

קורס ספקטרוסקופיה, תשע"ג

פרופ' רון נעמן

מיפוי תכנים של הרצאה 13

המיפוי נעשה על ידי מירב דינור בהנחיית פרופ' רון בלונדר

תוכן	זמן
הבדל בין מכניקה קלאסית לקוונטים במכניקה קוונטית האנרגיה רציפה במערכת קוונטית יש מערכת של אנרגיות שבהן המערכת יכולה להמצא ובניהן היא לא יכולה להיות. ע"פ המכניקה הקלאסית כל החומרים היו צריכים להיות שחורים כיון שהם יכולים לבלוע את כל האור בכל מקום.	0:41-1:30
כל אור שפוגע היה מותר לבלוע. הסיבה שלחומרים יש צבע היא בגלל שלחומר יש מעברים מוגדרים שרק בהם הוא יכול לבלוע.	1:36-2:04
דבר נוסף שננובע הוא חקי הברירה, ז"א מעברים יכולים להיות מותרים / אסורים כתלות בסימטריה שלהם. דבר זה מקטין עוד יותר את אפשרות הבליעה ומאפשר לקבל מעין ספקטרום טביעת אצבעות עבור מולקולה.	2:16-3:02
מצבי אוסילטור הרמוני + ויברציות (ציור על הלוח) מה ההסתברות למצוא חלקיק בוברציה מסוימת? ההסתברות פרופורציונית ל ψ^2 .	3:15-4:57
הבדל בין אוסילטור הרמוני למכניקה קלאסית- נדנדה איפה הנדנדה נמצאת רוב הזמן? בקצוות (הסבר) אוסילטור קלאסי נמצא רוב הזמן בקצוות.	4:57-6:15
אוסילטור קוונטי לא נמצא בקצוות אלא במרכז בערך בעוד שמצב יסוד אנרגטי בקלאסי הוא בתחתית הבור, בקוונטי הוא לא בתחתית אלא מעליה. בגלל עיקרון האי ודאות האלקטרון לא יכול להיות במקום ספציפי אחד כיון שאין לדעת מיקום ואנרגיה בדיוק.	6:55-7:31
במצב היסוד במערכת קוונטית יש לה אנרגיה של $1/2 \hbar \omega$	7:41-7:53
במערכת קוונטית במצב היסוד עדיין יש בה אוסילציה, היא תמשיך להתנדנד גם ללא ויברציה, בעוד שמערכת קלאסית לא.	7:59-8:27
תורת הקוונטים נכונה. אם כן כיצד במערכת קלאסית מקבלים התנהגות שונה?	9:18-9:41
לדוג' אם מניחים כדור הוא לא זז.	
חזרה על השאלה	10:16-10:29
מה קורה באוסילטור הרמוני כאשר המסה גדלה?	11:30-11:35
כאשר המסה גדלה המרחק בין המצבים קטן עד לרצף ווהתנהגות היא כמו מכניקה קלאסית	11:40-11:56
מערכת קוונטית היא קוונטית רק בגלל שהיא קלה. חלקיקים כבדים מאוד, יתנהגו קלאסית בגלל שהרווחים באנרגיה קטנים מאוד.	12:40-12:55
השאלה היא באיזו טמפ' מדובר? בטמפ' החדר כאשר המרחק בין המצבים קטן מ KT זה נקרא מצבים קרובים. זה נובע מכך שככל שמקררים את המערכת היא הופכת ליותר קוונטית חלקיקים לא מאוד כבדים שבטמפ' החדר מתנהגים קלאסית, כשמקררים יתנהגו קוונטית.	13:04-13:44
השאלה היא האם ניתן להבדיל בין שני המצבים? קרובים יחסית למה?	13:53-14:07
האם המערכת היא קוונטית- תלוי במסה ותלוי בטמפ'. כאשר מעלים	14:16-15:58

