الشحنة الذرية الفعالة لكل مدار (أد مسوية طاقة)

$$E_{1s} = Z - 6 = 6 - 0.35 = 5.65 \text{ au}$$

$$E_{2s, 2p} = Z - 6 = 6 - (3 \times 0.35) + (2 \times 0.85) = 3.25 \text{ au}$$

$$E = 2E_1 + 4E_2$$

$$E_1 = -\frac{1}{2} \left(\frac{6}{1} \right)^2 = -18 \text{ au}, \quad E_2 = -\frac{1}{2} \left(\frac{6}{2} \right)^2 = -4.5 \text{ au}$$

يعبر تماماً حقيقة وذلك لأن مربع هذا التابع يعطي توزيع الكثافة الاحتمالية حول النواة بصورة أساسية ومعتدلة مع التوزيع المكنة

ب) يكتب المؤثر الإحداثي على النحو التالي

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^6 \frac{1}{2} v_i^2 - \sum_{i=1}^6 \frac{Z}{r_i} + \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=n+1}^n \frac{1}{r_{ij}}$$

ثم نرى هذا المؤثر والذي يصعب بالشكل

ملتبنة الوط

$$\hat{H}_{app} = \hat{H}_{(1)} + \hat{H}_{(2)} + \hat{H}_{(3)} + \hat{H}_{(4)} + \hat{H}_{(5)} + \hat{H}_{(6)} + \hat{H}'$$

يرحل $\hat{H}'$ الذي يمثل قوى التفاعل في مبدأ تقريب الاضطراب

المتقلة فيصبح الراملتون على شكل التالي

$$\hat{H}_{app} = \hat{H}_{(1)} + \hat{H}_{(2)} + \hat{H}_{(3)} + \hat{H}_{(4)} + \hat{H}_{(5)} + \hat{H}_{(6)}$$

ويكون حساب قيمة الطاقة لهذا الذرة وفقاً لهذا المبدأ

انهم يطلب الاستنتاج مما يلي

$$E_{tot} = E_{(1)} + E_{(2)} + E_{(3)} + E_{(4)} + E_{(5)} + E_{(6)}$$

$$= -\frac{1}{2} \frac{Z^2}{n^2} - \frac{1}{2} \frac{Z^2}{n^2} - \frac{1}{2} \frac{Z^2}{n^2} - \frac{1}{2} \frac{Z^2}{n^2} - \frac{1}{2} \frac{Z^2}{n^2} - \frac{1}{2} \frac{Z^2}{n^2}$$

$$= -\frac{1}{2} \frac{Z^2}{n^2} - \frac{1}{2} \frac{Z^2}{n^2} - \frac{1}{2} \frac{Z^2}{n^2} - \frac{1}{2} \frac{Z^2}{n^2} - \frac{1}{2} \frac{Z^2}{n^2} - \frac{1}{2} \frac{Z^2}{n^2}$$

$$E = -54 \text{ au} \quad Z = 6 \text{ ومنه يكون}$$

وتكون قيمة هذه الطاقة أقل لأننا أهملنا قوى التفاعل وبذلك

في قيمة موجبة لذلك تكون الطاقة المحسوبة بهذه الطريقة أقل

من القيمة الحقيقية

عندما نقوم بنزع ثلاثة إلكترونات تصبح الذرة شحنة ذرية

$$\hat{H}_{app} = -\frac{1}{2} \nabla_1^2 - \frac{1}{2} \nabla_2^2 - \frac{1}{2} \nabla_3^2 - \frac{6}{r_1} - \frac{6}{r_1} - \frac{6}{r_1} + \frac{1}{r_{12}} + \frac{2}{r_{13}}$$

$$\hat{H}_{app} = -\frac{1}{2} \nabla_1^2 - \frac{1}{2} \nabla_2^2 - \frac{1}{2} \nabla_3^2 - \frac{6}{r_1} - \frac{6}{r_1} - \frac{6}{r_1} + \frac{1}{r_{12}} + \frac{2}{r_{13}}$$

$$\hat{H}_{app} = \sum_{i=1}^3 -\frac{1}{2} \nabla_i^2 - \sum_{i=1}^3 \frac{Z}{r_i} + \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{d=i+1}^n \frac{1}{r_{id}}$$

$$\hat{H}_{app} = \sum_{i=1}^3 -\frac{1}{2} \nabla_i^2 - \sum_{i=1}^3 \frac{Z}{r_i} + \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{d=i+1}^n \frac{1}{r_{id}}$$

