קורס ספקטרוסקופיה, תשע"ג

פרופ' רון נעמן

מיפוי תכנים של הרצאה 8

המיפוי נעשה על ידי מירב דינור בהנחיית פרופ' רון בלונדר

זמן	תוכן
0:57-2:02	אנחנו רוצים להבין אם המעבר הויברציוני מותר או לא ולכן עושים סימטריה. במצב חד מימדי- $\int \varphi_g \varphi_e \, dx$ φ_g פונקצית הבסיס φ_e פונקצית המצב המעורר מה שווה האינטגרל שהוא על מכפלת שתי הפונקציות?
2:56-3:38	פונקציה במצב יסוד- סימטרית לגמרי פונקציה במצב מעורר – לא סימטרית האינטגרל זהותית = 0 בגלל תכונות הסימטריה
3:38-5:30	הפעולות בחד מימדי זהות ואינברסיה. אם הפונקציה סימטרית בהפעלת זהות על הפונקציה מקבלים אותו דבר, וגם בהפעלת אינברסיה מקבלים אותו דבר.
5:39-6:11	פונקציה A אנטי סימטרית בהפעלת אינברסיה מחליפים X ב –X מקבלים את אותה הפונקציה בסימן הפוך
6:11-6:36	במימד אחד הכל פשוט, מכפלה של פונקציה סימטרית * אנטי סימטרית מקבלים פונקציה אנטי סימטרית והכל מתאפס
7:20-7:45	אנחנו מעוניינים לקבל כללי ברירה למעברים, אנחנו רוצים לדעת אם זה 0 או לא. מעבר מסמטרי לאנטי סימטרי הוא מותר. המספר אומר עד כמה המעבר חזק.
8:30-9:21	$S_{ij}=\int \varphi_j \, dJ$ לא מדובר על מימד מסוים אלא על מקרה מאוד כללי אנחנו רוצים לדעת האם נוכל גם במקרה הכללי הזה להגיע לכללים ברורים מתי האינטגרל מתאפס ומתי לא
9:40-10:22	לווקחים 2 פונקציות גל, כל אחת שייכת להצגה שונה φ_i φ_j המשמעות היא שאם ניקח את הפונקציה ונפעיל עליה את האופרטורים מהטבלה , נקבל תוצאות בהתאם
11:01-11:27	חזרה לטבלה של המים H_2O חבורת סימטריה C2v A B הן שמות של פונקציות שתחת פעולות סימטריה מתנהגות בצורה זהה.
14:01-14:54	
15:46-16:21	כל פונקצית גל יכולה להשתייך לאחת מ 4 ההצגות הללו A1 A2 B1 B2 או לקומבנציות הלינאריות שלהן.
16:21-17:20	לכל חבורה יש מספר סופי של הצגות, ולא ניתן למצוא הצגות נוספות שהן שונות, אלא רק הצגות שמורכבות מאותן ההצגות שבטבלה.
17:30-17:39	במים יש 4 נדרשים 4 וקטורים כדי לתאר את פונקצית הגל הכללית.
17:59-18:33	φ_i נניח ששיכת ל A1 φ_j שייכת לאחר.
18:54-20:35	מה קורה לפונקציה φ_i אם מפעילים עליה פעולה כללית R אחת מפעולות הסימטריה המתאימות? φ_i R נקבל את תכונות הסימטריה המתאימות מהטבלה. (+ הסבר)
21:00-22:29	דוגמא ספציפית- (c2)=1 הצגה a1 χ תכונה דוג' נוספת-0 (σv)=-1 הצגה b1 χ תכונה