תוכן	זמן
את הטמפ' זה מספיק להתנהג קוונטית. במולקולות גדולות צריך לקרר מאוד כדי להפוך לקוונטי, ולפעמים לא ניתן להפוך את המערכת לקוונטית.	
ע"פ נוסחה ניתן לראות שככל שהמסה קטנה המרחק בין הויברציות גדל.	16:10-16:46
במערכת גדולה, מעלים את הטמפ', יותר ויברציות מאוכלסות ואז האנרגיות הויברציוניות והאלקטרוניות מתערבבות, קירוב בורן אופנהיימר מתקלקל. לא ניתן להבדיל בין מעברים ויברציוניים, והמערכת היא קלאסית.	17:12-17:42
נתונה מולקולה- איך אפשר לדעת איזה מעברים אלקטרוניים אסורים ואיזה מותרים?	18:39-18:46
דבר ראשון, בהנתן מולקולה צריכים להגדיר לאיזה חבורת סימטריה היא שייכת.	19:17-19:58
כאשר קובעים את חבורת הסימטריה, מחפשים את מצב היסוד שהוא הסימטרי ביותר.. המעברים המותרים הם להצגות שיש להם סימטריה כמו $x y z$	21:14-21:44
מדוע יש חוקי ברירה? למומנט הדיפול יש סימטריה כמו ל $X Y Z$ כדי שהאינטגרל לא יהיה 0 למצב המעורר צריכה להיות סימטריה כמו למומנט הדיפול.	31:27-32:08
מולקולה בעלת 4 אטומים עם סימטריה של D_{1h} ואטום אחד הוחלף. האם הצפי הוא שיהיו יותר / פחות מעברים?	37:10-37:30
לדוג'- מולקולת בנזן שבה פחמן אחד הוחלף ל C^{13}	37:37-37:57
בסימטריה גבוהה יש הרבה פעולות סימטריה, יש ניוון טוב. כאשר יש פחות סימטריה, יש פחות פעולות סימטריה, ויהיו יותר מעברים.	38:12-38:59
בנזן- המון פעולות סימטריה, המון סימטריות שונות למצבים שינינו את כל האטומים, כל אחד למשהו אחר. נשארה רק פעולת הזהות. כל המצבים יכנסו לאותה פעולת הסימטריה, ולכן כל המעברים מותרים.	39:12-40:12
כל המצבים חייבים להיות שייכים לאותה הסימטריה.	40:18-40:27
סימטריה היא כן / לא- לא כמותית יכול להיות מעבר מותר אבל חלש, הסימטריה היא לא 0 אבל מספר קטן.	41:05-41:45
H_2 מולקולה ללא מומנט דיפול, יש פלוקטואציות רגעיות בענן האלקטרוניים. ולכן המעבר מותר. לא צריך מומנט דיפול קבוע למעבר אלקטרוני, רק למעבר ויברציוני.	42:37-43:09
מעבר ויברציוני הוא מעבר שמתבצע בגלל השינוי במומנט הדיפול בגלל הויברציה, ואם אין מומנט דיפול, אין מה שישתנה.	43:16-43:40
CO_2 שתי ויברציות יהיו קשורות למומנט הדיפול, שתיהן יצרו מומנט דיפול ולכן תהיה בליעה מאוד חזקה.	44:27-44:47
רק במולקולות דו אטומיות המונוקלואריות אין בליעה ב אינפרא אדום של ויברציות.	44:54-45:03
עוצמת הפיזור תלויה בשני פרמטרים- אורך הגל, וגדל החלקיק המפזר.	45:28-45:35
פיזור ראלי נוצר כאשר קרינה אלקטרומגנטית פוגעת בחומר, והיא יוצרת תנודות בחומר. לדוג' נדנדה- אם מרימים נדנדה ועוזבים, היא תתנדנד בתדירות ידועה.	45:50-47:48

