كلية العلوم

القسم : الكيمياء

السنة : الثانية

اسئلة دوراات محلولة

كيمياء كمومية

A 2 Z LIBRARY

Facebook Group : A to Z مكتبة

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

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

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

السؤال الأول :

٤٠ درجة

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

(1)	شرط تكون أمواج مستقرة في حبل مشدود بين نقطتين طوله L هو: حيث n عدد طبيعي.							
A	$\lambda=L/n$	B	$\lambda=L/2n$	C	$\lambda=L$	D	$\lambda=2L/n$	
(2)	علاقة دبرولي 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 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	$E_n = T+V/2$	
(6)	طاقة جسيم كتلته m يتحرك على محيط دائرة الكمون عليها يساوي الصفر هي:							
A	$E_4 =k^2\ \hbar^2\ /2I$	B	$E_3 =k^2\ \hbar^2\ /2m$	C	$E_2 =k^2\ \hbar^2\ /2r$	D	$E_1 =k\ \hbar\ /2r^2$	
(7)	ان 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	
(11)	تعدد السوية الطاقية (1,2,3)E لجسيم يتحرك في صندوق ثلاثي البعد بكمون يساوي الصفر داخل الصندوق والانهاية خارجه هو:							
A	٢	B	٣	C	٤	D	٦	
(12)	طاقة نقطة الصفر للهزاز التوافقي الكمومي تساوي :							
A	$E = 1/2h\nu$	B	$E = h\nu$	C	$E= 2\ h\nu$	D	$E =3/4\ h\nu$	
(13)	طاقة تأين الأيون Be^{3+} هي :							
A	8 a.u	B	4 a.u	C	2 a.u	D	1/8 a.u	
(14)	الطاقة اللازمة لانتقال الالكترون من السوية 1S الى السوية 2s في ذرة الهيدروجين هي :							
A	2 a .u	B	1/8 a.u	C	2/8 a.u	D	3/8 a.u	
(15)	المؤثر الهاملتون لذرة وحيدة الالكترون :							
A	$H =-1/2\ \nabla^2\ -1/r$	B	$H =-1/2\ \nabla^2\ -3/r$	C	$H =-1/2\ \nabla\ -2/r$	D	$H =-1/2\nabla\ -4/r$	
(16)	القيم الخاصة للطاقة في الوحدات الذرية للذرات الشبيهة بالهيدروجين :							
A	$E_n=- Z^2/4n^2$	B	$E_n=- Z^2/n^2$	C	$E_n=- Z^2/2n^2$	D	$E_n=- Z^2/2n^4$	
(17)	قيمة $\hbar$ تساوي :							
A	$\hbar = h/2\pi$	B	$\hbar= h^2/4\pi$	C	$\hbar= h^2/4\pi$	D	$\hbar= h/4\pi$	
(18)	يكون البعد بين سويات الطاقة متساوي في :							
A	سويات الطاقة لجسيم في صندوق احادي البعد	B	سويات الطاقة لجسيم في صندوق ثلاثي البعد	C	سويات الطاقة لجسيم يتحرك على سطح دائرة	D	سويات الطاقة للهزاز التوافقي	
(19)	ماعدد العقد السطحية والقطرية التي يمتلكه المدار 4d							
A	٣سطحية و٢قطري	B	٢سطحية و٢ قطرية	C	٣سطحية وصفر	D	٢سطحية و٣قطرية	

A+

		قطرية					
(20) ان القيمة العظمى للمركبة Z للعزم المداري الزاويمن أجل ذرة الهيدروجين في الحالة n=4 تساوي :							
A	2 ħ	B	3 ħ	C	√12ħ	D	√6ħ

السؤال الثاني : **لكل مسألة : 20 درجة**

حل المسائل الثلاثة الاتية :

- **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 الكلية ،والطاقة الكامنة المتوسطة ، والطاقة الحركية المتوسطة من أجل الهزاز التوافقي عند المستوى n = 3 .
- 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

ـ انتهت الأسئلة ـ

مع تمنياتي لكم بالتوفيق والنجاح

الخميس 21/8 2025

مدرس المقرر

د. سليمان يوسف محمد

A to Z

جامعة طرطوس كلية العلوم قسم الكيمياء	سلم تصحيح امتحان مقرر الكيمياء الكمومية لطلاب السنة الثانية -الفصل الدراسي الثاني 2024 -2025 تمهل في إجابتك ولا تتسرع، نحن معك فثق بنفسك	الطالب: الرقم الجامعي: المدة: ساعتان العلامة: 100 درجة

السؤال الأول :

٤٠ درجة

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

(1)	شرط تكون أمواج مستقرة في حبل مشدود بين نقطتين طوله L هو: حيث n عدد طبيعي.						
A	ƛ=L/n	B	ƛ=L/2n	C	ƛ=L	D	**ƛ=2L/n**
(2)	علاقة دبرولي لطول موجة الالكترون هي:						
A	ƛ=1/2hC	B	ƛ=2hC	C	ƛ=h/P²	D	**ƛ=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 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	$E_n = T+V/2$
(6)	طاقة جسيم كتلته m يتحرك على محيط دائرة الكمون عليها يساوي الصفر هي:						
A	**$E_4 = k^2\hbar^2/2I$**	B	$E_3 = k^2\hbar^2/2m$	C	$E_2 = k^2\hbar^2/2r$	D	$E_1 = k\hbar/2r^2$
(7)	ان 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
(11)	تعدد السوية الطاقية (1,2,3)E لجسيم يتحرك في صندوق ثلاثي البعد بكمون يساوي الصفر داخل الصندوق والانهاية خارجه هو:						
A	٢	B	٣	C	٤	D	٦
(12)	طاقة نقطة الصفر للهزاز التوافقي الكمومي تساوي :						
A	**$E = 1/2h\nu$**	B	$E = h\nu$	C	$E = 2h\nu$	D	$E = 3/4\ h\nu$
(13)	طاقة تأين الأيون Be^{3+} هي :						
A	**8 a.u**	B	4 a.u	C	2 a.u	D	1/8 a.u
(14)	الطاقة اللازمة لانتقال الالكترون من السوية 1S الى السوية 2s في ذرة الهيدروجين هي :						
A	2 a .u	B	1/8 a.u	C	2/8 a.u	D	**3/8 a.u**
(15)	المؤثر الهاملتون لذرة وحيدة الالكترون :						
A	**$H = -1/2\ \nabla^2 - 1/r$**	B	$H = -1/2\ \nabla^2 - 3/r$	C	$H = -1/2\ \nabla - 2/r$	D	$H = -1/2\nabla - 4/r$
(16)	القيم الخاصة للطاقة في الوحدات الذرية للذرات الشبيهة بالهيدروجين :						
A	$E_n = -Z^2/4n^2$	B	$E_n = -Z^2/n^2$	C	**$E_n = -Z^2/2n^2$**	D	$E_n = -Z^2/2n^4$
(17)	قيمة ħ تساوي :						
A	**$\hbar = h/2\pi$**	B	$\hbar = h^2/4\pi$	C	$\hbar = h^2/4\pi$	D	$\hbar = h/4\pi$
(18)	يكون البعد بين سويات الطاقة متساوي في :						
A	سويات الطاقة لجسيم في صندوق احادي البعد	B	سويات الطاقة لجسيم في صندوق ثلاثي البعد	C	سويات الطاقة لجسيم يتحرك على سطح دائرة	D	**سويات الطاقة للهزاز التوافقي**
(19)	ماعدد العقد السطحية والقطرية التي يمتلكه المدار 4d						
A	٢سطحية و٢قطري	B	**٢سطحية وا قطرية**	C	٣سطحية وصفر	D	٢سطحية و٣قطرية

		قطرية					
(20)	ان القيمة العظمى للمركبة Z للعزم المداري الزاويمن أجل ذرة الهيدروجين في الحالة n=4 تساوي :						
A	2 ħ	B	3 ħ	C	**√12ħ**	D	√6ħ

السؤال الثاني : **لكل مسألة : 20 درجة**

حل المسائل الثلاثة الاتية :

- **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 a.u ، 0.198 a.u

هل تفاجئك النتيجة، علل ذلك.

الحل :

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

$$= -10,125 \text{ a.u}$$

إن القيمة التجريبية يجب أن تساوي القيمة السالبة لمجموع طاقات التشرد الثلاثة ولكن نتائج القيمة الثالثة لطاقة التشرد والتي تحسب نظريا.

$$I_3 = -E_{Li^{3+}} = -\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{Z^2}{n_1^2}\right)\right] = \frac{1}{2}\left(\frac{3^2}{1}\right) = 4.500 \text{ a.u}$$

وهكذا

$$E_{exp} = -(IE_1 + IE_2 + IE_3) = -7.496 \text{ a.u}$$

واضح أن القيمة النظرية أصغر من القيمة التجريبية. وذلك بسبب احتمال صد والتدافع وهي طاقة موجبة.

- **المسألة الثانية:**

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

- $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^1$
- $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^1$

الحل : نستخدم العلاقة الأصلية لحساب الطاقة

$$E_n = -\frac{1}{2}\left(\frac{\varepsilon}{n}\right)^2 \text{ a.u} \quad \ldots (1)$$

ومن المعروف أن $\varepsilon = Z - \sigma$

- لنحدد طاقة التركيب الالكتروني للتوزيع الأول وبتطبيق قواعد سلاتير على هذا الترتيب نجد

$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^1$

$E_n = -597.058\ a.u$

أما في حالة الرئيب $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^1$

فتكون الطاقة بعد تطبيق قواعد سلاتر .

$E_n = -596.938\ a.u$

نلاحظ أن طاقة الوضع الأول أخفض من طاقة الوضع الثاني بنحو 0.12 a.u وعلى هذا الأساس حسبت جميع طاقات المدارات الذرية ورتبت بالرئيب المذكور، وهذا يعني أن الرئيب الأول هو المفضل لأنه أقل طاقة .

- **المسألة الثالثة:**

أجب عما يلي:

- ما الطاقة الكلية ، والطاقةالكامنة المتوسطة ، والطاقة الحركية المتوسطة من أجل الهزاز التوافقي عند المستوي $n = 3$.
- 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

الحل :

- الطاقة الكلية تساوي $E = (n+\frac{1}{2})h\nu$ ... (1)

$= (3+\frac{1}{2})h\nu = \frac{7}{2}h\nu$

- الطاقة الكامنة المتوسطة $= \bar{E}$ الكامنة $= \frac{7}{4}h\nu$

- الطاقة الحركية المتوسطة $= \bar{E}$ الحركية $= \frac{7}{4}h\nu$

- لحساب الطاقة في المستوي $n_1=1$ و $n_2=2$ عندما طول الصندوق $L =$

ولحساب ν من العلاقة $\Delta E = h\nu$ فنجد أن $\nu = \frac{3h^2}{8mL^2}$

ولحساب ν' التواتر في حالة طول الصندوق $= 2L$ فيكون

$\nu' = \frac{3h^2}{32mL^2}$

وبمقارنة نجد أن $\nu' = \frac{\nu}{4}$

ـانتهت الأسئلة-

مع تمنياتي لكم بالتوفيق والنجاح

الخميس 21/8 2025

مدرس المقرر

د. سليمان يوسف محمد

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

نموذج A

السؤال الأول: (40) درجة

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

1 شرط تكون أمواج مستقرة في حبل مشدود بين نقطتين طوله L هو: حيث n عدد طبيعي.

A $\lambda=L/n$ B $\lambda=L/2n$ C $\lambda=L$ D $\lambda=2L/n$

2 علاقة دبرولي 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 $\Psi_4= 1/2\ X$ 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 $\Psi_3= 5\ x^2$ C $\Psi_2= exp\ (x)$ 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 $E_n = T+V/2$

6 طاقة جسيم كتلته m يتحرك على محيط دائرة الكمون عليها يساوي الصفر هي:

A $E_4 =k^2\ \hbar^2\ /2I$ B $E_3 =k^2\ \hbar^2\ /2m$ C $E_2 =k^2\ \hbar^2\ /2r$ D $E_1 =k\ \hbar\ /2r^2$

7 ان توالد سوية الطاقة ذات العدد الكمومي (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 $2\ \hbar$ B $3\ \hbar$ C $\sqrt{12}\ \hbar$ D $\sqrt{6}\ \hbar$

9 تتمتع معادلة شرودنغر المستقلة عن الزمن لجسيم :

A بتابع خاص غير منظم B طاقة كامنة مستقلة عن الموضع C بطول موجة دي بروي مستقلة عن الموضع D بطاقة كلية مستقلة عن الموضع

10 يتمتع الهزاز التوافقي الكمومي :

A بالخاصةψ=0عند نقاط التقاطع التقليدية B بسويات طاقة متعددة مرتين C بسويات طاقة متناسبة مع مربع العدد الكمومي 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 طوله L =15 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 a.u B r=3 a.u C r=2/3 a.u D r= a.u

16 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

17 إن القيمة العظمى للمركبة Z للعزم الزاوي المداري من أجل ذرة الهيدروجين في الحالة n = 2 هي:

A $3\ \hbar$ B $2\ \hbar$ C $\sqrt{6}\ \hbar$ D $\sqrt{2}\ \hbar$

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 a.u B - 2 a,u C - 1/8 a.u D - 3/4 a.u

يتبع الصفحة الثانية

السؤال الثاني: للمسألة الأولى والثانية (10+10)درجة وللثالثة والرابعة (20+ 20) درجة

حل المسائل الأربعة الاتية

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

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

- مالقيمة الممكنة لطول متجهة العزم الزاوي لهذه الحالة .
- مالرمز 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 = ∞ خارجه .

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

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

- **المسألة الرابعة:**

ليكن لدينا ذرة البيريليوم (Z =4)Be ، 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 الالكترونات المستقلة .لماذا تكون قيمة هذه الطاقة المحسوبة وفقا لهذا التقريب أقل من القيمة الحقيقية .

ـ انتهت الأسئلة ـ

مع تمنياتي لكم بالنجاح والتوفيق

الاثنين : ٣/ ٢/٢٠٢٥

مدرس المقرر

د. سليمان يوسف محمد

A to Z

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

السؤال الأول: (40) درجة

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

1 عدد العقد السطحية الذي يتمتع بها المدار 4d .

A **2** B 4 C 3 D 1

2 عدد العقد القطرية للمدار 4d .

A **1** B 2 C 3 D 5

3 أحد الأطوال التالية ليس لطول موجة مستقرة في حبل مشدود بين نقطتين طوله L =15 CM .

A 30 B 15 C 10 D **25**

4 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**

5 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

6 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

7 إن القيمة العظمى للمركبة Z للعزم الزاوي المداري من أجل ذرة الهيدروجين في الحالة n = 2 هي:

A 3 ħ B 2 ħ C √6 ħ D **√ 2 ħ**

8 عدد العقد الكلية للفلك 3d في ذرة الهيدروجين هي :

A 3 B 1 C **2** D 5

9 تعدد مستوي الطاقة n =2 في ذرة الهيدروجين هو:

A 3 B 1 C 2 D **4**

10 طاقة ذرة الهيدروجين في الوضع 2S هو :

A - 1/2 a.u B - 2 a.u C **- 1/8 a.u** D - 3/4 a.u

11 شرط تكون أمواج مستقرة في حبل مشدود بين نقطتين طوله L هو: حيث n عدد طبيعي.

A λ=L/n B λ=L/2n C λ=L D **λ=2L/n**

12 علاقة دبرولي لطول موجة الالكترون هي:

A λ=1/2hC B λ=2hC C $\lambda=h/P^2$ D **λ=h/P**

13 أحد هذه التوابع هو تابع موجي مقبول فيزيائيا هو:

A $\Psi_4= 1/2\ X$ B $\Psi_3= 5x^2$ C $\Psi_2= Exp(-3x)$ D **$\Psi_1= Exp(-x^2)$**

14 أحد هذه التوابع هو تابع خاص للمؤثر d/dx:

A $\Psi_4= Cos\ x$ B $\Psi_3= 5\ x^2$ C **$\Psi_2= exp\ (x)$** D $\Psi_1= ln\ 1/x$

15 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/2

16 طاقة جسيم كتلته m يتحرك على محيط دائرة الكمون عليها يساوي الصفر هي:

A **$E_4 = k^2\ ħ^2\ /2I$** B $E_3 = k^2\ ħ^2\ /2m$ C $E_2 = k^2\ ħ^2\ /2r$ D $E_1 = k\ ħ\ /2r^2$

17 ان توالد سوية الطاقة ذات العدد الكمومي (j=5) لجسيم متحرك على سطح كروي يساوي:

A 12 B 13 C **11** D 42

18 إن القيمة العظمى للمركبة Z للعزم المداري الزاوي من أجل ذرة الهيدروجين في الحالة n=4 تساوي :

A 2 ħ B 3 ħ C **√1 2 ħ** D √6 ħ

19 تتمتع معادلة شرودنغر المستقلة عن الزمن لجسيم :

A بتابع خاص غير منظم B بطاقة كامنة مستقلة عن الموضع C بطول موجة دي بروي مستقلة عن الموضع **D بطاقة كلية مستقلة عن الموضع**

20 يتمتع الهزاز التوافقي الكمومي :

A بالخاصة0=ψعند نقاط التقاطع التقليدية B بسويات طاقة متعددة مرتين C بسويات طاقة متناسبة مع مربع العدد الكمومي **D بسويات طاقة متساوية البعد بين بعضها**

السؤال الثاني: للمسألة الأولى والثانية (10+10)درجة وللثالثة والرابعة (20+ 20) درجة

حل المسائل الأربعة الاتية

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

15 درجات

ج - جميع الالكترونات قبل $3d^6$ متزاوجة بالسبين في مداراتها ولا تشارك في القيمة العظمى M_s ، وفي $3d^6$ يوجد أربع الكترونات فردية

ج - وتكون سبينات الالكترونات الأربعة نصفا . وتكون القيمة العظمى لـ M_s هي : $M_s = \frac{1}{2} \times 4 = 2$ و $2S+1 = 5$ والتوالد المغناطيسي

إذا كتب الطالب التوالد المغناطيسي دون حساب يأخذ خمس درجات

- **المسألة الثانية:**

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

- مالقيمة الممكنة لطول متجهة العزم الزاوي لهذه الحالة .
- مالرمز الذي يصف الحالة الموافقة بالجواب السابق .