זמן	תוכן
	סה"כ אנחנו רוצים לדעת מה קורה לפוקצית הגל כאשר מופעלת עליה פעולה מסוימת.
22:36-23:16	הפעלת אותה פעולה בדיוק על פונקצית הגל השניה φ j φ j = χ(R) φ j המטרה להבין מתי האינטגרל בין שתי הפונקציות מתאפס ומתי לא.
23:23-24:09	נחשב את האינטגרל על פונקצית הגל לאחר שמפעילים עליהן את אותה פעולת הסימטריה.
25:39-26:16	מה מודד האינטגרל? האינטגרל מודד כמה הפונקציות אורתוגונאליות, זה מדד לזוית בין הוקטורים. אם נסובב את שני הוקטורים מה יקרה לזוית שבניהם?
26:27-26:40	לוקחים שני וקטורים עושים את אותה פעול הסימטריה, והתוצאה היא שהזוית בין הוקטורים לא משתנה בכלל.
26:51-26:59	מותר לקחת פעולת סימטריה להפעיל על 2 פונקציות והתוצאה של האינטגרל לא תשתנה (כל פונקציה תשתנה בפני עצמה)
27:28-27:38	הדגמה יפה למה כל פעולות הסימטריה משאירות את הוקטורים באותה זוית אחד מהשני.
28:09-29:18	ניתן לפשט את התוצאה של האינטגרל.
30:22-31:21	מה זה אומר על המכפלה של התכונות? היא צריכה להיות שווה ל 1. בטבלה יש גם 1 וגם 1- ובכ"ז הדרישה היא שהמכפלה תהיה שווה ל 1.
31:21-31:50	המכפלה צריכה להיות שווה ל 1 לכל R לכל פעולה שנבחר.
32:26-33:20	המשמעות- שאם נקח פונקציה מסוימות שלא בכל הפעולות שלהם המשפט נכון, האינטגרל לא יהיה שווה ל 1 אלא ל 0.
33:20-33:53	האינטגרל יכול להתקיים רק כאשר המכפלה χj χi שווה ל 1 לכל פעולות הסימטריה.
34:35-35:43	אם לוקחים הצגות שונות, המכפלה בחלק מהפעולות לא תהיה 1 והאינטגרל לא יתקיים. מתי זה מתקיים? איזה בחירת הצגות בלתי פריקות זה מחייב? אם שתי הפונקציות שייכות לאותה הצגה בלתי פריקה- כל המכפלות χj χi יהיו 1 ז"א שהאינטגרל מתקיים.
36:40-38:18	אם בוחרים 2 פונקציות מאותה הצגה בלתי פריקה, כל המכפלות שוות ל 1 והאינטגרל לא מתאפס.
38:27-38:50	התוצאה זהה למה שהתקבל בבעיה החד מימדית. גם בחד מימדי האינטגרל מתאפס כאשר הפונקציות שייכות להצגות בלי פריקות שונות.
40:28-40:42	גם בבעיה רב מימדית, ניתן לדבר על תנאי ברירה. מה שצריך לעשות זה לקחת את פונקצית הגל הרצויה ולבדוק לאיזו הצגה היא שייכת.
41:01-41:23	דוג' למצב שלא יכול להתקיים- לוקחים פונקציה אחת מ A1 ופונקציה שניה מ A2 מתקבל באינטגרל x=-x לא הגיוני!
41:40-42:36	חזרה וסיכום- דוגמא ספציפית- האפשרות היחידה שבה האינטגרל יוכל להתקיים במצב x=-x הוא כאשר האינטגרל עצמו שווה 0!
42:45-43:01	הוכחנו בזה שכאשר שתי הפונקציות שייכות להצגות שונות אנחנו חייבים שהאינטגרל יהיה שווה ל 0.
43:19-43:29	כאשר שתי הפונקציות שייכות לאותה הצגה, אין הכרח שהאינטגרל יתאפס