$$\hat{H}_{app} = \sum_{i=1}^3 -\frac{1}{2} \nabla_i^2 - \sum_{i=1}^3 \frac{Z}{r_i} + \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{d=i+1}^n \frac{1}{r_{id}}$$

$$\Rightarrow \hat{H}_{app} = \hat{H}_{(1)} + \hat{H}_{(3)} + \hat{H}_{(3)} + \hat{H}'$$

$$\Rightarrow \hat{H}_{app} = \hat{H}_{(1)} + \hat{H}_{(3)} + \hat{H}_{(3)} + \hat{H}'$$

$$\Rightarrow \hat{H}_{app} = \hat{H}_{(1)} + \hat{H}_{(3)} + \hat{H}_{(3)} + \hat{H}'$$

$$\Rightarrow \hat{H}_{app} = \hat{H}_{(1)} + \hat{H}_{(3)} + \hat{H}_{(3)} + \hat{H}'$$

$$\Rightarrow \hat{H}_{app} = \hat{H}_{(1)} + \hat{H}_{(3)} + \hat{H}_{(3)} + \hat{H}'$$

ويصبح التابع الموجي في هذه الحالة على الشكل التالي

$$\psi = 1s(1) 1s(2) 2s(3)$$

وتحسب الطاقة وفق الاضطراب كما يلي

$$E_{tot} = E^0 + W'$$

$$E^0 = E_1 + E_2 + E_3 = \frac{1}{2} \frac{Z^2}{n^2} + \frac{1}{2} \frac{Z^2}{n^2} + \frac{1}{2} \frac{Z^2}{n^2} = 40.5 \text{ au}$$

المقصود بـ n^2 أو h^2 في القيمة التي نعوض بها عن n

$$W^{(1)} = \langle \psi | \hat{H}' | \psi \rangle$$

$$= \langle 1s(1) 1s(2) 2s(3) | \frac{1}{r_2} + \frac{2}{r_3} | 1s(1) 1s(2) 2s(3) \rangle$$

$$= \langle 1s(1) 1s(2) | \frac{1}{r_2} | 1s(1) 1s(2) \rangle + 2 \langle 1s(1) 2s(3) | \frac{1}{r_3} | 1s(1) 2s(3) \rangle$$

$$= J_{1s,1s} + 2J_{1s,2s}$$

نعوض كلاً من $J_{1s,1s}$ و $J_{1s,2s}$ بقيم فيكون

$$W^{(1)} = \frac{5Z}{8} + 2 \times \frac{17Z}{81} = 6.27 \text{ au}$$

$$\Rightarrow E_{tot} = -40.5 + 6.27 = -34.23 \text{ au}$$

* السؤال الخامس: كل:

a] حساب قيمة الطاقة لكل من التابيعين السابقين نعوض قيمة Z

في العلاقة ثم نتخذ العلاقة بالنسبة لمعامل القيد ونجعل

قيمة المشتق مساوي للصفر ثم نوجد قيمة معامل القيد أي أن

ملتبدة الوطد

$$\frac{dE}{d\epsilon} = 0$$

بالنسبة للعلاقة الأولى

$$E = \frac{1}{2} \epsilon^2 - 3\epsilon$$

$$\frac{dE}{d\epsilon} = 0 \Rightarrow \epsilon - 3 = 0 \Rightarrow \epsilon = 3$$

نعوض قيمة معامل القس في علاقة الطاقة لنحصل على

$$\text{قيمة الطاقة الوسطية } \bar{E} = \frac{1}{2} (3)^2 - 3(3) = -4.5 \text{ au}$$

وبالنسبة لعلاقة الطاقة الثانية

$$E' = \frac{1}{6} (\epsilon^2 - 9\epsilon)$$

$$\frac{dE'}{d\epsilon} = 0 \Rightarrow \frac{1}{6} (2\epsilon - 9) = 0 \Rightarrow \epsilon = 4.5$$

نعوض ϵ في E' فيكون

$$E' = \frac{1}{6} \left(\left(\frac{9}{2} \right)^2 - 9 \left(\frac{9}{2} \right) \right) = -3.38 \text{ au}$$

(ب) حسب قيمة الطاقة لهذا الأيون الكا على الكترون واحد

بعد شحته بالبروتونين

$$E_{\text{exp}} = -\frac{1}{2} \frac{Z^2}{n^2} = -\frac{1}{2} \frac{(3)^2}{2^2} = -4.5 \text{ au}$$