15 درجات

ج - القيمة الممكنة لطول متجهة العزم الزاوي لهذه الحالة هو

$\sqrt{6}\ a.u$ أو $\sqrt{6}\ \hbar$

ج - ورمز الحالة $\rightarrow$ $d-2$

- **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 لهذة الجملة

b) احسب طاقات ودرجة توالد أحفض أربع سويات طاقة لهذه الجملة .

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

الجواب :

- a - $E_{x,y} = n^2_x\ h^2/8mL_x^2 + n^2_y\ h^2/8mL^2_y$
- وبما أن $L_y = L_x/2$ نعوض $L_x = 2\ L_y$
- فنحصل على $E_{x,y} = h^2/8m\ (\ n^2_x/L^2_x + 4n^2_y/L^2_x\ )$ خمس درجات

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

A to Z

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

- المسألة الرابعة:

ليكن لدينا ذرة البيريليوم (Be(Z =4 ، 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 الالكترونات المستقلة .لماذا تكون قيمة هذه الطاقة المحسوبة وفقا لهذا التقريب أقل من القيمة الحقيقية .

١ درجة

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

٢ درجة

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{4!}}\begin{vmatrix} 1s_1 & 1s_2 & 1s_3 & 1s_4 \\ \overline{1s}_1 & \overline{1s}_2 & \overline{1s}_3 & \overline{1s}_4 \\ 2s_1 & 2s_2 & 2s_3 & 2s_4 \\ \overline{2s}_1 & \overline{2s}_2 & \overline{2s}_3 & \overline{2s}_4 \end{vmatrix}$$

٣ درجة . حسب طاقة الذرة وفق الشحنة النووية الفعالة . لذلك يجب حساب الشحنة النووية ξ_1 ، ξ_2 حتى طرفي قوانين الحساب وتكون الطاقة E تساوي

$$E = -\frac{1}{2}\,2\left(\frac{\xi_1}{n_1}\right)^2 + \frac{1}{2}\left[-2\left(\frac{\xi_2}{n_2^2}\right)\right] = \cdots (1)$$

$\Rightarrow E = -14.64$ a.u

٤ درجة . حسب الطاقة E_2 وفقاً للالكترون المستقل .

$$E_2 = -\frac{1}{2}\left[2\left(\frac{Z}{n_1}\right)^2 + 2\left(\frac{Z}{n_2}\right)^2\right]$$

ونحصل $E_2 = -20$ a.u

ـ انتهت الأسئلة ـ

مع تمنياتي لكم بالنجاح والتوفيق

الاثنين : ٣/ ٢/ ٢٠٢٥

مدرس المقرر

د. سليمان يوسف محمد

وذلك لأن الطاقة الحقيقية تتأثر بالشحنة النووية الفعالة وكذلك طاقة الذرة وفقاً للالكترون المستقل .

وأصغر من الطاقة التجريبية حيث احتمال طاقة التدافع بين الالكترونات موجبة .

A to Z

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

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 طوله L=15Cm .

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 هـ

A	2 ħ	B	3 ħ	C	√ 12 ħ	D	√ 6 ħ

(3) أحد هذه التوابع هو تابع موجي مقبول فيزيائيا 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	$\Psi_4 = \text{Sin } x$	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 الـ 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	$E_4 = k^2\hbar^2/2I$	B	$E_3 = k^2\hbar^2/2m$	C	$E_2 = k^2\hbar^2/2r$	D	$E_1 = k\hbar/2r^2$

(7) ان 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		B	2 a .u				
C	9/8 a.u	D					4/9 a.u 9/4 a.u

(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

(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 بواحدة الالكترون (فولط)

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

السؤال الثاني:

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

يتبع في الصفحة الثلثية ←

حل المسائل الثلاثة التالية :

- **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:**

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 $L_x = 2 L_y$ و V =0 داخل الصندوق و V = ∞ خارجه .

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

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

ـ انتهت الأسئلة -

مع تمنياتي لكم بالنجاح والتوفيق

الاثنين: ~~٢٠٢٤/٩/١٦~~

الأربعاء
٢٠٢٤/٩/١١

مدرس المقرر

د. سليمان يوسف محمد

A to Z

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

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 طوله L=15Cm .

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 ħ | B 3 ħ | C √ 12 ħ | D **√ 6 ħ**

(3) أحد هذه التوابع هو تابع موجي مقبول فيزيائيا 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 **$\Psi_4 = \text{Sin } x$** | 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 $E_n = T+V/2$

(6) طاقة جسيم كتلته m يتحرك على محيط دائرة الكمون عليها يساوي الصفر هي:

A **$E_4 = k^2\hbar^2/2I$** | B $E_3 = k^2\hbar^2/2m$ | C $E_2 = k^2\hbar^2/2r$ | D $E_1 = k\hbar/2r^2$

(7) ان 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 **9/8 a.u** | D 9/4 a.u

(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

(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 بواحدة الالكترون (فولط)

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

يتبع في الصفحة الخلفية ←

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

حل المسائل الثلاث الاتية

- **المسألة الأولى:**

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

نحسب الطاقة وفقاً للتوزيع الالكتروني نظرياً وفق نظرية التقريب المستقل .

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

$$= -\frac{1}{2}\left[2\left(\frac{3}{1}\right)^2 + \left(\frac{3}{2}\right)^2\right] = 10,125\ a.u$$

(10)

القيمة التجريبية يجب أن تساوي القيمة السالبة لمجموع طاقة التشرد الثلاثة وتكون ناتج إحدى القيمة الثالثة لطاقة التشرد التي تحسب نظرياً على النحو الآتي

$$IE_3 = -E_{Li^{2+}} = -\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{Z^2}{n_1^2}\right)\right] = \frac{1}{2}\left(\frac{3^2}{1}\right) = 4,5\ a.u$$

(10)

وهكذا نجد أن

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

واضح أن القيمة التقريبية يجب أن تكون أقل من التجريبية .

- **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

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

وعند

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

(5)

★ نحسب طاقة الصندوق وفق العلاقة $E = \frac{n^2h^2}{8mL^2}$ نحسب الفرق بين الطاقتين أي $\Delta E = E_2 - E_1$ وهو يساوي $\Delta E = \frac{4h^2}{8mL^2} - \frac{h^2}{8mL^2} = \frac{3h^2}{8mL^2}$ وهو يساوي $h\nu$.

إذاً $\nu = \frac{\Delta E}{h}$ وتساوي $\frac{3h}{8mL^2}$ وتقوم بتغيير الحالات مع تغيير طول الصندوق $2L = L'$ وبالحساب نجد أن $\nu' = \frac{\nu}{4}$

(15)

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

الجواب :

a - $E_{x,y} = n^2_x\ h^2/8mL_x^2 + n^2_y\ h^2/8mL^2_y$

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

فنحصل على $E_{x,y} = h^2/8m\ (\ n^2_x/L^2_x + 4n^2_y/L^2_x\ )$

١٥

عشر درجات

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

$E_{1,1} = h^2/8m\ (1/L^2_x + 4/L^2_x\ ) = 5h^2\ /8mL^2_x$

خمس درجات

C – طاقات أخفض أربع سويات لهذه الجملة .

عشردرجات

$E_{1,1} = 5h^2/8mL^2_x$, $E_{2,1} = 8h^2/8mL^2_x$, $E_{3,1} = 13h^2/8mL^2_x$, $E_{1,2} = 17h^2/8mL^2_x$

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

الأربعاء ١١/٩/٢٠٢٤

مدرس المقرر

د. سليمان يوسف محمد

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

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 طوله L=15Cm .						
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 ħ	B	3 ħ	C	√ 12 ħ	D	√ 6 ħ
(3)	أحد هذه التوابع هو تابع موجي مقبول فيزيائيا 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	$\Psi_4 = \text{Sin } x$	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	$E_n = T+V/2$
(6)	طاقة جسيم كتلته m يتحرك على محيط دائرة الكمون عليها يساوي الصفر هي:						
A	$E_4 = k^2 ħ^2 /2l$	B	$E_3 = k^2 ħ^2 /2m$	C	$E_2 = k^2 ħ^2 /2r$	D	$E_1 = k ħ /2r^2$
(7)	ان 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	9/8 a.u	D	9/4 a.u				
(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
(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 بواحدة الالكترون (فولط)						
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

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

حل المسائل الأربعة الاتية

- **المسألة الأولى:**

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

. $h = 6.62 \times 10^{-34} j.S^{-1}$

مكتبة A to Z

يتبع في الصفحة الخلفية ←

- **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 لهذة الجملة .
b) ما طاقة نقطة الصفر لهذه الجملة .
c) احسب طاقات ودرجة توالد أخفض أربع سويات طاقة لهذه الجملة .
d) لنفترض أن $V = 10j$. ماتأثير هذا في القيم الخاصة والتوابع الموجية .

- **المسألة الثالثة:**

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 .

- **المسألة الرابعة:**

ليكن لدينا ذرة الليتيوم ($Z = 3$) Li ، 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 .

ـــانتهت الأسئلة -

مع تمنياتي لكم بالنجاح والتوفيق

الأحد: ١٦/ ٧ / ٢٠٢٤

مدرس المقرر

د. سليمان يوسف محمد

مكتبة A to Z

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

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 طوله L=15Cm .

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 ħ B 3 ħ C √ 12 ħ D **√ 6 ħ**

(3) أحد هذه التوابع هو تابع موجي مقبول فيزيائيا 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 $E_n = T+V/2$

(6) طاقة جسيم كتلته m يتحرك على محيط دائرة الكمون عليها يساوي الصفر هي:

A **$E_4 = k^2\hbar^2/2I$** B $E_3 = k^2\hbar^2/2m$ C $E_2 = k^2\hbar^2/2r$ D $E_1 = k\hbar/2r^2$

(7) ان 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 **9/8 a.u** D 9/4 a.u

(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

(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 بواحدة الالكترون (فولط)

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 للغلك 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

A to Z مكتبة

يتبع في الصفحة الخلفية ←

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

حل المسائل الأربعة الاتية

- **المسألة الأولى:** ١٥ درجة

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

$h = 6.62 \times 10^{-34}\ j.S^{-1}$.

الجواب : $\lambda = 6.62\ 10^{-34}\ j.S^{-1} / 5.10^{-3}\ (K.g) \times 400\ m\ s^{-1}$

$= 3.3\ 1 \times 10^{-25}\ n\ m$

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

مكتبة A to Z

- **المسألة الثانية:** ٢٠ درجة

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

الجواب :

a - $E_{x,y} = n^2_x\ h^2/8mL_x^2 + n^2_y\ h^2/8mL^2_y$

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

فنحصل على $E_{x,y} = h^2/8m\ (\ n^2_x/L^2_x + 4n^2_y/L^2_x\ )$ خمس درجات

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

$E_{1,1} = h^2/8m\ (1/L^2_x + 4/L^2_x\ ) = 5h^2/8mL^2_x$ خمس درجات

C – طاقات أخفض أربع سويات لهذه الجملة . أربع درجات

$E_{1,1} = 5h^2/8mL^2_x$, $E_{2,1} = 8h^2/8mL^2_x$, $E_{3,1} = 13h^2/8mL^2_x$, $E_{1,2} = 17h^2/8mL^2_x$

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

ستة درجات

المسألة الثالثة: 15 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 :

خمس درجات

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

٢ درجات

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

٢ درجتان

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

درجتان

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

ثلاث درجات

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

- **المسألة الرابعة:** 20 درجة

ليكن لدينا ذرة الليتيوم (Z =3) Li ، 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 .

مكتبة A to Z

الأحد: ١٦/ ٧ / ٢٠٢٤

مدرس المقرر

د. سليمان يوسف محمد

جواب السؤال الثاني / المسألة الرابعة :

1 - يكتب المؤثر الهاملتوني لذرة الليثيوم ($Z=3$) على الشكل التالي : 5 علامات

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

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

2 - التابع الموجي الذي يحقق مبدأ الاستبعاد لباولي هو . يكتب بأحد الشكلين

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{3!}}\begin{vmatrix} 1s(1) & 1\bar{s}(1) & 2s(1) \\ 1s(2) & 1\bar{s}(2) & 2s(2) \\ 1s(3) & 1\bar{s}(3) & 2s(3) \end{vmatrix} \quad \text{أو} \quad \Psi = \frac{1}{\sqrt{3!}}\begin{vmatrix} 1s(1) & 1s(2) & 1s(3) \\ 1\bar{s}(1) & 1\bar{s}(2) & 1\bar{s}(3) \\ 2s(1) & 2\bar{s}(2) & 2s(3) \end{vmatrix}$$

5 علامات

3 - حساب طاقة الذرة وفقاً للنظرية الثورية الوحالة من العلاقة .

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

ونطلب لتطبيق هذه العلاقة معرفة قيمة كل من ξ_{1s} و ξ_{2s} من العلاقة :

$$\xi = Z - \sigma = Z - [(n-1)\times 0{,}35 + q_1 \times 0{,}85 + q_2 \times 1{,}0]$$

إذا اعتبرنا n عدد الالكترونات في الجمولة المدروسة و q_1 عدد الالكترونات المجاورة و q_2 عدد الالكترونات الأقرب إلى النواة وبالحساب

$$\xi_{1s} = Z - \sigma = 3 - (1\times 0{,}30) = \boxed{2{,}7}$$

$$\xi_{2s} = Z - \sigma = 3(0\times 0{,}35 + 2\times 0{,}85) = \boxed{1{,}3}$$

وبالتعويض نحصل على الأخير .

$$E = \frac{1}{2}\left[2\left(\frac{\xi_{1s}}{n_1}\right)^2 + \left(\frac{\xi_{2s}}{n_2}\right)^2\right] = \boxed{-7{,}5013 \ a.u}$$

5 علامات

4 - حساب الطاقة حسب الالكترونات المستقلة .

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

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

$$= \boxed{-10{,}12}$$

والطاقة المحسوبة وفقاً لهذا التقريب تكون أعلى من القيمة الحقيقية بسبب إهمال طاقة التداخل وهي قيمة موجبة . 5 علامات

جامعة طرطوس كلية العلوم قسم الكيمياء	امتحان مقرر الكيمياء الكمومية طلاب السنة الثانية -الفصل الدراسي الأول 2024-2023 تمهل في إجابتك ولا تتسرع، نحن معك فثق بنفسك	الطالب: الرقم الجامعي: المدة: ساعتان العلامة: ٧٠ درجة

السؤال الأول: (30) درجة

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

(1) شرط تكون أمواج مستقرة في حبل مشدود بين نقطتين طوله 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=4هي:

A $2\hbar$ B $3\hbar$ C $\sqrt{12}\hbar$ D $\sqrt{6}\hbar$

(3) أحد هذه التوابع هو تابع موجي مقبول فيزيائيا هو:

A $\Psi_4= x$ B $\Psi_3=5x^2$ C $\Psi_2= e^{xp}(-3x)$ 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 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 $E_n =(T+V)/2$

(6) يشير تابع التوزع القطري $4\pi r^2\Psi^2_{1s}$ من أجل الحالة 1s في ذرة الهيدروجين الى أن :

A $r_{mp}=0$ B $r_{mp}=r$ C $r_{mp} > r$ D $r_{mp} < r$

(7) ان توالد سوية الطاقة ذات العدد الكمومي (j=5) لجسيم متحرك على سطح كروي يساوي:

A 14 B 11 C 15 D 42

(8) إن الطاقة الالكترونية للشاردة Li^{2+} في الحالة 2S هي:

A - 8/9 a.u B - 9/18 a.u

C - 2 a.u D - 9/8 a.u

(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

(11) طاقةالوضع الصفري للهزاز التوافقي هي :

A $5\ h\upsilon$ B $3/2h\upsilon$ C $1/2h\upsilon$ D $h\upsilon$

(12) ماقيمة التوالد السبيني للحديد في الوضع الأساسي إذا كان التركيب الالكتروني 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 احادي التوالد

(13) إذا كان المقداريين a و bمترافقين فيزيائيا ،فإنه حسب مبدأ الارتياب لهايزنبرغ فإن :

A $\Delta a\ .\ \Delta b \geq \hbar$ B $\Delta a\ .\ \Delta b \geq 2\hbar$ C $\Delta a . \Delta b \geq \hbar/4\pi$ D $\Delta a\ .\ \Delta b \geq \hbar/2\pi$

(14) يحقق التابع الموجي Ψ شرط التابع القابل للتكامل تربيعيا إذا :

A إذا كان مستمرا 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 الازم ليثار الجسيم الحر في صندوق وحيد البعد طوله Lمن الحالة n =1 الى الحالة n = 2 هو υ فإن التواتر الازم للاثارة إذا كان طول الصندوق مضاعفا .