זמן	תוכן
44:58-46:03	קישור לחומר שנילמד עם פרופ' רון נעמן.
46:03-46:43	אנחנו מנדנדים את המולקולה ב x ואנחנו רוצים לדעת אם נוכל לערער e מ l ל j כעת אפשר יהיה ע"פ הסימטריה של הפונקציה לחשב, וניתן לומר שהאינטגרל הוא 0 / 1 – כללי ברירה. יש הכללה של הכללים לגבי סימטרי / אנטי סימטרי להרבה מימדים. בהרבה מימדים לא תמיד שייך לדבר על סימטרי / אנטי סימטרי כפשוטו.
48:33-49:03	חזרה לטבלת התכונות, הסבר איך היא נבנתה
49:26-49:53	A1-Z A2-RZ B1- X B2-Y
50:25-50:32	לא משנה מהם האטומים במולקולה, מהי המולקולה, כליי הברירה הם אחידים לכל חבורת הנקודה.
50:39-50:48	הפונקציות x^2 y^2 z2 הם סמטריות לגמרי תחת כל הפעולות כמו z
51:06-51:19	הסבר לגבי משמעות x^2 y^2 z2
51:19-51:36	כללי ברירה- אם לוקחים שדה אופטי- שדה חשמלי שמתנדנד במהירות
51:50-51:53	מה עושה השדה החשמלי?
52:18-52:34	הוא מפעיל כוח על ה e . מה קורה למערכת שמתנדנדת?
52:45-53:29	הגל האלקטרומגנטי מורכב משדה חשמלי שמתנדנד למעלה ולמטה. הכוח הזה מרעיד את ענן ה e
53:40-54:35	ה e זז למעלה ולמטה, יש לו תאוצה. חלקיק בעל מטען ומאיץ. חלקיק טעון במהירות קבועה לא קורה כלום! אם חלקיק טעון מאיץ מה קורה?
54:38-55:10	סינכרוטרון- e במהירות עצומה שמכריחים אותו להסתובב. שימוש בסינכרוטרונים.
55:27-56:22	X-Ray יצירה של קרני רנטגן. מבנה של חלבונים בודקים ע"י הקרנת קרני X-Ray על גביש של חלבונים. כאשר מטען נמצא בסיבוב יש לו תאוצה כלפי פנימה (מרכז המעגל) והוא פולט קרינה. כל מטען בתאוצה יפלוט קרינה.
58:25-58:41	כאשר באים עם קרינה כמו ליזר למשל, השדה יגרום ל e להתנדנד באותו התדר. ה e יאיץ ויעצור וגם יפלוט קרינה.
58ק47-59:18	אנחנו רוצים להבין, כאשר ענן ה e יתנדנד באותו הכיוון של השדה החשמלי, אם אנחנו מנדנדים את הe מה הסיכוי ש ה mode הויברציוני יגיב.
1:00:04-1:00:09	ציור של שדה חשמלי מתנדנד.
1:00:11-1:00:51	מה יקרה אשר מנדנדים בכיוון z ? האם יש סיכוי לעורר את ה e לעבור מפונקציה l לפונקציה j? כאשר l היא ויברציה מסוימת ו j היא ויברציה אחרת.מה הסיכוי במימד אחד?
1:01:10-1:10:36	למקרה הפרטי של מימד אחד- פונקציה אחת היא s סימטרית והשניה היא A אנטי סימטרית.
1:01:36-1:02:00	מתי האינטגרל לא יהיה שווה 0 והמעבר יהיה מותר? A= S*A S=S*A*A ז"א מעבר מזוגי לאי זוגי יהיה מעבר מותר. מעבר מסימטרי (זוגי) לסימטרי יהיה אסור.
1:02:10-1:03:36	בעיה בהרבה מימדים- מפעילים פעולת סימטריה R מפעילים על 3 פונקציות, וכופלים באינטגרל המקורי.
1:03:50-1:05:23	חזרה- יש מכפלה של 3 וקטורים- מותר לעשות את אותה פעולת הסימטריה והמכפלה לא צריכה להשתנות.