ولمجانته القيمتان المحسوباتان تحققان الشرط $E > E^0$

فإن التابعين وقبولين فيزيائياً ولكن إن التابع الأول أفضل بسبب تطابق القيمتين المحسوبتين من الحقيقة والوسيلة

حسب الخطأ المئوي من القانون

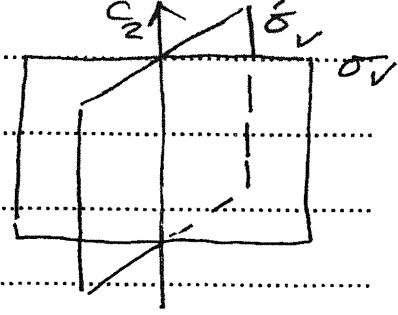
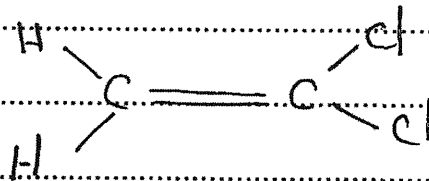
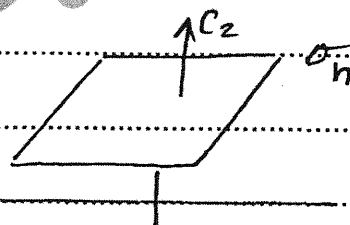
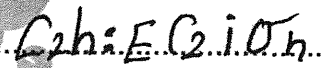
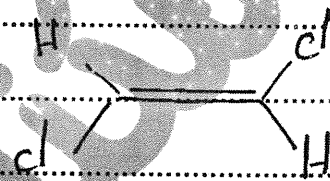
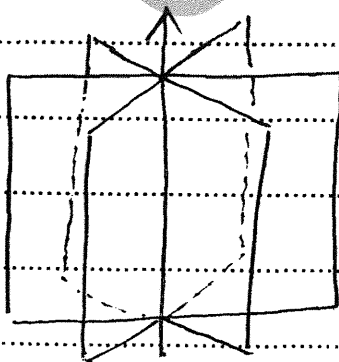
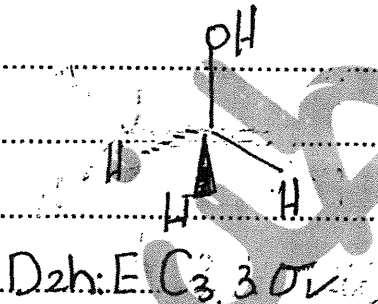
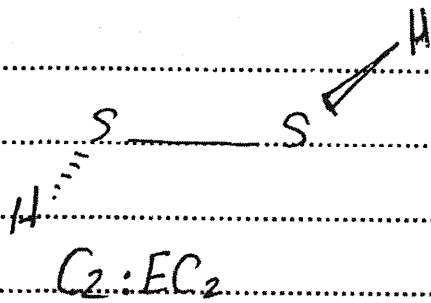
$$\frac{E_{\text{exp}} - E_{\text{cal}}}{E_{\text{exp}}} \times 100$$

مكتبة الوطن

مدخل سيرو - مقابل باب السلك الجامعي

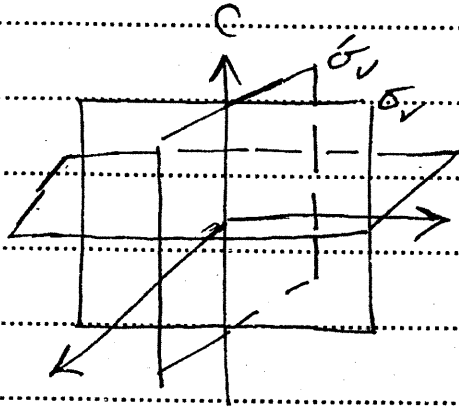
* السؤال السادس:

اكتب



ملئبة الوطه

مدخل سيبرو - مقابل باب السكك الجامعي



D2h: E3C2iO_h2C_v

* السؤال السابع

(1) يعطى الرتلون الموافقة كزى فتعد النوى بالملاقة التالية

$$\hat{H}(r_A, r_B, r) = \frac{1}{2} \left[v^2 + \frac{v_A^2}{1836} + \frac{v_B^2}{1836} \right] - \frac{1}{r_A} - \frac{1}{r_B} + \frac{1}{R}$$