A $\upsilon/4$ B $\upsilon/2$ c 2υ d 4υ

A to Z مكتبة

يتبع في الصفحة الخلفية ←

السؤال الثاني: حل المسائل الآتية (25) درجة للمسألة الأولى (25) درجة للمسألة الثانية (١٥) درجة للمسألة الثالثة (١٥) درجة للمسألة الرابعة

حل المسائل الأربعة الآتية.

- **المسألة الأولى:**

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

1- ماهي عبارة الطاقة 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- ماالسرعة الالكترونية الموافقة تقليديا لهذه الطاقة (Z. P. E) ،قارنها مع سرعة الضوء . 6

- **المسألة الثانية:**

أجب 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 J الممكنة ، وما عدد الحالات الممكنة بين أطوال المتجهات J في الواحدة a.u وما رموز الحدود الموافقة .

- **المسألة الرابعة :**

ينطلق هزاز توافقي ذو كتلة 1.00g،وثابت قوة مساوية 2.0 J من السكون عند t=0 و x= 0.1 m .

والطلوب :

1- ماالتابع الموجي الذي يصف سلوك الهزاز .
2- ماالطاقة الكلية للهزاز .
3- مالطاقة الكامنة الوسطية .
4- ماالطاقة الحركية الوسطية .

الثوابت

$h = 6.626.10^{-34}$ j.s , $m_e = 9.11.10^{-31}$ K.g

انتهت الأسئلة

مع تمنياتي لكم بالنجاح والتوفيق

الأحد: ٢٠٢٤/٣/٣٥

مدرس المقرر

د. سليمان يوسف محمد

مكتبة A to Z

سلم تصحيح مقرر الكيمياء الكمومية س/ كيمياء

السؤال الأول: لكل اختيار صحيح درجتان.

1 ← D ($\lambda = 2L/n$)

2 ← C ($\sqrt{12}\ \hbar$)

3 ← D ($\psi_1 = exp(-x^2)$)

4 ← C ($\psi_2 = exp(x)$)

5 ← B ($E_n = n^2h^2/8ma^2$)

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 (خاصي التوالد)

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

14 ← C (دالة ψ^2 على جميع الفراغ لا يساوي الصفر ولا مالانهاية)

15 ← a ($\nu/4$)

السؤال الثاني: (6)

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

المسألة الأولى:

2- طاقة الوضع الصفري ($E_{Z.P.E}$)

$$E_{Z.P.E} = \frac{(1)^2(6.626\times10^{-34}\ J.s)^2}{8(9.11\times10^{-31}\ Kg)(258\cdot10^{-12}\ m)^2}$$

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

أما من أجل مول لهذه الجملة فتكون E تساوي (2)

$$E = (9.05\times10^{-19})(6.022\times10^{23}\ mol^{-1})(1\ Kg/10^3\ g) = 54.6\ Kj\ mol^{-1}$$

3- طول موجة دوبري تساوي $\lambda = \frac{h}{p}$ ونحسب قيمة p من العلاقة

$$E = \frac{p^2}{2m} \Rightarrow p = \sqrt{E2m} = \sqrt{164\times10^{-25}}$$ (6)

$$\Rightarrow \lambda = \frac{6.62\cdot10^{-34}}{\sqrt{164\times10^{-25}}} = 0.5169\cdot10^{-9}\ m$$

يتبع بالصفحة التالية ← -1-

مكتبة A to Z

تابع للسؤال الأول:

4- نمثل E الطاقة الحركية لذا V=0 في داخل الصندوق لذلك فإن

$$E = \frac{mV^2}{2} \Rightarrow V = \left[\frac{2E}{m}\right]^{\frac{1}{2}} = \left[\frac{2(9.05\times10^{-19}\ J)}{9.11\times10^{-31}\ Kg}\right]^{\frac{1}{2}} = 1.41\cdot10^{6}\ m\cdot s^{-1}$$

نؤدي مقارنة هذه السرعة مع سرعة الضوء إلى النتيجة

$$\frac{1.41\cdot10^{6}\ m\cdot s^{-1}}{2.998\cdot10^{8}\ m\cdot s^{-1}} = 0.0047$$

أي نحو 0.5% من سرعة الضوء.

السألة الثانية

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

$$E_{3S} = -\frac{1}{2}\frac{1}{9} = -\frac{1}{18}\ a.u$$

2- طاقة He^+ عند n=2 هو

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

3- درجة التعدد للسوية n=4 هو $G = n^2$

4- عدد العقد الزاوية الذي يملكه المدار 4dxz هو ℓ للمدار وهو يساوي 2

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

إذا عدد العقد الوطرية هو $n-1-\ell = 4-1-2 = 1$

5- الطاقة الكامنة هي $E = -\frac{1}{r}$ وهي تساوي $E = -\frac{1}{2}\ a.u$

السألة الثالثة

إذا كان n=3 و ℓ=2 إذا نوع الحالات (d) وهي من مدار 3d وسببنا:

والعدد الكلي هو 10 وما هي هذه الحالات

إن العزم المحلة المركبة Z للعزم الزاوي من أجل المدار السبيني

$\left(\frac{5}{2}\right)$ تساوي $\frac{1}{2}$ و $\frac{1}{2}$ على الترتيب، وبالتالي القيمة العظمى تساوي

وتعطي طول متجهة عزمها $\sqrt{35/4}\ a.u$ وست حالات لـ Z لأن $2J+1=6$.

بناء على ذلك تساوي 6 حالات ورمز الحد هو $^2d_{5/2}$.

والقيم المتبدئة $\frac{3}{2}$ وطول متجهة تساوي $\sqrt{15/4}\ a.u$

وأربع حالات ممكنة والرمز هو $^2d_{3/2}$

تابع في الصفحة التالية

A to Z مكتبة

المسألة الرابعة :

1- $X(t) = 0.1 \cos(\sqrt{2}\, t)$

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

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

$$E = \frac{1}{2} 2 \times (0.1)^2 = 1 \cdot 10^{-2} \text{ J}$$

3) الطاقة الكامنة المرنة = الطاقة الحركية المرنة = $\frac{E}{2}$

الكامنة $\bar{E} = \bar{E}$ (الحركية) $= \frac{E}{2} = \frac{1}{2} = 5 \cdot 10^{-3}$ J

مكتبة A to Z

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

السؤال الأول:

أجب عن السؤالين التاليين: **15 درجة لكل سؤال**

1- ماهي علاقة العدد الموجي $\bar{\upsilon}$ بالطاقة E .احسب العدد الموجي لفوتون طاقته E = 1 J .

علما أن ثابت بلانك $h = 6.626.10^{-34} j.s$ و سرعة الضوء $C = 2.998.10^{10} cm/S$

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 $m = 9.11.10^{-31} Kg$ وطول الصندوق L =258 pm . ماهي قيمة طاقة نقطة الصفر للإلكترون.
3. ما لسرعة الالكترونية الموافقة تقليد يا لهذه الطاقة، قارنها مع سرعة الضوء.

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

1- اذا كانت طاقة الهزاز التوافقي الكمومي تعطى بالعبارة $E_n = (n + 1/2)\, h\, \upsilon$. حيث n=0 , 1,2.... بين أن سويات الطاقة لهذه الجملة غير متوالدة . ماهي طاقة الوضع الصفري .

2- أجب 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 الالكترون عن النواة بمقدار 2.a.u .

3- ما الطاقة الالكترونية بحسب تقريب الالكترونات المستقلة لذرة الليتيوم Z=3 في الحالة الأساسية، وما القيمة التجريبية للطاقة الالكترونية إذا كانت طاقة كل من التشرد الأول والثاني هي 0.198a.u و 2.778a.u على الترتيب، أيهما أكبر وضح السبب.

طرطوس في 25 /7 /2023

مدرس المقرر:

د. سليمان يوسف محمد

A to Z

سلم تصحيح وفرز الكيمياء الكمومية لطلاب السنة الثانية كيمياء
الدورة الفصلية الثانية للعام الدراسي 2022/2023

جواب السؤال الأول: 15 + 15

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

5 درجات

نحسب $\bar{\nu}$ من العلاقة ①.

$$\bar{\nu} = \frac{E}{h\cdot c} \quad \cdots ②$$

5 درجات

نعوض في العلاقة ② فنحصل على:

$$\bar{\nu} = \frac{1\ J}{(6.626\times10^{-34}\ J.s)\times(2.998\times10^{10}\ cm/s)}$$

$$= 5.034\times10^{22}\ cm^{-1}$$

5 درجات

من الواضح أن هذا الضوء ينتمي بطول موجة قصير جداً

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

2 - من أجل الكترون نجد أن $E_{n=1}$ (طاقة نقطة الصفر) تحسب كما يلي

خمس درجات

$$E_1 = \frac{(1)^2\ (6.626\times10^{-34}\ J.s)^2}{8(9.11\times10^{-31}\ kg)(258\times10^{-12}\ m)^2} = 9.05\times10^{-19}\ J$$

خمس درجات

3 - تمثل E الطاقة الحركية لأن V=0 في الصندوق. لذلك

$$E = \frac{m\cdot V^2}{2}$$

عندئذ

$$\text{السرعة } V = \left[\frac{2E}{m}\right]^{\frac{1}{2}} = \left[\frac{2(9.05\times10^{-19}\ J)}{9.11\times10^{-31}\ kg}\right]^{\frac{1}{2}}$$

$$= 1.41\times10^{6}\ m.s^{-1}$$

خمس درجات

نقوم بمقارنة هذه السرعة مع سرعة الضوء إلى النتيجة.

$$\frac{1.41\times10^{6}\ m.s^{-1}}{2.998\times10^{8}\ m.s^{-1}} = 0.0047$$

أي نحو 0.5% من سرعة الضوء

ينتهي

جواب السؤال الثاني

1- طاقة الوضع الصفري هي $E_1 = \frac{1}{2} h\nu$ 15 درجات

ومن العلاقة العامة $E_n = (n + \frac{1}{2}) h\cdot\nu$. واضح أن E تتبع لـ n وتعطي قيمة وحيدة لـ E من أجل أية قيمة لـ n وهذا يعني أن قيمة الطاقة E_n غير متوالدة.

15 درجات

2- 25 درجة

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

خمس درجات

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

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

c. $n^2 = 9$ خمس درجات

d. l عدد طمية ثانوي $= 2$، عدد قطري $= 1$

e. $E = (-\frac{1}{2})\ a.u = -\frac{1}{2}\ a.u$ خمس درجات

3- 25 درجة

E التقريبية $= 2\varepsilon_{1s} + \varepsilon_{2s} = -\frac{1}{2}(\frac{2Z^2}{n_1^2} + \frac{Z^2}{n_2^2})$ خمس درجات

$= -\frac{Z^2}{2}(\frac{2}{n_1^2} + \frac{1}{n_2^2}) = -10,125\ a.u$ خمس درجات

إن القيمة التجريبية يجب أن تساوي القيمة السالبة لمجموع طاقات المفرد الذرية. ولكن نضيف إلى القيمة الثالثة لطاقة المفرد الذي يحسب نظريًا على النحو الآتي:

$I E_3 = -E_{Li^{2+}} = -[-\frac{1}{2}(\frac{Z^2}{n_1^2}) = \frac{1}{2}(\frac{3^2}{1}) = 4.5\ a.u$ خمس درجات

وهكذا نجد:

E التجريبية $= -(IE_1 + IE_2 + IE_3) = -7.47\ a.u$ خمس درجات

واضح أن القيمة النظرية يجب أن تكون أقل من القيمة التجريبية وذلك بسبب إهمال حدود التدافع، التي تمثل في حد ذاتها قيمًا موجبة خمس درجات

جامعة طرطوس كلية العلوم قسم الكيمياء	امتحان مقرر الكيمياء الكمومية طلاب السنة الثانية -الفصل الدراسي الأول 2023-2022 تمهل في إجابتك ولا تتسرع، نحن معك فثق بنفسك	الطالب: الرقم الجامعي: المدة: ساعتان العلامة: 70 درجة

السؤال الأول: (30) درجة

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

(1) شرط تكون أمواج مستقرة في حبل مشدود بين نقطتين طوله 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 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 $E_n = T+V/2$

(6) طاقة جسيم كتلته m يتحرك على محيط دائرة الكمون عليها يساوي الصفر هي:

A $E_4 =k^2\ \hbar^2\ /2I$ | B $E_3 =k^2\ \hbar^2\ /2m$ | C $E_2 =k^2\ \hbar^2\ /2r$ | D $E_1 =k\ \hbar\ /2r^2$

(7) ان 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

السؤال الثاني: (20) درجة للمسألة الأولى (20) درجة للمسألة الثانية (15) درجة للمسألة الثالثة (15) درجة للمسألة الرابعة

حل المسائل الأربعة الاتية

- **المسألة الأولى:**

احسب الطاقة التقريبية لذرة الليتيوم حيث التركيب الالكتروني هو $(1S^22S^1)$ 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:

- $1s^22s^22p^63s^23p^64s^1$
- $1s^22s^22p^63s^23p^63d^1$

يتبع في الصفحة الخلفية ←

الممسوحة ضوئيا بـ CamScanner

- **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 مستخدما ثابت بلانك ($h = 4.136 \times 10^{-15}\ e.v.s$)

ـ انتهت الأسئلة ـ

مع تمنياتي لكم بالنجاح والتوفيق

الأحد: 2023/2/19

مدرس المقرر

د. سليمان يوسف محمد

الممسوحة ضوئيا بـ CamScanner

تصحيح كيمياء كوهية لطلاب السنة الثانية

لدورة الفصل الأول

السؤال الأول:

30 درجة لكل إجابة صحيحة ثلاث درجات

1- $\lambda = \frac{2L}{n}$ حيث n: عدد صحيح موجب

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

3- $\psi_4 = \exp(-x^2)$ (15°)

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

5- $E_n = \frac{n^2 h^2}{8 m a^2}$

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

7- 15

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

9- 1.5 a.u (15°)

10- -2 a.u

المجموع 30°

المسألة الثانية:

اعتمادًا على التهيئة النووية الفعالة

نحدد طاقة التوزيع الالكتروني ① و ② وتكون الطاقة الأقل هي الوضع المفضل.

نحسب طاقة الوضع $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^1$ بتطبيق قواعد سلاتير نجد

ε_{1S} 1S: $Z - \sigma = 19 - (0{,}3 \times 1) = 18.7$

ε_{2S2P} 2S2P: $Z - \sigma = 19 - (0{,}35 \times 7 + 0{,}85 \times 2) = 14.85$

ε_{3S3P} 3S3P: $Z - \sigma = 19 (0{,}35 \times 7 + 0{,}85 \times 8 + 1 \times 2) = 7.75$

ε_{4S} 4S $= Z - \sigma = 19 - (0{,}85 \times 8 + 1 \times 10) = 2.2$

يؤدي تعويض هذه القيم في عبارة الطاقة إلى النتيجة.

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

$$= -597.058 \text{ a.u}$$

(10)

الممسوحة ضوئيا بـ CamScanner

الحالة $1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^2\ 3p^6\ 3d^1$

نتبع نفس طريقة الحساب السابقة نجد جميع موجودة باستثناء ζ_{3d}

$$\zeta_{3d} = Z - \sigma = 19 - (1 \times 18) = 1$$

ومن القيم السابقة نحصل على طاقة الوضع.

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

$$= -596.938 \cdot a.u$$

10

وذكون طاقة الوضع الأول أقل ولذلك هو الوضع المفضل للذرة.

أي أن التركيب هو $1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^2\ 3p^6\ 4s^1$

المسألة الأولى:

الحل: بما أن التركيب الالكتروني لذرة الليثوم هو $1s^2\ 2s^1$

نحسب القيمة التقريبية اعتمادا على التقريب المستقل.

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

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

10

أما القيمة التجريبية تحتاج لحساب طاقة التشرد I_3.

$$E_{I_3} = -E_{Li}^{+2} = -\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{Z^2}{n_1^2}\right)\right] = \frac{1}{2}\left(\frac{3}{1}\right)^2 = 4.5\ a.u$$

وهكذا بان

$$E_{exp} = -[E_1 + E_2 + E_3] = -(0.198 + 2.778 + 4.5)$$

5

$$= -7.476\ a.u$$

والنتيجة غير مقبولة لأن طاقة القيمة التقريبية أقل من القيمة التجريبية والسبب اهمال الحلاقة بين الالكترونات وهي طاقة موجبة.