זמן	תוכן
	הפעלת אותה הפעולה על הוקטורים צריכה לתת את אותה התוצאה. אנחנו יודעים להפעיל את פעולות הסימטריה על פונקציות הגל כיון שאנחנו יודעים לאיזה הצגה בלתי פריקה כל אחת שייכת. לדוג'- ב c2v שייכת להצגה A1 שלב א'- בודקים לאיזה חבורה שייכת המולקולה שלב ב'- בודקים את טבלת התכונות שלב ג'- בודקים לאן שייכים x y z
1:05:30-1:05:39	אנחנו צריכים לבדוק לאיזה הצגה בלתי פריקה שייכת כל אחת מהפונקציות שנמצאות באינטגרל.
1:05:39-1:05:59	מצב התחלתי, מצב סופי ודיפול המעבר. דיפול המעבר הוא הציר שנבחר שבו יתנדנד השדה.
1:06:16-1:06:26	כדי שהאינטגרל לא יתאפס, כל הצכפלה צריכה להיות שווה ל 1 לכל פעולות הסימטריה.
1:06:26-1:06:36	מה שנוסף זה התנודה של השדה.
1:08:13-1:08:39	בטמפ' נמוכות נהיה בטוחים שהמולק' בהתחלה בלי שדה נמצאת במצב ויברציוני יסודי. ז"א בחד מימדי יש שני מצבים זוגי / אי זוגי. קורב לאפס המוחלט חשוב להסתכל מה ההפרש בין 2 רמות להשוות את זה לטמפ'.
1:08:39-1:09:12	כאשר ההפרש האנרגתי בין הרמות גדול מקבוע בולצמן כפול הטמפ'(טמפ' ביחידות של אנרגיה), אז רוב המולקולות יהיו במצב היסוד Ee-Eg >Kb*T
1:09:32-1:09:55	למצב היסוד יש תכונה, תלוי כמה הויברציה קשיחה, ככל שקבוע הקפיץ יותר גבוה האי שיוויון יתקיים גם בטמפ' גבוהות ולא רק קרוב ל 0 המוחלט.
1:09:55-1:10:19	ההתנגשויות מביאות אנרגיה למולקולה (זה התפקיד של הטמפ') אם לסביבה אין מספיק אנרגיה לספק לה אז היא תהיה במצב היסוד.
1:10:45-1:11:29	חזרה- מה זה סביבה? למה משהו חם שמכניסים לחדר מתקרר? בסופו של דבר זה התנגשויות, גוף קר בסביבה חמה המולקולות בסביבה מתנגשות ומעבירות אנרגיה.
1:11:29-1:11:40	כמות האנרגיה שיש למולקולה היא KbT רוב המולקולות מכילות כמות כזאת של אנרגיה, יש גם סיכוי נמוך למולקולות שיש להן כמות גדולה יותר.
1:12:15-1:12:53	אנחנו מסתכלים על מולקולה אחת, ואנחנו שואלים את עצמינו מה הסיכוי שהמולקולה הזאת תהיה במצב ויברציוני מעורר? כל מה שאנחנו צריכים לדעת זה את הטמפ', כיון שהטמפ' נותנת לנו את האנרגיה הקינטית הממוצעת של כל המולקולות. אם האנרגיה קטנה מהמעבר, הסיכוי שהיא נמצאת במצב מעורר הוא קטן מאוד!
1:13:24-1:13:54	אנחנו רוצים להתחיל ממצב התחלתי מסוים- מצב יסוד ויברציוני. הפונקציה של המצב הזה תמיד תלויה ב X^2 זו תמיד פונקציה סימטרית בכל הכיוונים.
1:13:54-1:14:04	מה קורה לפונקציה סימטרית כזאת תחת כל הפעולות האפשריות?
1:14:13-1:14:45	במקום לקחת מצב של מימד אחד, יש לנו פונקציה עם הרבה אטומים והרבה קשרים ואנחנו מסתכלים על המצב היסודי הויברציוני, הוא תמיד יהיה פונקציה סימטרית בכל אחת מהקורדינטות.. מה יקרה לפונקציה כזאת אם נפעיל עליה את כל פעולות הסימטריה של החבורה?