اذ يمثل اى الاول بين قوسين متوسط مؤثر الطاقة الحركية للإلكترون والنواتين في حين يمثل اى الثاني والثالث مؤثر الطاقة الكامنة بين الإلكترونين والنواتين واى الرابع مؤثر الطاقة الكامنة بين النواتين واى الخامس الطاقة الكامنة بين الإلكترونات. بهذه التقديرات يورن أوفرر يعرف أنه بإمكانه النوى أثقل بكثير من الإلكترونات أي ارتباطاً بكثير من سرعة الإلكترونات فيكون دراسة حركة الإلكترونات وحركة النوى بصورة مستقلة وبذلك يصبح هذا الرتلون على الفوا كزى:

$$\hat{H} = \frac{1}{2} v^2 - \frac{1}{r_A} - \frac{1}{r_B} + \frac{1}{R}$$

تكتب العلاقة المطاراة كزى نسبة الدابطة وغير الدابطة على النحو

التالى

$$E = \frac{H_{AA} + H_{AB}}{1 \pm S_{AB}}$$

$$E_+ = 1,054 \text{ au} \text{ و } E_- = -0,661 \text{ au}$$

نلاحظ أن $E_- > E_+$ أي طاقة المدار الرباعي أكبر من طاقة

المدار المصنوع للرباعي

إنه المبدأ الفيزيائي للمدار الرباعي هو أن الكثافة الإلكترونية

تكون موزعة حول النواتين بصورة متساوية مما يعني أن

الانقلابات يقال عنها أن النواتين متقربتين أو مرتبطتين لذلك

يقال عن المدار إنه رابط فحين تكون الكثافة الإلكترونية بالنسبة

للمدار المصنوع للرباعي موزعة على كل ذرة وحيدة مستقلة لذلك يقال

عن المدار أنه مصنوع للرباعي

3) تكتب المعادلات التجريبية للجزء المظن على النحو التالي

$$\begin{vmatrix} x+1,5 & 0,8 & 0 & 0 & 0,8 \\ 0,8 & x & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & x & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & x & 1 \\ 0,8 & 0 & 0 & 1 & x \end{vmatrix} = 0$$

ويكون التوزيع الإلكتروني له على شكل

حسب الطاقة الكلية من القانون 3

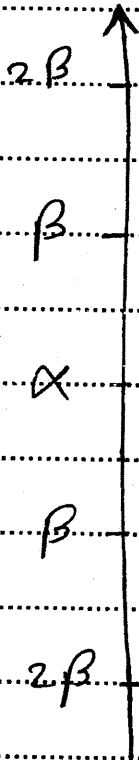
$$E_+ = \sum_{i=1}^5 g_i E_i = 2E_1 + 2E_2 + E_3$$

$$\Rightarrow$$

$$E_+ = 2(x + 2,55\beta) + 2(x + 1,147\beta)$$

$$+ x + 0,618\beta = 5x + 8,012\beta$$

الكل



$$\uparrow E_3 = \alpha + 0,618\beta$$

$$\downarrow \uparrow E_2 = \alpha + 1,147\beta$$

$$\downarrow \uparrow E_1 = \alpha + 2,55\beta$$

أما طاقة الثبات إلا أنها قدرة من العلاقة

$$E_d = E_t - E_l$$

حيث أن E_e حسب من العلاقة

$$E_l = n\alpha + 2n'\beta$$

عدد الجوانب المتفاعلة $\rightarrow$ عدد الجزيئات

$$\Rightarrow E_l = (5)\alpha + 2(2)\beta = 5\alpha + 4\beta$$

$$\Rightarrow E_d = 5\alpha + 8,012\beta - 5\alpha - 4\beta = 4,012\beta$$

والآن نقوم بحساب التكلفة الاقتصادية المتوسطة على كل ذرة

والتي هي q حيث q بالنسبة لكل ذرة على الجزيء

في البداية نكتب القانون كما هو بهذا الشكل

$$q_j = \sum_{i=1}^3 q_i c_i^2; d = 2c_1^2 + 2c_2^2 + c_3^2$$

تكلفة الوحدة

$E_{tot} = 5\alpha + 8,012\beta$		$E_d = 4,012\beta$	
atoms	q	P_{ij}	F_j
N	1,629	$p_{12} = 0,5$	0,731
C2	0,687	$p_{23} = 0,531$	0,701
C3	0,948	$p_{34} = 0,722$	0,479
C4	0,498	$p_{45} = 0,531$	0,479
C5	0,687	$p_{51} = 0,50$	0,701

إنه المضاف من تحديد هذه المعاملات معرفة الشحنة المستقرة على
كل ذرة وبذلك تحديد المراكز الفاعلة كيميائياً هذا من ناحية
ومن ناحية أخرى يمكننا من مراقبة الروابط تحديد أطوال الروابط
ومعيارين