5

الممسوحة ضوئيا بـ CamScanner

التالية :

عبارة طاقة الاهتزاز التوافقي الكلية هي :

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

$$= (4+\tfrac{1}{2})\,h\cdot\nu = \tfrac{9}{2}\,h\cdot\nu \qquad (10)$$

وتكون الطاقة الكلية هي $\frac{9}{2}h\nu$. وبما أن الطاقة الكامنة والحركية هي المتوسط متساويتين أي أن :

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

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

- إن عبارة الطاقة لجسيم داخل صندوق وحيد البعد هي :

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

وهي قيمة الضوء $h\nu$ اللازم لنقل الالكترون في الحالة $n_1=1$ إلى الحالة $n_2=2$

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

أما عندما يكون عرض الصندوق $2L$ نصبح :

$$\Delta E = \frac{3h^2}{8m(2L)^2} \Rightarrow \nu_2 = \frac{\Delta E}{h} = \frac{3h}{32mL^2} \qquad (10)$$

وهنا نجد أن : $\nu_2 = \frac{\nu_1}{4}$ وهو المطلوب .

المسألة الرابحة : الحل : لدينا العلاقة

$$E = h\nu = W + E_T$$

$$\Rightarrow h\nu - E_T \qquad (5)$$

حيث تمثل E_T الطاقة الحركية للإلكترونات العائدة للبوتاسيوم و لها W بحسب استخراج واحدة ملائمة لتناسب بالذهن فنجد أن :

(10)

$$W = (4.136\times10^{-15})\times(1.13\times10^{15}\cdot s^{-1}) = 2,38\cdot eV$$

$$= 2.29\ e\cdot V$$

الممسوحة ضوئيا بـ CamScanner

جامعة طرطوس اسم الطالب : الدرجة : 100

كلية العلوم – قسم الكيمياء المدة : ساعتان

امتحان مقرر **الكيمياء الكمومية** لطلاب السنة **الثانية** كيمياء الفصل الأول للعام 2021/ 2022

السؤال الأول : اختر الإجابة الصحيحة فيما يلي(مستخدما الواحدات الذرية) : 30درجة

ملاحظة : اكتب الارقام 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 , -9/2 a.u , -4 a.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 0.5 .a.u هو .

- 1/2 a.u , -3 a.u , -2 a.u , - 1/4 a.u

5- طاقة الفلك 1s في ذ رة الهيدروجين هي . -1/4 a.u , -2 a.u , -1 a.u , -1/2 a.u

6- عدد العقد القطرية في الفلك 4d هو . 4 , 5 , 2 , 1

7- الطاقة الصفرية للهزاز التوافقي الكمومي هي : 1/2 h , 1 h , 3/2 h , 2 h

8- الطاقة الكامنة المتوسطة للهزاز التوافقي هي : V= 2T , V =1/2 T , V =1/4 T , V = T

9- طاقة السوية الخامسة للهزاز التوافقي هي: 11/2 h , 9 h , 3/2 h , 5/2 h

10- طاقة He^{+} في المستوى n=1 : -1/2a.u , -2a. u , -4 a.u , -a.u

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

أولا : ليكن لدينا جسيم حر كتلته m يتحرك في صندوق احادي البعد طوله L ولتكن الطاقة الكامنة V=0 داخل الصندوق و V = ∞ 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 هذ 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 توالدها.

ثانياً : أجب عن الأسئلة الأتية .

1- اكتب التابع الموجي الذي يحقق مبدأ الاستبعاد لباولي لذرة البيريليوم(Z=4)، ثم احسب طاقة الذرة وفقا للشحنة النووية الفعالة .

2- احسب طاقة هذه الذرة وفقا لتقريب الالكترونات المستقلة .

ثالثا :أيا من المؤثرات الأتية ($-3/r$, $-1/2\nabla^2$, $-1/r$, $-1/2\nabla^2$, $-1/2\nabla^2$) 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

مكتبة A to Z

سلم تصحيح مقرر الكيمياء الموجية لطلاب السنة الثانية
لدورة 2022 - الفصل الأول

السؤال الأول: 1- عدد سويات الطاقة $n=3$ الهيدروجين
(2) — 9

2- طاقة الأيون Li^{2+} في الطبقة $n=1$ هي
(2) — $-\frac{9}{2}$ a.u

3- عدد العقد الكلية الذي يمتلكها المدار 4d هو
(2) — 2 عقدة

4- الطاقة الكامنة في ذرة الهيدروجين عند البعد $r=r_0$
(2) — -2 a.u

5- طاقة الفلك 1s في ذرة الهيدروجين هي
(2) — $-\frac{1}{2}$ a.u

6- عدد العقد القطرية في الفلك 4d هو
(2) — 1 عقدة

7- الطاقة الصفرية Z.P.E للمهتز التوافقي
(2) — $\frac{1}{2}h\nu$

8- الطاقة الكامنة المتوسطة للمهتز التوافقي
(2) — $\bar{V}=\bar{T}$

9- طاقة السوية الخامسة للمهتز التوافقي هي
(2) — $\frac{11}{2}h\nu$

10- طاقة He^{+} في المستوى $n=1$ هو
(2) — -2 a.u

السؤال الثاني: 20 + 20 + 30 درجة

أولاً: 1- عبارة سويات الطاقة
(5) — $E_n=\frac{n^2h^2}{8mL^2}$

2- طاقة نقطة الصفر Z.P.E تساوي
(5) — $E_1=\frac{h^2}{8mL^2}$

3- قيمة الطاقة لما $n=1$ هي نفسها E_1
(6) — $E_1=\frac{h^2}{8mL^2}$ وهي غير متوالدة.

4- عندما يتحول الصندوق إلى مربع طول ضلعه a تصبح الطاقة
(5) — $E=\frac{h^2}{8ma^2}(n_x^2+n_y^2)$

5- قيمة الطاقة عندما n_x أو n_y إحداها 1 والثانية 2 هي
(5) — $E=\frac{h^2}{8ma^2}(1+4)=\frac{5h^2}{8ma^2}$

وهذه القيمة للطاقة متوالدة لأن لهذه القيمة تقابل كاتين موجبين مختلفين، وتعددها يساوي
(4) 2

يتبع بالصفحة الثانية

ثانياً: 1- التابع الموجي الذي يحقق مبدأ الاستبعاد لباولي لذرة البيريليوم ($Z=4$)

(5) $$\Psi = \frac{1}{\sqrt{4!}} \begin{vmatrix} 1S(1) & \overline{1S(1)} & 2S(1) & \overline{2S(1)} \\ 1S(2) & \overline{1S(2)} & 2S(2) & \overline{2S(2)} \\ 1S(3) & \overline{1S(3)} & 2S(3) & \overline{2S(3)} \\ 1S(4) & \overline{1S(4)} & 2S(4) & \overline{2S(4)} \end{vmatrix}$$

حساب الطاقة وفقاً لنظرية المدارات الذرية الفعالة

(2) $E = -\frac{1}{2}\left[2\left(\frac{\xi_1}{n_1}\right)^2 + 2\left(\frac{\xi_2}{n_2}\right)^2\right]$ و ξ_1, ξ_2 ثوابت الحجب لكل من المدارين 1s و 2s

(3) $\xi_{1s} = Z - (1\times 0{,}30) = 4 - 0{,}3 = 3.7$

(3) $\xi_{2s} = Z - (1\times 3{,}5) + 2(0{,}85) = 4 - 2{,}05 = 1.95$

(4) $$\begin{cases} E = -\frac{1}{2}\left[2\left(\frac{3{,}7}{1}\right)^2 + 2\left(\frac{1{,}95}{2}\right)^2\right] \\ = -14{,}165 \cdot a.u \end{cases}$$

2- حساب الطاقة وفقاً لمبدأ أفباو للإلكترونات المستقلة

(3) $E = -\frac{1}{2}\left[2\left(\frac{4}{1}\right)^2 + 2\left(\frac{4}{2}\right)^2\right] = -20\ a.u$

(10) ثالثاً: 1- المؤثر هو $-\frac{1}{2}\nabla - \frac{1}{r}$

2- بما أن $3P_x$ يمثل تابعاً خاصاً للمؤثر إذاً

$$H_3P_x = E \cdot P_x$$

والقيمة الخاصة هي قيمة الطاقة على المدار الثالث والطبقة الثالثة

(10) وهي تحسب كما يلي $E = -\frac{1}{2}\left(\frac{1}{3}\right)^2 = -\frac{1}{18}\ a.u$

A to Z مكتبة

ا,,جامعة طرطوس　　اسم الطالب :　　الدرجة : 100

كلية العلوم – قسم الكيمياء　　المدة : ساعتان

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

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 الأتية .

$\psi_1 = X$, $\psi_2 = X^2$, $\psi_3 = \sin x$, $\psi_4 = \exp(x$

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- ماهوالتابع 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_2, ψ_1 اللذين يمثلان حركة الجسيم في الصندوق في المستوى 1و 2 وبين الخواص التعامدية والتناظرية لهما .

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

أولا :أجب عن الأسئلة الأتية (استخدم الواحدات الذرية .

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

ثانياً : أجب عن الأسئلة الأتية .

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

A to Z

حل السؤال الموضح مسبقاً في صفحة ثانية لمياء

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

1- قيمت الأمواج المستقرة في حبل مشدود عندما يحقق التابع الموجي الشروط الحدية
أي ينعدم التابع الموجي عندما.

(5) $\psi(L) = A \sin(2\pi L/\lambda) = 0$

$2\pi L/\lambda = n\pi$ ومنه $2\pi L/\lambda = 0$ أو $A=0$

وهذا يحصل إذا كانت

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

2- يمكن التوصل إلى علاقة بروغلي.

1- نكتب علاقة أينشتين من أجل الفوتونات بالشكل

$E = h\cdot\nu$ --- (1)

وهي تتمتع بطاقة نصطلح بدلالة الكتلة النسبية

$E = mc^2$ --- (2)

(5) ويؤدي مساواة العلاقتين إلى النتيجة

$E = mc^2 = h\cdot\nu = h\,c/\lambda$ --- (3)

(5) أو $mc = h/\lambda$

أما الجسم المادي ذو الكتلة الساكنة غير الصفرية فينتقل بسرعة V
وبالتالي

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

ويكون طول موجة بروغلي.

$\lambda = \frac{h}{p}$

3-

1- $\psi_1 = x$ لا يحقق التابع المقبول فيزيائياً، لأنه لا ينعدم عندما $x \to \pm\infty$

2- $\psi_2 = x^2$ = = = = = =

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

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

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

4- 1- التابع الموجي هو

(5) $\psi(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin(n\pi x/L)$ و $n = 1, 2, \ldots$

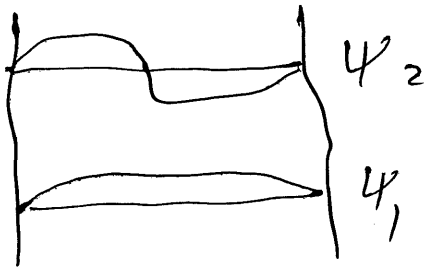
2-

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

3- الطاقة للسويات الثلاث الأولى.

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

(5) $E_3 = \frac{9h^2}{8mL^2}$



(5) ψ_1 متعامد مع ψ_2 لأن $\psi_1\cdot\psi_2 = 0$
ψ_1 متناظر و ψ_2 مضاد للتناظر

يتبع بالصفحة الثانية

A to Z

السؤال الثاني : مجموعة (30 + 20)

1- $E_{1s} = -\frac{1}{2}\left(\frac{Z}{n_1}\right)^2 = -\frac{1}{2}$ a.u (5)

2- $E_2 = -\frac{1}{2}\left(\frac{Z}{2}\right)^2 = -\frac{1}{2}$ a.u (5)

3- درجة العقدة هي $n^2 = (2)^2 = 4$ (5)

4- عدد العقد السطحية هو l للذرة $4d_{xz}$ ويساوي $l = 2$

وعدد العقد القطرية يساوي $n - l - 1 = 1$ (5)

ثانياً :

التابع الموجي لذرة الهيليوم $\psi = \frac{1}{\sqrt{2!}} \begin{vmatrix} 1s(1) & \overline{1s(1)} \\ 1s(2) & \overline{1s(2)} \end{vmatrix}$ (5)

نحسب طاقة هذا الأيون Zn^+ وفقاً للنظرية الموجية الفعالة (5)

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

ويتطلب تطبيق هذه العلاقة معرفة قيمة ξ_{1s} من العلاقة العامة الآتية

$$\xi_{1s} = Z - \sigma = Z - [(n-1)\times 0{,}35 + q_1 \times 0{,}85 + q_2 \times 1{,}0]$$

$$= 2 - 1 \times 0{,}30 = 1.7$$ (5)

$$E = 2E_{1s} = -\frac{1}{2}\left[2\left(\frac{\xi_{1s}}{n_1}\right)^2\right] = -\frac{1}{2}\left[2\left(\frac{1.7}{1}\right)^2\right]$$

$$= -2.890 \text{ a.u} \quad \ldots (5)$$

2- يعتمد مبدأ الالكترونات المستقلة على إهمال الحد الذي يمثل قوى التنافر.

ونحسب الطاقة استناداً إلى هذا المبدأ لمجموع طاقات المدارات الذرية.

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

نلاحظ قيمة هذه الطاقة أقل من القيمة الحقيقية حيث اهمال حد التنافر وهو قيمة موجبة.

3- طريقة مبدأ التغير تعتبر تقريبية، تابع يعتمد بدالة عامل التغير ξ

ثم نحسب الطاقة فيما بعد ذرية بأخذ القيمة المتوسطة التي نحصل بالعلاقة

$$E = \int \psi^* \hat{H} \psi \, dV$$

فنحسب الطاقة بحسب العامل $\xi = 2 - \frac{1}{16} = 2 - \frac{5}{16} = 1.6875$ ونكون

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

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

جامعة طرطوس اسم الطالب : الدرجة : 100

كلية العلوم – قسم الكيمياء المدة : ساعتان

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

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

1- ما طاقة ذرة الهيدروجين في الوضع 2S؟
2- ما قيمة مركبة العزم المغناطيسي من أجل الالكترون في الحالة3d للهيدروجين ؟ علما ان مغناطيس بور $\beta_e = 9.274078\times 10^{-24}\ J.T^{-1}$
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 الجسيم الحر في صندوق وحيد البعد طوله L يمكن أن يثار من الحالة n= 1 إلى n=2 بوساطة ضوء تواتره ν . فما هو التواتر الضروري لحدوث الانتقال من n=1 إلى n=2 عندما يكون طول الصندوق 2L .

ثانياً : يبدي $H^{35}Cl$ امتصاصا قويا في الطيف تحت الأحمر عند $2992cm^{-1}$ ،الموافق لطاقة قدرها $5.941X10^{-20}J$.فإذا كانت طاقة هذا الضوء Eتمتص ليثار HClمن السوية n=0 إلى السوية n=1 . ماقيمة ثابت القوة K في HCl .علما أن عدد أفوكادرو $N_a= 6.022X10^{23}$ ، $h = 6.626x10^{-34}\ J.S$

ثالثا : أجب عن الأسئلة التالية :

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

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

ب- ما الطاقة الازمة لانتقال الالكترون من السوية 1S إلى السوية 2S في ذرة الهيدروجين

2- اكتب التابع الموجي المضاد للتناظر لذرة البيريليوم Be(Z=4)، ثم احسب طاقة هذه الذرة وفقا للشحنة النووية الفعالة .

مع تمنياتي للجميع بالتوفيق والنجاح

24 /2 /2021

مدرس المقرر : د . سليمان محمد

مكتبة A to Z

نسلم تصحيح وفرز الامتحان الموحد

السؤال الأول :

1- طاقة ذرة الهيدروجين في الوضع 2S هي :

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

2- قيمة وكمية العزم المغناطيسي من أجل الالكترون في الحالة 3d للهيدروجين .

$|M| = \beta_e \cdot \sqrt{l(l+1)} = \sqrt{6}\cdot\beta_e = 9.274078\times10^{-24}\times\sqrt{6}$ (5)

$= 2.27\times10^{-23}\ J\cdot T^{-1}$

(5)

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

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

5- الطاقة الكامنة في ذرة الهيدروجين هي :

$V = -\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r}$ (5)

وفي الوحدات الذرية تصبح $V = -\frac{1}{r}\cdot a.u$ (5)

$= -\frac{1}{1}\ a.u$ أو $-2\ a.u$

السؤال الثاني :

أولاً : نحسب قيمة الطاقة في المستوي n وفق القانون $E_n = \frac{n^2h^2}{8mL^2}$ ... ①

من قانون الطاقة ① نحسب فرق الطاقة ΔE (5)

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

وهذا الفرق هو طاقة الضوء التي تنبعث من الحالة $n=1$ إلى الحالة $n=2$ إذاً هي تساوي $h\nu$ وعنه (5)

$\nu = \frac{\Delta E}{h} = \frac{3h}{8mL^2}$ أو

وعند حساب ν' نطبق نفس العلاقات ① و ② . بعد تبديل $L' = 2L$

وبذلك نحصل على $\nu' = \frac{\Delta E}{h} = \frac{3h}{32mL^2}$ ... ③ (5)

ومقارنة ν' مع ν نجد أن $\nu' = \frac{\nu}{4}$

ثانياً :

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

$K = 4\pi^2\nu^2\mu/h^2$ (5) ... ①

نحسب الكتلة المختزلة μ

$\mu = \frac{m_H\cdot m_{Cl}}{m_H + m_{Cl}}\times\frac{1}{N_a} = \frac{1\times35}{1+35}\times\frac{1}{6.022\times10^{23}} = 1.614\cdot10^{-24}\ g$

$= 1.614\cdot10^{-27}\ Kg$ (5)

يتبع في الصفحة الثانية

مكتبة A to Z

تابع لسلم تصحيح وفرز المياه الموضبة

نعوض قيمة μ في العلاقة (1) فنحصل على:

$$K = \frac{4\pi^2 E^2 \mu}{h^2} = \frac{4\pi^2 (5.941\times10^{-20}\,j)^2 (1.614\times10^{-27}\,kg)}{(6.626\times10^{-34}\,j.s)^2} = 512\cdot m^{-1}$$ (5)

ثالثاً: 1- يعطى المؤثر الهاملتوني لذرة الهيدروجين بالوحدات الذرية

$$H = -\frac{1}{2}\nabla^2 - \frac{1}{r}$$ (5)

وتعطى طاقتها بالعلاقة $E = -\frac{1}{2}\left(\frac{1}{n}\right)^2$ (5)

P - طاقة تأين Be^{3+} هي E - طاقة الشاردة.