זמן	תוכן
1:14:50-1:15:37	התשובה היא 1 לכל פעולות הסימטריה.
1:15:43-1:16:06	הגענו לכללי ברירה בעירור הויברציוני ממצב יסוד. אם מתחילים ממצב יסוד, כאשר גם הדיפול וגם הפונקציה הסופית שייכות לאותה ההצגה המעבר אפשרי.
1:16:11-1:16:44	כאשר דיפול המעבר ופונקציה הגל הסופית שייכים לאותה הצגה בלתי פריקה, נשאר לבדוק כיצד הדיפול מתנהג תחת כל פעולה, ושאר חהבין מה קורה לויברציה כאשר מופעלים עליה כל פעולות הסימטריה האפשריות.
1:17:15-1:17:46	מים- כמה דרגות חופש יש למים? 3n 9 מתוכן כמה ד"ח מאוד פשוטות תזוזה לכיוון x ולכיוון y
1:17:49-1:18:27	כל החיצים למעלה זו תנועה למעלה וכנ"ל לגבי y x ז"א 3 ד"ח שייכות לטרנסלציה. יש עוד 3 ד"ח פשוטות שמגדירות רוטציה, כי נדרשות 3 זוויות כדי להגדיר את הכיוון של גוף תלת מימדי.
1:18:33-1:18:49	חזרה- 3 זויות נדרשות כדי להגדיר כיוון של גוף תלת מימדי במרחב.
1:18:55-1:19:05	נשארנו עם 3ד"ח ויברציוניות, מה הן?
1:20:20-1:20:54	טרנסלציה היא ד"ח לא מקוונטטת, רוטציה היא כן מקוונטטת אבל אנחנו מתעסקים עם ויברציות. אנחנו רוצים למצוא 3 mode עם חיצים על האטומים.
1:20:54-1:21:18	1Mode מהמרכז החוצה מתיחה סימטרית (כולל ציור) מהמרכז החוצה וחזרה כל שלושת האטומים, כמו קפיץ.
1:21:40-1:21:48	המיוחד בבחירה הזאת, 3 ה"אטומים" פריקים, הם בלתי תלויים אחש בשני.
1:21:54-1:22:44	2 Mode זו גם מתיחה אבל א סימטרית. קשר אחד מתארך ושני מתקצר. 3Mode (ציור
1:23:08-1:23:48	מדוע דוקא אילו? כיון שאלו תנועות בלתי פריקות, המולקולה תעשה בדיוק את אותה פעולה הלוך וחזור לא קומבינציות של מס פעולות .
1:23:48-1:23:55	אם היינו בוחרים הצגה אחרת. היה ניתן לראות שעם הזמן עוברים מ mode סימטרי לאנטי סימטרי.
1:24:00-1:24:40	מה נשאר לעשות? להבין לאיזה הצגה בלתי פריקה ה mode שייך. C2- לא משנה σ v לא משנה σ v' לא משנה ז"א שזה שייך ל a1
1:24:57-1:25:29	מתיחה אסימטרית B2 c2=-1 σ v=-1
1:25:29-1:26:09	כיפוף a1 - bend C2=1 σ v=1 σ v'=1 מתחילים ממצב היסוד, בוחרים שדה בכיוון y (המתאים ע"פ הטבלה שרואים להצגה B2
1:26:09-1:26:32	איזה מצב ויברציוני יהיה פעיל ויתן קו בספקטרום? הויברציה
1:26:37-1:27:22	אם בוחרים שדה בכיוון z לא נוכל לראות בספקטרום קו של מתיחה אסימטרית כיוון שהם שייכים להצגות שונות והאינטגרל מתאפס
1:27:28-1:27:32	את כיוון הדיפול אנחנו בוחרים הוא מוגדר עם השדה החיצוני.
1:27:32-1:27:55	אנחנו בוחרים את כיוון השדה המופעל, אם בחרנו שדה בכיוון z ה mode שיהיו פעילים זה כיפוף ומתיחה סימטרית.
1:27:59-1:2815	אם לוקחים את השדה בכוון x לא רואים שום קו בספקטרום כיון ש x מתאים להצגה B1 ואין שום mode שמתאים להצגה הזאת.
1:29:39-1:30:17	קבלנו כללי ברירה לספקטרוסקופיה ויברציונית. מסתכלים מהי המולקולה, עושים טבלה תכונות. על פי הטבלה ניתן יהיה לדעת איך הדיפול z y x מתנהג תחת כל פעולות הסימטריה. אח"כ

זמן	תוכן
	מסתכלים על הmode של המולקולה ובודקים לאיזה הצגה הם שייכים. ולסיכום mode יהיה פעיל אם הוא שייך לאותה הצגה כמו הדיפול.
1:30:37-1:30:51	מולקולה פעילה ויברציונית, בבחירה ספציפי של שדה מסוים נוכל לראות מעברים בכל אחד מה mode .
1:31:07-1:31:23	Mode צורה שבה מולקולה מתנדנדת. מספר ה mode הם כמספר דרגות היופשהויברציוניות. ז"א מספר דרגות החופש פחות טרנסלציה ורוטציה.
1:31:25-1:31:55	חזרה- ה mode יהיה פעיל כאשר הוא והאופרטור שייכים לאןתה הצגה. הכלה של כללים של חד מימד על מולקולה שהיא רב מימדית.