תוכן	זמן
אם מזיזים נדנדה ביד, היא תזוז בקצב שמכתיבים לה. שדה אלקטרומגנטי מגיע לחומר, והוא לא בתדירות של חומר, הוא גורם לאלקטרונים לזוז עם השדה, אבל הם לא נשארים בתנועה הזאת אחרי שהשדה נגמר.	
פיזור ראלי- תנודה מאולצת של האלקטרון בתוך החומר כתוצאה של פעולת שדה אלקטרומגנטי.	48:01-48:19
התנאי הוא שהחלקיק יהיה יותר קטן מאורך הגל, אם החלקיק יותר גדול אז הקירוב שההפרעה היא על כל החלקיק לא רלוונטית	48:48-49:04
יש חלקיקים קטנים באוויר, יש קרינה. איזה קרינה מפוזרת תלוי בגודל האטום ובאורך הגל ביום שהאוויר מזוהם רואים שקיעה אדומה. יש חלקיקים גדולים שמפזרים את האור הכחול יותר מהאדום.	49:19-49:45
החלקיקים הקטנים לא מפזרים בעילות את האור, כשהחלקיקים גדלים הם מפזרים בעילות גדולה יותר את האור הכחול מאשר את האור האדום. הכחול מתפזר ומה שרואים זה האדום.	50:07-50:43
בסופות אבק הכל נעשה אדמדם.	50:50-51:21
השמים כחולים הם גם פיזור, כשקורה כשהשמש עוברת דרך אטמוספירה דקה יחסית. שמש ניצבת מקבלים שמיים בהירים	51:26-51:46
בשקיעה יש הרבה יותר פיזור, הדרך יותר ארוכה ומתקבל אור אדום. (ציור על הלוח)	52:09-52:37
כשרואים שהספקטרום שיוצא לא מתאים לספקטרום הנכנס, זה לא בהכרח אומר שיש בליעה אלא לפעמים יש פיזור. איך אפשר להבדיל אם זה פיזור או בליעה?	53:23-53:43
הסבר על השאלה (שירטוט על הלוח)	54:00-54:40
באורך גל מסוים נצפתה ירידה- האם החומר בולע או מפזר?	55:55-56:13
בבליעה- אם החומר בולע נראה ירידה ועליה בחזרה. (שירטוט על הלוח)	57:37-57:58
כשיש אור שמפזר מה קורה לאור שעובר לעומת האור שפגע?	58:19-58:28
בפיזור הקו עולה. (שירטוט על הלוח)	58:51-59:10
כשיש בליעה, הבליעה היא באורך גל מסוים. יש מעברים מותרים ורק שם תהיה בליעה. אם יש פיזור, הפיזור קורה בכל אורכי הגל, אבל הוא קורה יותר באורך גל קצר מאשר באורך גל ארוך.	59:17-59:35
כל הספקטרום מושפע אבל לא באופן אחיד.	59:42-59:48
נראה שינוי רציף בספקטרום	59:48-1:00:01
יש פיזור- תלוי באורך הגל ובגודל החלקיק. יש בליעה- תלויה ברזוננס אורכי גל מסוימים לכל מולקולה, תלוי בסימטריה של המולקולה.	1:03:06-1:03:25
אם לוקחים קבוצה ארומטית, מבחינה כימית הם דומות, האלקטרון בתוך "הקופסא" דומה. לכן הפרמטר שמשתנה הוא הארוך. אי אפשר להשוות באורך המולקולה, במולקולות שאינן דומות מבחינה כימית.	1:04:34-1:05:29
למולקולה בריק זמן חיים מסוים. המולקולה הוכנסה לתווך אחר עם חומר אחר.	1:08:05-1:08:17
ההתנגשויות גרמו למולקולה לאבד את האנרגיה שלה, וזמן החיים יתקצר.	1:08:26-1:08:40
בלחצים גבוהים יש פחות פלורסנציה. מולקולה שנותנת פלורסנציה	1:08:48-1:09:18

תוכן	זמן
בגז ובתמיסה אין לה פלורסנציה.	
באינפרא אשום ניתן לשייך את הויברציה לקבוצה פונקציונאלית. בד"כ הבליעה האי לפי הקב' ולאבהכרח לפי המולקולה.	1:10:08-1:10:44
ספקטרוסקופית IR מלמדת על קבוצות פונקציונאליות, טביעת אצבעות	1:10:49-1:11:09
בעיה 1- יש מולקולות שלא יבלעו ב IR ואז משתמשים בראמאן שאינו דורש מומנט דיפול.	1:11:24-1:11:40
ראמאן- נותן אינפורמציה ויברציונית ע"י פיזור ספקטרום UV נותן אינפורמציה על כל המולקולה	1:11:45-1:12:09
דוגמא- בנזן ואנטרצן- ספקטרום IR יראה דומה כיון שהקב' הפונקציונליות דומות. אבל בספקטרום נראה ו UV יש הבדל באורל הגל שבו בולעות המולקולות ולכן ניתן להבחין בניהם.	1:12:12-1:12:40
UV ונראה- משתמשים בזה כאשר הקב' הפונקציונליות דומות אבל המבנה / הגודל שונה.	1:12:57-1:13:15