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

طاقة تأين Li^{2+} هي E - طاقة الشاردة.

$$IE = -E = \frac{1}{2}\left(\frac{Z}{n}\right)^2 = \frac{1}{2}\left(\frac{3}{1}\right)^2 = 4.5\ a.u$$ (5)

طاقة تأين الهيدروجين بتقنين الطريقة

$$IE = -E = \frac{1}{2}\ a.u$$ (5)

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

2- التابع الموجي المضاد للتناظر

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{4!}}\begin{vmatrix} 1s(1) & \overline{1s}(1) & 2s(1) & \overline{2s}(1) \\ 1s(2) & \overline{1s}(2) & 2s(2) & \overline{2s}(2) \\ 1s(3) & \overline{1s}(3) & 2s(3) & \overline{2s}(3) \\ 1s(4) & \overline{1s}(4) & 2s(4) & \overline{2s}(4) \end{vmatrix}$$ (5)

نحسب الطاقة وفق النمذجة للذرة الهيدروجينية انطلاقاً من العلاقة:

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

نحسب الشحنة النووية الفعالة من العلاقة الآتية

$$\varepsilon = Z - \sigma = Z - [(n-1)\times 0.35 + n_1\times 0.35 + n_2\times 1]$$ (5)

$$\varepsilon_{1s} = Z - (1\times 0.30) = 4 - 0.30 = 3.7$$

$$\varepsilon_{2s} = Z - (1\times 0.35 + 2\times 0.85) = 4 - 0.2.05 = 1.95$$

$$E = -\frac{1}{2}\left[2\left(\frac{\varepsilon_1}{n_1}\right)^2 + 2\left(\frac{\varepsilon_{2s}}{n_2}\right)^2\right]$$ بالتعويض نحصل على: $= -14.165\ a.u$

دسيما محمد

مكتبة A to Z

ا،،جامعة طرطوس　　اسم الطالب :　　الدرجة : 100

كلية العلوم – قسم الكيمياء　　المدة : ساعتان

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

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

ملاحظة : اكتب الارقام 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 ، -9/2 a.u ، -4 a.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 0.5 .a.u هو .

- 1/2 a.u , -3 a.u , -2 a.u , - 1/4 a.u

5- طاقة الفلك 1s في ذ رة الهيدروجين هي . -1/4 a.u , -2 a.u , -1 a.u , -1/2 a.u

6- عدد العقد القطرية في الفلك 4d هو . 4 , 5 , 2 , 1

7- الطاقة الصفرية للهزاز التوافقي الكمومي هي : $\frac{1}{2}h\nu$, $h\nu$ 1 , $\frac{3}{2}h\nu$, $2h\nu$

8- الطاقة الكامنة المتوسطة للهزاز التوافقي هي : $\bar{V}=2\bar{T}$, $\bar{V}=\frac{1}{2}\bar{T}$, $\bar{V}=\frac{1}{4}\bar{T}$, $\bar{V}=\bar{T}$

9- طاقة السوية الخامسة للهزاز التوافقي هي: $\frac{11}{2}h\nu$, $9h\nu$, $\frac{3}{2}h\nu$, $\frac{5}{2}h\nu$

10-طاقة He^{+} في المستوى n=1 : -1/2a.u , -2a. u , -4 a.u , -a.u

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

أولا : ليكن لدينا جسيم حر كتلته m يتحرك في صندوق ثنائي البعد مستطيل الشكل $L_x = 2L_y$ ولتكن الطاقة الكامنة V=0 داخل الصندوق و V = ∞ 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 $n_y=1$, $n_x=2$, هل هذ السوية متوالدة ؟

4- بفرض ان 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 المؤ ثر 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 الالكترونات المستقلة .

3- احسب طاقة الذرة وفقا لطريقة مبدأ التغير علما ان $E = \zeta^2 - 2Z\zeta + \frac{5}{8}\zeta$.

مع تمنياتي للجميع بالتوفيق والنجاح

1/9/2020

مدرس المقرر : د . سليمان محمد

سلم تصحيح مقرر الكيمياء الكمومية
لطلاب السنة الثانية الفصل الثاني

السؤال الأول: لكل رقم من 1 – 15 أربع درجات . إذا كان الاختيار صحيح

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

60

السؤال الثاني: تلا تتوزع درجة كل رقم ست درجات

1- عبارة الطاقة المسموح بها هي

$$E=\frac{n_x^2 h^2}{8mL_x^2}+\frac{n_y^2 h^2}{8mL_y} \quad \cdots (1)$$

6

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

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

2- قيمة طاقة نقطة الصفر

نعوض في العلاقة (2) $\Leftarrow n_x=n_y=1$

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

6

3- قيمة طاقة عندما $n_x=2, n_y=1$.

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

6

وهذه القيمة غير متوالدة .

تابع سلم التصحيح . الكيمياء الكمومية .

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

$$E = \frac{n_x^2 h^2}{8mL^2} + \frac{n_y^2 h^2}{8mL^2} = \frac{h^2}{8mL^2}(n_x^2 + n_y^2)$$ (5)

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

$$E_{2,2} = \frac{h^2}{8mL^2}(4+4) = \frac{h^2}{mL^2}$$ (6)

ثانيا : ذرة شوارد درجة .

المؤثر الهاملتوني لذرة الهيليوم .

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

$$= -\frac{1}{2}\nabla_1^2 - \frac{1}{2}\nabla_2^2 - \frac{2}{r_1} - \frac{2}{r_2} + \frac{1}{r_{12}}$$ (5)

1- الدالة الموجية الكلية تحقق مبدأ الاستبعاب .

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

وطاقة ذرة الهيليوم وفقا للتهيئة الموضبية المعطاة حسب

E للهيليوم $= 2E_{1s} = -\frac{1}{2}\left[2\left(\frac{\zeta_{1s}}{n_1}\right)^2\right]$ و $\zeta_{1s} = Z - \sigma = Z - [(n-1)\times 0{,}35 + 0{,}85 \times 1 + 0{,}85 \times 1]$

$= 2 - 1 \times 0{,}30 = 1{,}7$

وبالتعويض نحصل على $E = -\frac{1}{2}\left[2\left(\frac{1{,}7}{1}\right)^2\right] = -2{,}89$ a.u

2 طاقة ذرة الهيليوم وفقا لتقريب الالكترونات 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 أعلى في الطيف الحقيقي بسبب اهمال عدالتنافر وهو طيف موضبي

(10)

تابع لـ الفيزياء الكيمياء الموسم

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

نحسب $\bar{\xi}$ من الاستقاف للدالة ونعوض بـ $\bar{\xi}$ في $\bar{E}$

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

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

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

10

جامعة طرطوس اسم الطالب : الدرجة : 100

كلية العلوم – قسم الكيمياء المدة : ساعتان

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

السؤال الأول : أجب عن الأسئلة التالية (استخدم الواحدات الذرية) : 35درجة

1- ما طاقة ذرة الهيدروجين في الوضع 2S؟
2- ما قيمة مركبة العزم المغناطيسي من اجل الالكترون في الحالة3d للهيدروجين ؟ علما ان مغناطيس بور $\beta_e = 9.274078\times 10^{-24}\ J\ .\ T^{-1}$
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 السوالين التاليين : (30 + 35)

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

1- اكتب عبارة سويات الطاقة المسموح بها لهذه الجملة .
2- ما طاقة السوية الأرضية او 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 الموثر 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 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

19 /2 /2020

مدرس المقرر : د . سليمان محمد

سلم تصحيح وفرز الكيمياء الكمومية سنة ثانية كيمياء - الفصل الأول
للعام الدراسي ٢٠١٩ - ٢٠٢٠

السؤال الأول: يضم السؤال إلى ثمن بنود لكل بند سبع درجات

جواب السؤال الأول:

1- طاقة ذرة الهيدروجين في الوضع 2S : هي

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

2- قيمة مركبة العزم المغناطيسي من أجل الالكترون في الحالة 3d للهيدروجين.

$$|M| = \beta_e \cdot \sqrt{l(l+1)} = \sqrt{6} \cdot \beta_e = 9.274078 \times 10^{-24} \times \sqrt{6}$$
$$= 2.27 \times 10^{-23}\ J.T^{-1}$$

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

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

عدد العقد الكروية يحسب من قانون $n-1-l = 4-1-2 = 1$

5- الطاقة الكامنة في ذرة الهيدروجين هي $V = -\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon r}$

وفي الوحدات الذرية تصبح $V = -\frac{1}{r}\ a.u$

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

السؤال الثاني: مكون من مسألتين (الأولى 35 درجة والثانية 30 درجة)

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

2- طاقة السوية الأرضية أو الأساسية هي قيمة الطاقة عندما $n=1$ نعوض في العلاقة (1) فنحصل على

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

3- طاقة السوية $n=2$ نعوض في العلاقة (1) فنحصل على

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

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

فتكون عبارة الطاقة

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

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

يتبع في الصفحة الثانية

تابع لسلم تصحيح الكيمياء الكموحية

الطاقة في الحالة $n_x = n_y = n_z = 2$ هي

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

6. قيمة الطاقة المحسوبة في الطلب 5 طاقة غير متحددة. لأنها قابلة لتابع موجي واحد والمعنى الفيزيائي للتحدد. هو وجود قيمة واحدة للطاقة قابلة لأكثر من تابع موجي أو قابلة لتوابع موجية مختلفة.

ثانياً:

☆ المؤثر الهاملتوني لذرة الهيليوم.

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

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

2. التابع الموجي الذي يحقق مبدأ الاستبعاد لباولي هو.

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

وطاقة ذرة الهيليوم وفقاً للنظرية الموجية الفعالة هي.

للهيليوم $E = 2E_{1s} = -\frac{1}{2}\left[2\left(\frac{\xi_{1s}}{n_1}\right)^2\right]$ و $\xi_{1s} = Z - \sigma = Z - [(n-1)\times 0{,}35 + g_1\times 0{,}85 + g_2\times 1]$

$$= Z - 1\times 0{,}30 = 1.7$$

وبالتعويض نحصل على.

للهيليوم $E = -\frac{1}{2}\left[2\left(\frac{1.7}{1}\right)^2 = -2{,}890\ a.u\right.$

2 - طاقة ذرة الهيليوم وفقاً لتقريب الالكترونات المستقلة.

$$E_{app} = \sum g_i E_i = 2E_{1s} = -\frac{1}{2}\left[2\left(\frac{Z}{n_1}\right)^2\right] = -4{,}00\ a.u$$

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

3 - حساب الطاقة

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

نعب ξ من الاشتقاق للطاقة ونجعله يساوي الصفر.

فنحصل على $\xi = 1.6875$ ونعوض في الطاقة.

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

$$= -2.8476\ \ a.u$$

د. سليمان محمد

جامعة طرطوس
كلية العلوم – قسم الكيمياء

اسم الطالب

الدرجة : 100
المدة :ساعتان

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

السؤال الأول : **30 درجة**

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 لاتحقق شروط التابع الموجي وماهو السبب .

ج – أشر إلى كل تابع يمثل تابعاخاصا للمؤثر d/dx وماهي القيمة الخاصة له .

د- أشر إلى كل تابع يمثل تابعا خاصا للمؤثر d^2/x^2 , وماهي القيمة الخاصة .

2- اختر الإجابة الصحيحة فمايلي :

أ – كم ا لتعدد 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

السؤال الثاني : **30 درجة**

ليكن لدينا جسيم حر كتلته m يتحرك في صندوق ثلاثي البعد L_z , L_y , L_x 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- ما هي 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 .

السؤال الثالث : أجب عن السؤالين التالين . **40 درجة**

الأول : أجب عن الأسئلة التالية.

1- ماهي عبارة الطاقة للهزاز التوافقي الكمومي .

2- احسب قيمة الطاقة الكلية E_n في السوية $n = 5$ للهزاز التوافقي .

3- ما هي قيمة الطاقة الكامنة المتوسطة و الطاقة الحركية المتوسطة المحسوبة في الطلب الثاني .

الثاني :

1 - ماهو التابع الموجي لذرة الليتيوم في الحالة المستقرة حسب مبدأ الاستبعاد لباولي .

2- اكتب عبارة مؤثر الطاقة (الهملتوني) لذرة الليتيوم بفرض النواة ثابتة في مركز الاحداثيات .

3- بفرض أن $\hat{H} = \hat{H}^0 + \hat{H}^1$, ماهي قيمة مؤثر الاضطراب في ذرة الليتيوم .

4- احسب طاقة ذرة الليتيوم معدلة للرتبة صفر . حيث $H = -27.2 ev$ و $Z = 3$.

5- احسب الطاقة الكلية للحالة المستقرة لذرة الليتيوم معدلة للمرتبة الأولى. إذا كا ن $E^1 = 83.5 ev$

قارن النتيجة مع القيمة الفعلية لطاقة الحالة المستقرة $E = - 203.5 ev$

مع تمنياتي للجميع بالتوفيق طرطوس في 26 / 6 / 2018

د . سليمان محمد

سلم تصحيح لمقرر الكيمياء الكمومية لطلاب السنة الثانية

السؤال الأول: 1- م - ψ_5 ، ψ_3 هي توابع تحقق شروط التابع الموجي } 8

ب - ψ_1 ، ψ_2 ، ψ_4 لا تحقق شروط التابع الموجي لأنها غير منتهية عندما $X \to \pm\infty$.

ج - ψ_4 : يمثل تابعاً خاصاً للمؤثر d/dx وقيمته الخاصة 1-

د - ψ_4 : يمثل تابعاً خاصاً للمؤثر d^2/dx^2 وقيمته الخاصة 1+ } 12

ψ_3 : تابعاً خاصاً للمؤثر d^2/dx^2 وقيمته الخاصة 1-

2- م - التحدد لسوية الطاقة $n=3$ في ذرة الهيدروجين هو 9

ب - الطاقة الكامنة في ذرة الهيدروجين هي $-2au$ } 10

السؤال الثاني: 30 درجة

1- العبارة العامة لسويات الطاقة للجملة:

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

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 المستوي الأول عند $n_x = n_y = n_z = 1$

نعوض في علاقة الطاقة الموجودة في الطلب الثاني فنحصل على:

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

4- قيمة الطاقة بدلالة L عندما $n_x = n_y = n_z = 2$ هي:

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

5- إن القيمة $E = \frac{3h^2}{2mL^2}$ هي قيمة غير متحددة لأي قيمة وحيد ونقابل تابع موجي وحيد.

المعنى الفيزيائي للتحدد هو قيمة واحدة للطاقة يقابلها مجموعة توابع موجية مختلفة. لكل طلب 6 درجات

السؤال الثالث: 1- عبارة الطاقة هي $E_n = (n + \frac{1}{2})h\nu$

2- الطاقة الكلية E_n في السوية $n=5$ للمتذبذب.

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

3- الطاقة الكامنة المتوسطة $\bar{V}$ والطاقة الحركية المتوسطة $\bar{T}$.

كل منهما تساوي الأخرى وتساوي $\frac{E}{2}$، ولحساب القيمة.

$$\bar{T} = \bar{V} = \frac{E}{2} = \frac{11}{4}h\nu$$ لكل طلب 5 درجات

يتبع في الصفحة الثانية

مكتبة A to Z

تابع لسلم تصحيح الكواشف

السؤال الثالث

شيئاً : 2 - 1 - التابع الموجي لذرة الليثوم في الحالة المستقر . يكتب بأحد الشكلين .

$$\Psi = 1S(1) \cdot 1S(2) \cdot 2S(3)$$

$$\Psi = \left(\frac{1}{6}\right)^{\frac{1}{2}} \begin{vmatrix} 1S\alpha(1) & 1S\beta(1) & 1S\alpha(1) \\ 1S\alpha(2) & 1S\beta(2) & 1S\alpha(2) \\ 1S\alpha(3) & 1S\beta(3) & 1S\alpha(3) \end{vmatrix} \quad \text{أو} \quad \Psi = \left(\frac{1}{6}\right)^{\frac{1}{2}} \begin{vmatrix} 1S\alpha(1) & 1S\beta(1) & 1S\beta(1) \\ 1S\alpha(2) & 1S\beta(2) & 1S\beta(2) \\ 1S\alpha(3) & 1S\beta(3) & 1S\beta(3) \end{vmatrix}$$

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 - $\hat{H} = \hat{H}^\circ + \hat{H}'$

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

4 - طاقة ذرة الليثوم وعدلة للرتبة صفر هي :

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

$$E^\circ = -\frac{9}{2} - \frac{9}{2} - \frac{9}{8} = -\frac{81}{8}\ H = -275.5\ e.V$$

5 - الطاقة الكلية الحالة المستقر لذرة الليثوم وعدلة للرتبة الأولى .

$$E = E^\circ + E' = -275.5 + 83.5 = -192.0\ e.V$$

ومقارنة هذه الطاقة مع القيمة التجريبية لطاقة الحالة المستقرة نجد أن E أكبر من طاقة الحالة المستقرة ، وهذا يؤكد طاقة الحالة المستقرة هي الحالة الأدنى للطاقة .

لكل طلب 5 درجات .

د. سلمى محمد

في 6/6/2018

مكتبة A to Z

جامعة طرطوس — اسم الطالب — الدرجة : 100
كلية العلوم – قسم الكيمياء — المدة :ساعتان

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

السؤال الأول : **30 درجة**

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 - أشر الى كل تابع يحقق شروط التابع الموجي (المقبول فيزيائيا) فيما سبق .

ب- حدد كل تابع لايحقق شروط التابع الموجي وبين السبب .

ج – أشر إلى كل تابع يمثل تابعاخاصا للمؤثر d/dx وماهي القيمة الخاصة له .

د- أشر إلى كل تابع يمثل تابعا خاصا للمؤثر d^2/x^2 , وماهي القيمة الخاصة .

2- اختر الإجابة الصحيحة فمايلي :

أ – كم تعدد سوية الطاقة (1, 2 ,3) . 1 , 3 , 6 , 9

ب- طاقة نقطة الصفر للحركة الاهتزازية التوافقية هي :

$E = 1/2(h^2 \upsilon_0)$, $E = 1/2\, h\upsilon_0$, $E = h\,\upsilon_0$, $E = h(\upsilon - \upsilon_0)$

السؤال الثاني : **20 درجة**

ليكن لدينا جسيم حر 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 $n_y = 1$, $n_x = 4$. هل قيمة الطاقة هذه متعددة , وكم تعددها .

4- نفرض أن $V = 10\ J$ داخل الصندوق , هل يؤثر ذلك ف قيمة الطاقة الخاصة وفي التوابع الموجية .

السؤال الثالث : أجب عن السؤالين التالين . **50 درجة**

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 الطاقه $n = 4$ للهيدروجين .

4- ماعدد العقد السطحية (الزاوية) الذي يمتلكه الفلك $4d_{xz}$, وماعدد العقد القطرية له .

5- ما ا لطاقة الكامنة في ذرة الهيدروجن عندما بتعد عن النواة بمقدار 0.5 au .

الثاني :

1 - ماهو التابع الموجي لذرة اللتيوم في الحالة المستقرة حسب مبدأ الاستبعاد لباولي .

2- اكتب عبارة مؤثر الطاقة (الهملتوني) لذرة اللتيوم بفرض النواة ثابتة في مركز الاحداثيات .

3- بفرض أن $\hat{H} = \hat{H}^0 + \hat{H}^1$, ماهي قيمة مؤثر الاضطراب في ذرة الليتيوم .

4- احسب طاقة ذرة الليتيوم معدلة للرتبة صفر . حيث $H = 27.2\ ev$ و $Z = 3$.

5- احسب الطاقة الكلية للحالة المستقرة لذرة الليتيوم معدلة للمرتبة الأولى. إذا كا ن $E^1 = 83.5\ ev$

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

مع تمنياتي للجميع بالتوفيق طرطوس في 14 / 2 / 2018

د . سليمان محمد

مكتبة A to Z

السؤال الأول : 1-

أ- ψ_3 ، ψ_5

ب- ψ_1 ، ψ_2 ، ψ_4 لا تحقق شروط التابع الموجي لأنها غير منتهية . عندما $x \to \pm\infty$.

ج- ψ_4 : يمثل تابعاً خاصاً للمؤثر d/dx وقيمته الخاصة 1-

د- ψ_4 يمثل تابعاً خاصاً للمؤثر d^2/dx^2 وقيمته الخاصة 1+

ψ_3 = تابعاً خاصاً للمؤثر d^2/dx^2 وقيمته الخاصة 1-

2 - أ- التعدد لسوية الطاقة (1,2,3) هو 6

ب- طاقة نقطة الصفر للحركة الاهتزازية التوافقية هي $E = \frac{1}{2} h\nu_0$

السؤال الثاني :

1- العبارة العامة لسويات الطاقة هي : $E = \frac{h^2}{8m}\left(\frac{n_x^2}{L_x^2} + \frac{n_y^2}{L_y^2}\right)$

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

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

2 - طاقة نقطة الصفر هي $E_{1,1}$ نعوض كل من قيم n_x و n_y بواحد.

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

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

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

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

نجد أن قيمة الطاقة منصدة وتعدده يساوي 2-

4- يؤثر ذلك في قيم الطاقة الخاصة . ولا يؤثر في التوابع الموجية

السؤال الثالث : أ- طاقة ذرة الهيدروجين في الوضع 1S هو $E_{1S} = -\frac{1}{2} a.u$

ب- طاقة He^+ عند $n=1$ و $n=2$.

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

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

3 - درجة التوالد أو التعدد لسوية الطاقة $n=4$ هو $n^2 = 16$

4- عدد العقد الكلية هو قيمة العدد l وهو $l=2$ في الحالة 4d

إذاً عدد العقد الكلية 2 وعدد العقد الكروية هو .

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

5- الطاقة الكامنة في ذرة الهيدروجين $E = V = -\frac{1}{r}$

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

يتبع في الصفحة الثانية

مكتبة A to Z

السؤال الثالث

القسم الثاني : 1- التابع الموجي لذرة الليثيوم في الحالة المستقرة .

يمكن أن يكتب بأحد شكلين $\Psi = 1S(1) \cdot 1S(2) \cdot 2S(3)$ أو :

$$\Psi_{II} = \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{vmatrix} 1S\alpha(1) & 1S\beta(1) & 1S\alpha(1) \\ 1S\alpha(2) & 1S\beta(2) & 1S\alpha(2) \\ 1S\alpha(3) & 1S\beta(3) & 1S\alpha(3) \end{vmatrix}^{\frac{1}{2}} \quad , \quad \Psi_I = \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{vmatrix} 1S\alpha(1) & 1S\beta(1) & 1S\beta(1) \\ 1S\alpha(2) & 1S\beta(2) & 1S\beta(2) \\ 1S\alpha(3) & 1S\beta(3) & 1S\beta(3) \end{vmatrix}^{\frac{1}{2}}$$

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- $\hat{H} = \hat{H}^\circ + \hat{H}'$ وبالتالي $\hat{H} = \hat{H}^\circ + \hat{H}'$

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

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

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

5- الطاقة الكلية للحالة المستقرة لذرة الليثيوم وعدلة الرتبة الأولى :

$$E = E^\circ + E' = -275.5 + 83.5 = -192.0\ eV$$

ومقارنة هذه الطاقة مع الطاقة الفعلية لطاقة الحالة المستقرة نجد أن E هي طاقة الحالة المستقرة وهذا يؤكد طاقة الحالة المستقرة هي الحالة الأدنى للطاقة .

د. سليمان محمد

A to Z مكتبة

دورات تشرين

جامعة تشرين – كلية العلوم — المدة : ساعتان
قسم الكيمياء — الدرجة : 100
امتحان مقرر الكيمياء الكمومية لطلاب السنة الثانية كيمياء / فصل أول 2016

نموذج - B-

السؤال الاول : اختر الإجابة الصحيحة مما يلي (مستخدماً الواحدات الذرية) 30 درجة

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 1 S في ذرة الهيدروجين هي . -1/2 a.u , - 1 a.u , -2 a.u , -1/4 a.u
4- عدد العقد الكلية للفلك $4d_{x-y}$ 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 $4d_{x-y}$ هو . 1 , 5 , 2 , 7
7- عدد العقد السطحية أو الزاوية في الفلك $4d_{x-y}$ هو . 1 , 2 , 3 , 5
8- الطاقة الصفرية للهزاز التوافقي الكمومي هي 1/2 hυ , 1 hυ , 3/2 hυ , 2 hυ
9- الطاقة الكامنة المتوسطة للهزاز التوافقي الكمومي هي . V=T , V=1/2 T , V=1/4 T , V=2 T
10- طاقة السوية الرابعة للهزاز التوافقي الكمومي هي . 10 hυ , 9 hυ , 3/2 hυ , 9/2 hυ

السؤال الثاني : 20 درجة

ليكن لدينا جسيم حر كتلته m يتحرك في صندوق ثنائي البعد مستطيل الشكل $L_x = 2\ L_y$ 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 متوالدة .
4- بفرض المستطيل أصبح مربعاً طول ضلعه L . كيف تصبح عبارة الطاقة .
5- ماهي قيمة الطاقة الجديدة في المربع عندما n_x أو ny أحدهما تساوي 2 والأخرى 1 , هل هذه السوية متعددة وكم التعدد .

مع تمنياتي للجميع بالتوفيق والنجاح

د سليمان محمد — اللاذقية في 18 /2/ 2016

يتبع في الصفحة الثانية

A961

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

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

a) حساب طاقة هذا الأيون وفقا للشحنة النووية الفعالة.

b) حساب طاقته تبعاً لتقريب الإلكترونات المستقلة. لماذا تعد قيمة هذه الطاقة أقل من القيمة الحقيقية؟

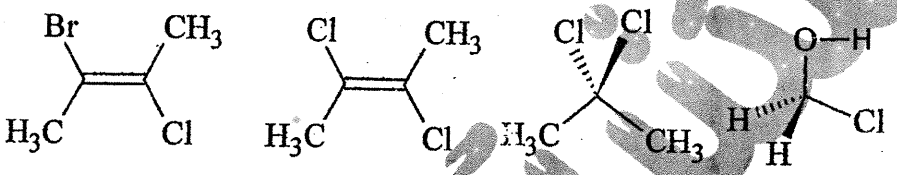
c) اكتب المؤثر الهاملتوني، ثم حدد طاقته تبعاً لطريقة الاضطراب علما أن $J_{1s1s} = \frac{5Z}{8}$ a.u.، و $J_{1s2s} = \frac{17Z}{81}$ a.u..

d) طاقة هذا الأيون تبعاً لطريقة مبدأ التغيير عند استخدام التابع الذري $\phi(i) = \sqrt{\xi^2/\pi}\exp(-\xi r)$، علما أن $\bar{E} = \xi^2 - 2Z\xi + \frac{5}{8}\xi - 0.3424$.

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

السؤال الرابع: (5 درجة)

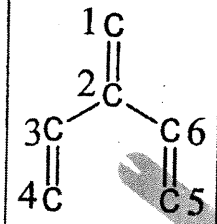
حدد عناصر التناظر للجزيئات المبينة أدناه موضحا بالرسم. ما الجزيئات المذكورة أدناه غير قطبية، ولماذا؟



السؤال الخامس: (25 درجة)

1. اكتب المؤثر الهاملتوني لجزيء أيون الهيدروجين H_2^+، كيف تعالج طريقة بورن – اوبنهايمر هذا الهاملتون عند حل معادلة شرودينغر؟

2. اكتب المعادلة التجريدية للجزيء المبين في الجدول أدناه، ثم ارسم مخطط سويات الطاقة الإلكترونية π.



g_i	x_i	C1	C2	C3	C4	C5	C6
2	-1.932	0.325	0.628	0.444	0.230	0.230	0.444
2	-1.000	0.000	0.000	-0.500	-0.500	0.500	0.500
2	-0.518	0.628	0.325	-0.230	-0.444	-0.444	-0.230
0	0.518	-0.628	0.325	0.230	-0.444	-0.444	0.230
0	1.000	0.000	0.000	0.500	-0.500	0.500	-0.500
0	1.932	0.325	-0.628	0.444	-0.230	-0.230	0.444

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

	$E_T =$			$E_d =$		
الذرة	C_1	C_2	C_3	C_4	C_5	C_6
q_j	$q_1 =$	$q_2 =$	$q_3 =$	$q_4 =$	$q_5 =$	$q_6 =$
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**: استفد من مفهوم التناظر لاختصار الحسابات.

نتمنى لكم التوفيق والنجاح

2015/01/02

مدرس المقرر

د. محمد عبد الحكيم بدوي

سلم تصحيح وقرا الكيمياء الكمومية للدورة الأولى عام ٢٠١٥ / ٢٠١٦

جواب السؤال الأول: يتضمن عشر أرقام من ١ إلى ١٠ لكل خيار صحيح ثلاث درجات وفق نموذجين A و B.

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	$9/2\ h\nu$
10	$\bar{V}=\bar{T}$

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	$9/2\ h\nu$

الجواب الثاني: الطلب ① + ② + ③ أربع درجات لكل جواب صحيح

الطلب 4 ثلاث درجات، الطلب 5 خمس درجات

١- عبارة الطاقة الأساسية للحالة المدروسة هي:

$$E_{n_x,n_y}=\frac{h^2}{8m}\left(\frac{n_x^2}{L_x^2}+\frac{n_y^2}{L_y^2}\right) \quad \cdots ①$$

٢- ويعوض العلاقة المعطاة بالفرض $L_x=2L_y$ نصبح العلاقة ①

$$E_{n_x,n_y}=\frac{h^2}{8mL_x^2}\left(n_x^2+4n_y^2\right) \quad \cdots ②$$

٣- للحالة الأولى الصفرية Z.P.E نجعل $n_x=n_y=1$ فنحصل على القيمة

$$E_{1,1}=\frac{h^2}{8mL_x^2}(1)^2+4(1)^2)=\frac{5h^2}{8mL_x^2} \quad \cdots ③$$

٤- حساب قيمة الطاقة عند $n_x=2, n_y=1$ فنحصل على:

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

وهذه القيمة غير مقبولة،

٥- عندما يتحول المستطيل إلى مربع، تصبح عبارة الطاقة $L_x=L_y=L$

$$E_{n_x,n_y}=\frac{h^2}{8mL^2}\left(n_x^2+n_y^2\right) \quad \cdots ⑤$$

٥- حساب قيمة الطاقة في المربع.

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

عند القيمة متعددة والتعدد هو 2 بسبب الحالتين (2,1) و (1,2) بالنسبة (n_x,n_y)

مكتبة الرحمن

سلم 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 بالالكترونات، 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:

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

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 التغيير نحسب أولاً قيمة معامل التغيير ξ بتطبيق شرط النهاية الصغرى، أي بجعل مشتق الأول لعبارة الطاقة المعطاة في نص المسألة بالنسبة إلى هذا المعامل مساوياً الصفر، أي أن:

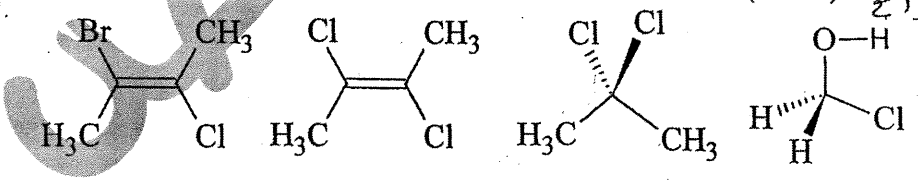
$$\frac{d\bar{E}}{d\xi} = \bar{E} = 2\xi - 2Z + \frac{5}{8} = 0 \Rightarrow \xi = Z - \frac{5}{16} = 4 - \frac{5}{16} = 3.688 \text{a.u.}$$

ثم نعوض هذه القيمة فنحصل على طاقة الجمّة 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 الخامس: (5 درجة):



C_1: E $\quad C_{2h}$= E C_2 i σ_h $\quad C_{2v}$= E C_2 2σ_v $\quad C_S$ = E σ

إن جميع الجزيئات قطبية ما عدا الجزيء trans-$ClCH_3C{=}CCH_3Cl$ 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 – أوبنهايمر على أنه لما كانت النوى أثقل بكثير من الإلكترونات، أي أبطا بكثير من سرعة الإلكترونات، فيمكن دراسة حركة الإلكترونات وحركة النوى بصورة مستقلة وذلك بإهمال جميع الحدود المتعلق 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:

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

وبعد حل الجزء المتعلق بحركة الإلكترونات، نأخذ المتعلق بحركة النوى (الذي أهمل في البداية)، ونقوم بحل معادلة شرودينغر الموافقة، ويضم الحل الطاقة الداخلية للجملة، وهي تمثل الطاقة الاهتزازية والطاقة الدورانية؛ إذ يمكن أيضا 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:

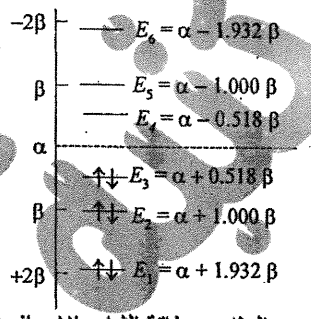
$$\psi_{total}=\psi_e\psi_v\psi_r$$

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

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

2. تكتب المعادلة التجريدية والتوزع الإلكتروني على النحو الآتي:

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



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

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

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

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

$$F_j=\sqrt{3}-\sum_s P_{js}$$

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 C_1، وتليها الذرتين C_4 وC_5، وتصبح الدليل أقل عند الذرات المركزية. أما عند مقارنة رتب الروابط فنلاحظ أن للرابطة المضاعفة رتب اكبر مما للرابط الأحادية، أي أنها أقصر من الروابط الأحادية وهذا يتوافق مع البنية المقترحة.

د. محمد عبد الحكيم بدوي

جامعة تشرين
كلية العلوم – قسم الكيمياء

المدة : ساعتان
الدرجة : 100

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

السؤال الأول : ضع إشارة (√) أمام العبارة الصحيحة وإشارة (X) أمام العبارة الخاطئة , ثم صحح العبارات الخاطئة . **20 درجة**

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

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

4- يتطابق الهزاز الكموسي 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 أعدادصحيحة (√)
6- يميز الطيف الذري أو الجزيئي المادة المسببة له. (√)
7- وجود التواتر الحرج υ_0 في المفعول الكهرضوئي يدعم النظرية الموجية للضوء. (X)

السؤال الثاني : اختر الإجابة الصحيحة فيما يلي موضحاً سبب اختيارك . **15 درجة**

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 .
ه -- لايوجد جواب صحيح .

4- إن توالد سوية الطاقة ذات العدد الكمومي $J = 3$ هو .
11 , 6 , 10 , 25 , [7]

5- إن قيمة التنعدد لسوية الطاقة (2 , 2 , 1) في حفرة كمون ثلاثي الأبعاد هي .
14 , 13 , 6 , [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 التعدد للحالة السا بقة , وماهوالمعنى الفيزيائي للتعدد في هذه الحالة .
3- ماهي العلاقة بين طول متجهة العزم الزاوي وقيمة العدد الكمومي المداري l .
4- ما قيم طويلة متجهة العزم الزاوي الممكنة في الواحدات الذرية .

يتبع في الصفحة الثانية

د. سليمان محمد

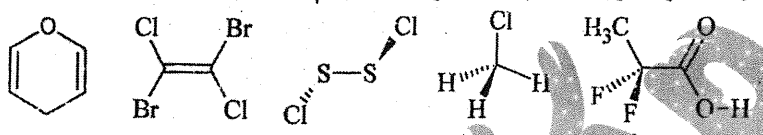
السؤال الرابع: (20 درجات): أجب عن الأسئلة الآتية:

اكتب المؤثر الهاملتوني والتابع الموجي الموافق لذرة الليتيوم Li(Z=3). المطلوب:

1. حساب الطاقة الإلكترونية التجريبية لهذه الذرة إذ علمت أن طاقتي التأين الأول والثاني تساويان 0.198 و2.778 بالواحدة الذرية (a.u.) على الترتيب.
2. حساب الطاقة الإلكترونية للذرة نفسها والخطأ المئوي 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 علما أن $E^{(1)} = W^{(1)} = J_{1s1s} + 2J_{1s2s}$ ، $J_{1s1s} = \frac{5Z}{8}$ a.u. ، $J_{1s2s} = \frac{17Z}{81}$ a.u.

السؤال الخامس: (5 درجة)

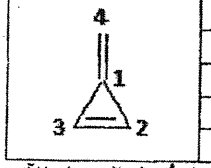
حدد عناصر التناظر للجزيئات المبينة أدناه موضحا بالرسم.



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 $E_\pm$ ، والتابعين الموجبين الموافقين $\psi_\pm$؟

2. اكتب المعادلة التجريدية للجزيء المبين في الجدول أدناه، ثم ارسم مخطط سويات الطاقة الإلكترونية π:



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

اكتب **فقط** العلاقات الضرورية لتحدد كل من E_π ، و E_d ، و q_j ، و P_{jk} ، و F_j ، ثم أكمل الجدول الآتي:

الذرة	E_π =		E_d =	
	C_1	C_2	C_3	C_4
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.

2015/09/03 نتمنى لكم التوفيق والنجاح

مدرس المقرر

د. محمد عبد الحكيم بدوي

سلم تصحيح وقرر الكيمياء الكمومية
لطلاب السنة الثانية الدورة الإضافية 2015

السؤال الأول:

ا- العبارات ① + ⑤ + ⑥ صحيحة

ب- العبارات ② + ④ + ③ + ⑦ خاطئة

ج- لكل عبارة علامتان لتحديد إشارة الصح والخطأ.

د- تصحيح العبارة الثانية والبقية درجة واحدة لكل تصحيح

ه- تصحيح العبارة ③ + ④ درجتان لكل تصحيح

و- إذا صحح الطالب العبارة وكتب معلومات متناقضة لا ينال علامة التصحيح المذكورة أعلاه.

السؤال الثاني.

ا- التابع: $\psi = \sin x$ هو تابع موجي يحقق شروط التابع المقبول فيزيائياً. فهو وحيد القيمة ومحدود القيمة ومستمر ومستمر.

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

لأن $d/dx\,\psi = \alpha \cdot \psi$

فهو يحقق شروط التابع الخاص.

ج- لا يوجد جواب صحيح لأن جميع الأجوبة غير محققة في الهزاز التوافقي

4- عندما $J = 3$ تتوالى الحالة الطاقية $g = 2J+1 = 7$

5- قيمة التعدد لحالة الطاقة $(1,2,2)$ في غياب الحقل تساوي 3 لأن $(1,2,2)$ $(2,1,2)$ $(2,2,1)$

السؤال الثالث:

① قيمة الطاقة عندما $n=4$

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

$Z_H = 1$

$n = 4$

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

② قيمة التعدد $= n^2 = (4)^2 = 16$

التعدد معدوم حين يأخذ عدد الحالات الذرية التي تقابل قيمة واحدة للطاقة

③ حلول عتبة العزم الزاوي $\sqrt{l(l+1)}\hbar$

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

④ $\sqrt{12}$ ، $\sqrt{6}$ ، $\sqrt{2}$ ، 0

نحصل على القيم أعلاه بتعويض قيم L في العلاقة

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

مكتبة الوطن
اللاذقية – مدخل سيبرو – مقابل باب السكه الجامعي
AL Watan UNIVERSITY SERVICES

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

جواب السؤال الرابع: 20 درجات

يكتب المؤثر الهاملتوني والتابع الموجي على النحو الآتي:

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

1. تحسب طاقة الذرة التجريبية بالعلاقة الآتية:

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

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

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

وبالتعويض في العلاقة السابقة نجد أن:

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

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

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

ويبلغ الخطأ المئوي المطلق القيمة:

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

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

$$\xi_{1s}=Z-\sigma=3-0.30=2.70,\ \xi_{1s}=Z-\sigma=3-2\times0.85=1.30$$

$$E_{app}=-\tfrac{1}{2}\left[2(\tfrac{\xi_{1s}}{n_1})^2+(\tfrac{\xi_{2s2p}}{n_2})^2\right]=-\tfrac{1}{2}\left[2(\tfrac{2.7}{1})^2+(\tfrac{1.3}{2})^2\right]=-7.501\ \text{a.u.}$$

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

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

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

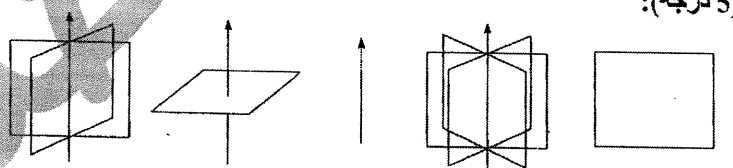
وبالتعويض في عبارة الطاقة المعطاة في نص المسألة نجد أن $\bar{E}=-7.0247$ a.u. و $\%E=6.04\%$.

(d) تحسب الطاقة حسب طريقة الاضطراب بالعلاقة الآتية:

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

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

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

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

طاقة الرابط $E_+ = \dfrac{H_{AA}+H_{AB}}{1+S_{AB}}$

طاقة مضاد الربط $E_- = \dfrac{H_{AA}-H_{AB}}{1-S_{AB}}$

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

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

② المعادلة التجريبية

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

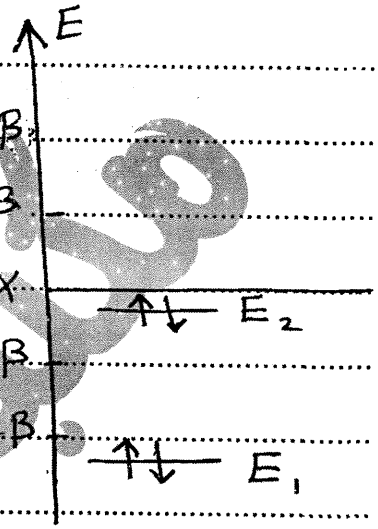
نقسم على β ثم نفرض أن $x = \dfrac{\alpha-E}{\beta}$

مكتبة الوطن

مكتبة الوطن
اللاذقية – مدخل سيبرو – مقابل باب السكن الجامعي
AL Watan UNIVERSITY SERVICES

AL Watan

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



$E = \alpha - x\beta$

$E_1 = \alpha + 2{,}17\beta$

$E_2 = \alpha + 0{,}311\beta$

$E_4 = \alpha - \beta$

$E_5 = \alpha - 1{,}481\beta$

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

$$= 2E_1 + 2E_2 = 2(\alpha + 2{,}17\beta) + 2(\alpha + 0{,}311\beta)$$

$$E_{Tot} = 4\alpha + 4{,}962\beta$$

$E_L = n\alpha + 2\bar{n}\beta$

n عدد ذرات الزمرة

$\bar{n}$ عدد الروابط المضاعفة

مكتبة الوطن
اللاذقية – مدخل سيرو – مقابل باب السكن الجامعي
AL Watan UNIVERSITY SERVICES

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

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

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

$$q_{r_1} = 2C_{11}^2 + 2C_{12}^2 = 2(0,6116)^2 + 2(0,253)^2 = 0,876$$

$$q_{r_2} = 2C_{21}^2 + 2C_{22}^2 = 2(0,522)^2 + 2(-0,368)^2 = 0,8176$$

$$q_{r_3} = 2C_{31}^2 + 2C_{32}^2 = 2(0,522)^2 + 2(-0,368)^2 = 0,817$$

$$q_{r_4} = 2C_{41}^2 + 2C_{42}^2 = 2(0,281)^2 + 2(0,815)^2 = 1,488$$

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

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

مكتبة الوطن
اللاذقية – مدخل سيرو – مقابل باب السكن الجامعي
AL Watan UNIVERSITY SERVICES

$$P_{12} = 2(0,6116)(0,5227) + 2(-0,368)(-0,368)$$
$$= 0,452$$

$$P_{13} = 2(0,6116)(0,5227) + 2(-0,368)(0,368)$$
$$= 0,452$$

$$P_{14} = 2(0,6116)(0,2818) + 2(0,2536)(0,815)$$
$$= 0,758$$

$$P_{23} = 2(0,5227)(0,5227) + 2(-0,368)(-0,368)$$
$$= 0,8176$$

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

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

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

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

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

مكتبة الوطن
اللاذقية – مدخل سيرو – مقابل باب السكه الجامعي
AL Watan UNIVERSITY SERVICES

جامعة تشرين-كلية العلوم
قسم الكيمياء

الدرجة : 100
المدة : ساعتان

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 الإيجاب .

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 وضع في صندوق متوازي مستطيلات أبعادة $L_x = L_y = L_z/2$

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 $E_n=(n+1/2)h\upsilon$ و المطلوب :

1) ماذا تمثل العلاقة السابقة .
2) ماهي طاقة الوضع الصفري .
3) هل سويات الطاقة التي تعبر عنها العلاقة السابقة مكممة , و هل هي متوالدة.
4) احسب قيمة الطاقة الكلية عند n=2 , و ما هي الطاقة الكامنة المتوسطة و الطاقة الحركية المتوسطة.

مع تمنياتي لكم بالنجاح

د.سليمان محمد

2015/7/14

يتبع في الصفحة الثانية

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:

a) اكتب معين سلايتر، ثم حدد طاقة هذه الذرة وفقا للشحنة النووية الفعالة. لماذا يعد التابع الموجي المضاد للتناظر بالنسبة إلى استبدال الإحداثيات السبينية والمدارية تابعاً حقيقاً للذرة؟

b) 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؟

c) 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 الأيون الكلية، علماً أن $J_{1s1s} = \frac{5Z}{8}$ a.u. ، $J_{1s2s} = \frac{17Z}{81}$ a.u. .

السؤال الخامس: (8 درجات)

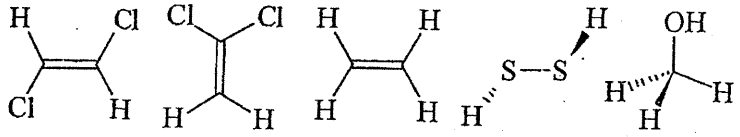
عند اختبار التابعين $\phi = \sqrt{\xi^3/\pi}\exp(-\xi r)$ و $\phi' = \sqrt{\xi^3/\pi}\, r\exp(-\xi r)$ من أجل دراسة أيون الليتيوم $Li^{2+}(Z=3)$، وجد أن $\bar{E} = \xi^2/2 - Z\xi$ و $\bar{E}' = \frac{1}{6}(\xi^2 - 3Z\xi)$، والمطلوب:

a) احسب طاقة هذا الأيون من أجل كل تابع؛ أي $\bar{E}$ و $\bar{E}'$.

b) احسب طاقة هذا الأيون الحقيقة $E_{exp.}$، ثم قارنها مع القيمتين المحسوبتين، وحدد الخطأ المئوي المطلق لكل قيمة محسوبة مبيناً التابع المقبول فيزيائياً.

السؤال السادس: (8 درجات)

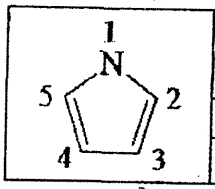
حدد عناصر التناظر للجزيئات المبينة أدناه موضحا بالرسم. ما الجزيئات المذكورة أدناه غير قطبية، ولماذا؟



السؤال السابع: (20 درجة)

1. 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 للربط إذا علمت أن $H_{AA} = -0.972$ a.u., $H_{AB} = -0.699$ a.u., $S_{AB} = 0.586$ a.u. . ما المعنى الفيزيائي للمدارين الرابط والمضاد للربط؟

2. اكتب المعادلة التجريدية للجزيء المبين في الجدول أدناه، ثم ارسم مخطط سويات الطاقة الإلكترونية π، علما أن $h_N = 1.5$ و $k_{CN} = 0.8$.



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

اكتب **فقط** العلاقات الضرورية لتحدد 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

نموذج تصحيح وزارة المياه الكويتية
للدورة الثانية لعام 2015

الجواب الأول: ١٦ درجة ، ٨ درجات لـ p و ٨ لـ ت

أ- التابعان ψ_3 ، ψ_4 يحققان شروط التابع الموجي (المقبول فيزيائياً) ٤ د
التابعان ψ_1 ، ψ_2 لا يحققان شروط التابع الموجي (المقبول فيزيائياً) ٤ د
السبب أن التابعان غير منتهيان عندما $x \to \pm\infty$. ٤ د

ب- التابعان ψ_1 ، ψ_3 لا يعتبران توابع خاصة للمؤثر d/dx ٤ د
التابعان ψ_2 ، ψ_4 يعتبران تابعان خاصان للمؤثر d/dx ، ٤ د
والقيمة الخاصة لـ ψ_2 هي i ٤ د
والقيمة الخاصة لـ ψ_4 هي 4 ٤ د

المجموع ١٦ درجة

الجواب الثاني ٢٠ درجة

(١) عبارة الطاقة الأساسية هي $E_n = (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)\frac{h^2}{8mL^2}$ ٣ درجات

(٢) طاقة نقطة الصفر حيث عندما $n_x = n_y = n_z = 1$ وتساوي ،
$E_{1,1,1} = (1^2+1^2+1^2)\frac{h^2}{8mL^2} = \frac{3h^2}{8mL^2}$ ٣ درجات

(٣) $E_{1,1,2} = \frac{6h^2}{8mL^2} = \frac{3h^2}{4mL^2}$ ٣ درجات

(٤) نجمع مستويات الطاقة السابق تحديدها والتحدد هو (٣)
ومعنى هذا التحدد فيزيائياً أنه يوجد ثلاث توابع موجية مختلفة تقابل قيمة واحدة للطاقة .

(٥) $E_n = \left(\frac{(1)^2}{L_x^2} + \frac{(1)^2}{L_y^2} + \frac{(2)^2}{L_z^2}\right)\frac{h^2}{8m}$ ٦ درجات

درجتان

يتبع الجواب الثاني

بما أن $L_z = 2L_x$ و $L_y = L_x$ نعوض في عبارة الطاقة الأساسية فنجد 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 فنجد عبارة الطاقة الأساسية في شكلها الأخير هي

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

٣ درجات

المجموع ٢٠ درجة

الجواب الثالث:

① - العلاقة السابقة تمثل مستويات الطاقة للمذبذب التوافقي الكمومي.

درجتان

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

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

٣ درجات

③ - هي طاقة مكممة لأنها تتغير بتغير العدد n الذي يأخذ قيم طبيعية لكن مستوى الطاقة غير متوالد، لأنه لا يوجد أي تابع موجي واحد يقابل قيمة الطاقة لكل عدد n.

٣ درجات

④ عندما $n = 2$ نجد الطاقة الكلية هي:

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

درجتان

وبما أن الطاقة الكلية تساوي مجموع الطاقتين الحركية والكامنة. وهما متساويتان بالنسبة للطاقة الكلية.

أي أن:

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

٤ درجات

أو إذا كتب الطالب أن:

القيمة الحركية الوسطى $\bar{T} = \frac{E_2}{2} = \frac{5}{4} h\nu$ ② درجة

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

مجموع الدرجات ١٤ أربع درجة

السؤال الرابع : (أجل)

a) يكتب معين سلاتير لذرة الكربون على النحو التالي

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{61}}$$

$1\bar{s}(1)$	$1\bar{s}(2)$	$1\bar{s}(3)$	$1\bar{s}(4)$	$1s(5)$	$1s(6)$
$1s(1)$	$1s(2)$	$1s(3)$	$1s(4)$	$1s(5)$	$1s(6)$
$2\bar{s}(1)$	$2\bar{s}(2)$	$2\bar{s}(3)$	$2\bar{s}(4)$	$2\bar{s}(5)$	$2\bar{s}(6)$
$2s(1)$	$2s(2)$	$2s(3)$	$2s(4)$	$2s(5)$	$2s(6)$
$2p_x(1)$	$2p_x(2)$	$2p_x(3)$	$2p_x(4)$	$2p_x(5)$	$2p_x(6)$
$2p_y(1)$	$2p_y(2)$	$2p_y(3)$	$2p_y(4)$	$2p_y(5)$	$2p_y(6)$

نحسب الشحنة النووية الفعالة لكل مدار (أدنى طاقة)

$$\varepsilon_{1s} = Z - \sigma = 6 - 0,30 = 5,7 \text{ au}$$

$$\varepsilon_{2s,2p} = Z - \sigma = 6 - (3 \times 0,35) + (2 \times 0,85) = 3,25 \text{ au}$$

$$E = 2E_1 + 4E_2$$

$$E_1 = -\frac{1}{2}\left(\frac{6}{1}\right)^2 = \qquad E_2 = -\frac{1}{2}\left(\frac{6}{2}\right)^2 = 0$$

يعبر تابعاً دقيقاً حقيقياً ذلك لأن قرب هذا التابع يعطي توزع الكثافة الاحتمالية حول النواة بصورة أساسية وبحيث يتطابق مع التوزع المكتشف

b) يكتب المؤثر الهاملتوني على النحو التالي

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

ثم نجري هذا المؤثر والذي يصبح بالشكل

مكتبة الوطن
AL Watan
مدخل سيبرو – مقابل باب السكه الجامعي

AL Watan

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

يمثل $\hat{H}'$ الذي يمثل قوى التنافر في مبدأ تقريب الإلكترونات المستقلة فيصبح الهاملتون على الشكل التالي

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

ويمكن حساب قيمة الطاقة لهذه الذرة وفقاً لهذا المبدأ ثم نطبق الاستنتاج كما يلي

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

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

$1 \quad 1 \quad 1 \quad 2 \quad 2 \quad 2$

بما أن $Z = 6$ حينئذ يكون $E = -54\ au$

وتكون قيمة هذه الطاقة أقل لأننا أهملنا قوى التنافر وبذلك فهي قيمة موجبة لذلك تكون الطاقة المحسوبة بهذه الطريقة أقل من القيمة الحقيقية

عندما نقوم بنزع ثلاثة الكترونات تصبح الذرة شبيهة بذرة الليثيوم

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

أو يكتب بالشكل

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

نجد المؤثر الهاملتوني كما يلي

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

مكتبة الوطن
مدخل سبيرو – مقابل باب السكه الجامعي
AL Watan
UNIVERSITY SERVICES

ويصبح التابع الموجي في هذه الحالة على الشكل التالي

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

وتحسب الطاقة وفق أحد اضطراب عادي

$E_{tot} = E^0 + W^1$

$E^0 = E_1 + E_2 + E_3 = -\frac{1}{2}\frac{Z^2}{n^2} - \frac{1}{2}\frac{Z^2}{n^2} - \frac{1}{2}\frac{Z^2}{n^2} = -40,5\ au$

$Z = 4$ $\quad n = 1$ $\quad n = 1$ $\quad n = 2$

المقصود بـ n^2 أو $q = n^2$

هي القيمة التي نعوض بدلاً عن n

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

$= \langle 1S(1)\ 1S(2)\ 2S(3) | \frac{1}{r_{12}} + \frac{2}{r_{13}} | 1S(1)\ 1S(2)\ 2S(3) \rangle$

$= \langle 1S(1)\ 1S(2) | \frac{1}{r_{12}} | 1S(1)\ 1S(2) \rangle + 2\langle 1S(1)\ 2S(3) | \frac{1}{r_{13}} |$

$1S(1)\ 2S(3) \rangle$

$= J_{1S\,1S} + 2J_{1S\,2S}$

نعوض كلاً من $J_{1S\,1S}$ و $J_{1S\,2S}$ بقيمهما فيكون

$W^{(1)} = \frac{5Z}{8} + 2 \times \frac{17Z}{81} = 6,27\ au$

$\Rightarrow E_{tot} = -40,5 + 6,27 = -34,33\ au$

* السؤال الخامس: الحل:

a) حساب قيمة الطاقة لكل من التابعين السابقين نعوض قيمة Z في العلاقة ثم نشتق العلاقة بالنسبة لعامل التغيير ζ ونجعل قيمة المشتق مساوي الصفر ثم نوجد قيمة عامل التغيير أي أن

مكتبة الوطن
AL Watan UNIVERSITY SERVICES
مدخل سبيرو – مقابل باب السكن الجامعي

$\frac{dE_1}{d\xi_o} = 0$

بالنسبة للعلاقة الأولى

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

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

نعوض قيمة معامل التقريب في علاقة الطاقة لنحصل على

قيمة الطاقة الوسطية $\xi_o = 3 \Rightarrow \bar{E} = \frac{1}{2}(3)^2 - 3(3) = -4,5\ au$

وبالنسبة لعلاقة الطاقة الثانية

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

$\frac{dE'}{d\xi_o} = 0 \Rightarrow \frac{1}{6}(2\xi_o - 9) = 0 \Rightarrow \xi_o = 4,5$

نعوض ξ_o في $\bar{E}'$ فيكون

$\bar{E}' = \frac{1}{6}\left(\left(\frac{9}{2}\right)^2 - 9\left(\frac{9}{2}\right)\right) = -3,38\ au$

b) نحسب قيمة الطاقة لهذا الأيون الذي يحتوي على إلكترون واحد

يعد شبيه بالهيدروجين

$E_{exp} = -\frac{1}{2}\frac{Z^2}{n^2} = -\frac{1}{2}\frac{(3)^2}{(1)^2} = -4,5\ au$

$E \geq E^0$ وبما أن القيمتان المحسوبتان تحققان الشرط

فإن التابعين مقبولين فيزيائياً ولكن إن التابع الأول

أفضل بسبب تطابق القيمتين المحسوبتين من الحقيقية والوسطية

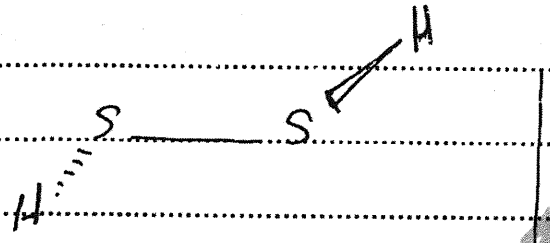
نحسب الخطأ المئوي من العلاقة

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

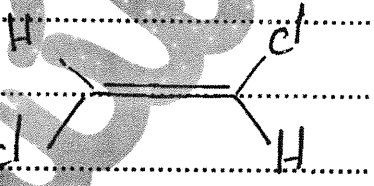
مكتبة الوطن
مدخل سيبرو – مقابل باب السكن الجامعي
AL Watan

* السؤال السادس:

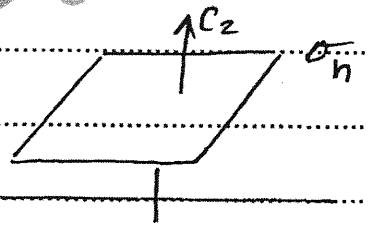
الحل

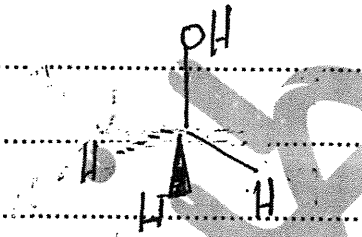


$C_2 : EC_2$

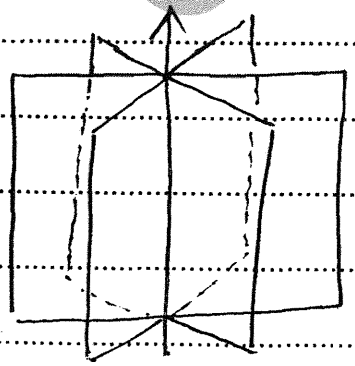


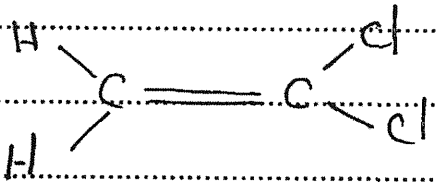
$C_{2h} : E\, C_2\, i\, \sigma_h$



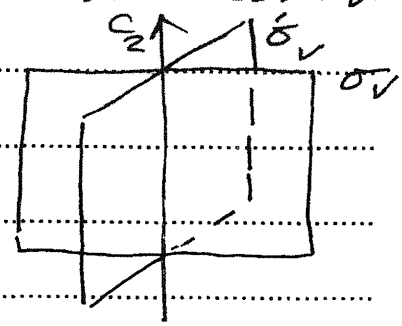


$D_{2h} : E\, C_3\, 3\sigma_v$





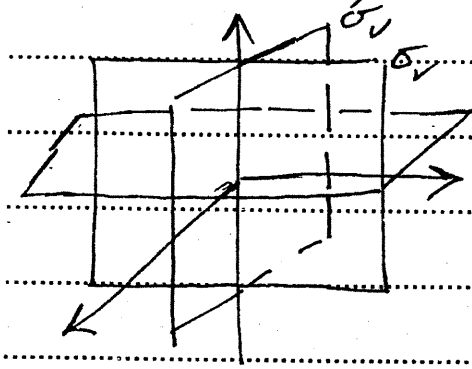
$C_{2v} : E\, C_2\, 2\sigma_v$



مكتبة الوطن

مكتبة الوطن
مدخل سبيرو – مقابل باب السكن الجامعي
AL Watan UNIVERSITY SERVICES

AL Watan



D2h: E 3C2 i 3σh 2Sn

* السؤال السابع

(1) يعطى الهاملتون الموافق لجزيء متعدد النوى بالعلاقة التالية

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

إذ يمثل الحد الأول بين قوسين متوسطين مؤثر الطاقة الحركية للإلكترون والنواتين في حين يمثل الحد الثاني والثالث مؤثر الطاقة الكامنة بين الإلكترونين والنواتين والحد الرابع مؤثر الطاقة الكامنة بين النواتين والحد الأخير الطاقة الكامنة بين الإلكترونات

ينص تقريب بورن - أوبنهايمر على أنه طالما كانت النوى أثقل بكثير من الإلكترونات أي أبطأ بكثير من سرعة الإلكترونات فيمكن دراسة حركة الإلكترونات وحركة النوى بصورة مستقلة وبذلك يصبح هذا الهاملتون على الشكل الآتي:

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

تكتب علاقة المدارات الجزيئية الرابطة وغير الرابطة على النحو التالي

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

مكتبة الوطن
مدخل سيبرو – مقابل باب السكن الجامعي
AL Watan

AL Watan

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

نلاحظ أن $E_- > E_+$ أي طاقة المدار الرابط أصغر من طاقة المدار المضاد للرابط

إن المعنى الفيزيائي للمدار الرابط هو أن الكثافة الإلكترونية تكون متوزعة حول النواتين بصورة متساوية مما يميز جزيء الهيدروجين بنقاط عندئذ إن النواتين متقربين أو مرتبطين لذلك يقال عن المدار إنه رابط في حين تكون الكثافة الإلكترونية بالنسبة للمدار المضاد للرابط متوزعة على كل ذرة وبعيدة عن بعضها لذلك يقال عن المدار أنه مضاد للرابط

ج) نكتب المعادلة التجريبية للجزيء المعطى على الشكل 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 الشكل

حيث الطاقة الكلية عن المقانون

$$E_+ = \sum_{i=1}^{3} g_i E_i = 2E_1 + 2E_2 + E_3$$

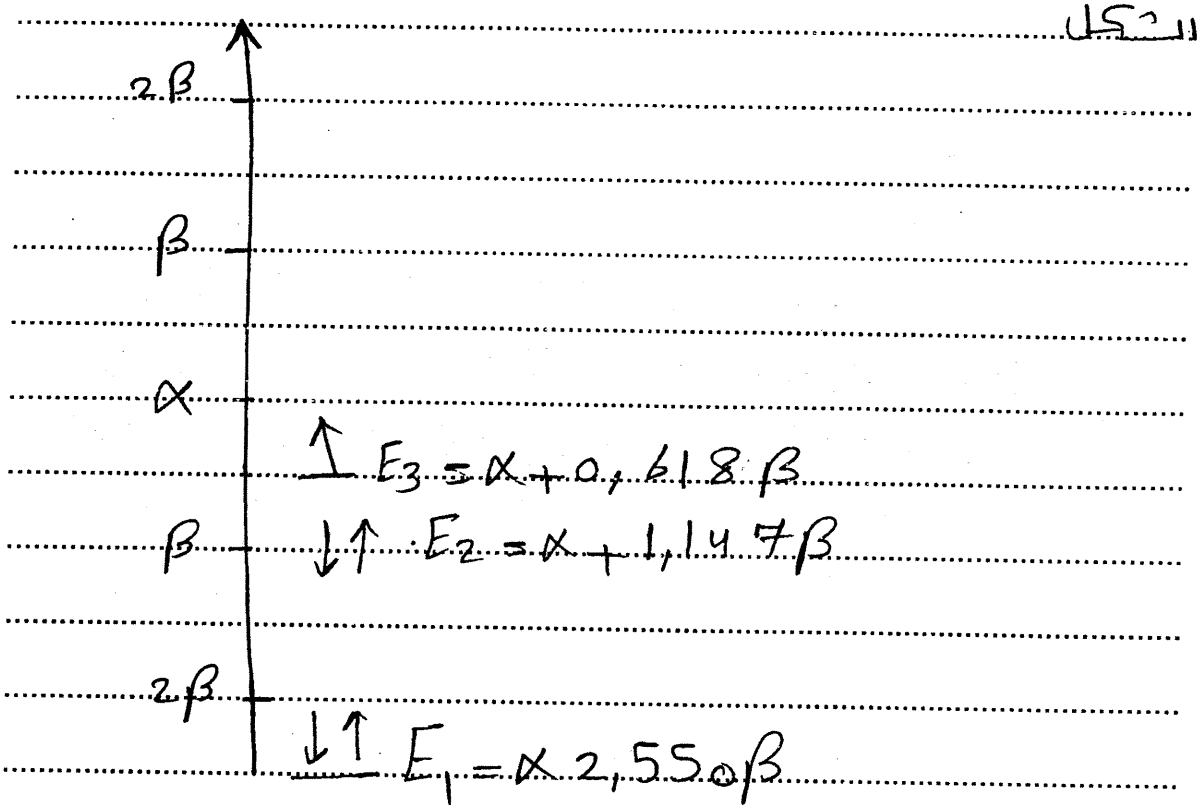
$$\Rightarrow$$

$$E_+ = 2(\alpha + 2,55\beta) + 2(\alpha + 1,147\beta) + \alpha + 0,618\beta = 5\alpha + 8,012\beta$$

مكتبة الوطن
مدخل سيبرو – مقابل باب السكن الجامعي
AL Watan

AL Watan

الشكل



أما طاقة الثنائي الإضافة فتحدد من العلاقة

$Ed = Et - El$

حيث أن Ee تحسب من العلاقة

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

n عدد الروابط الإضافية ← n' عدد الذرات

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

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

والذي يقوم بحساب الطاقة الإلكترونية المتمركزة على كل ذرة والتي هي q حيث تحسب بالنسبة لكل ذرة على حدا كما يلي

في البداية نكتب القانون الكامل بوجود 3 ذرات

$$q_j = \sum_{i=1} q_i C_{ij}^2 \; ; \; d = 2c_{1j}^2 + 2c_{2j}^2 + c_{3j}^2$$

مكتبة الوطن
مدخل سيبرو – مقابل باب السكن الجامعي
AL Watan UNIVERSITY SERVICES

$E_{tot} = 5\alpha + 8{,}012\beta$		$E_d = 4{,}012\beta$	
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	0,948	$P_{45} = 0{,}531$	0,479
C5	0,687	$P_{51} = 0{,}50$	0,701

إن الغاية من تحديد هذه الطاقات معرفة البنية المتمركزة على كل ذرة وبذلك تحديد المراكز الفاعلة كيميائياً هذا من ناحية ومن ناحية أخرى يمكننا من دراسة الروابط تحديد أطول الروابط وقصارها.

مكتبة الوطن
مدخل سبيرو – مقابل باب السكن الجامعي
AL Watan UNIVERSITY SERVICES