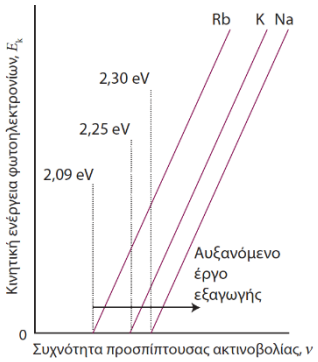
ΦΥΣΙΚΟΧΗΜΕΙΑ I (ΧΗΜ-048) - ΜΟΡΙΑΚΗ ΦΑΣΜΑΤΟΣΚΟΠΙΑ

Ομάδα ασκήσεων 2 :

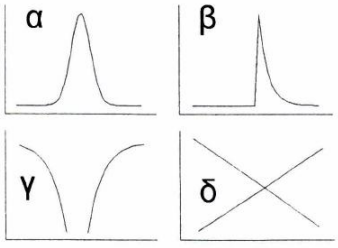
Α. Ακτινοβολία μέλανος σώματος. Φωτοηλεκτρικό φαινόμενο

1. α) Να παρασταθεί γραφικά (Graph, Origin, Excel, …) η εξάρτηση της πυκνότητας ακτινοβολίας που εκπέμπεται από μέλαν σώμα ως συνάρτηση του μήκους κύματος, λ (nm), γιά T= A, 2A, και 4A K (A: ο αριθμός μητρώου σας).
   β) Από το νόμο του Planck να εξαγάγετε το νόμο μετατόπισης του Wien και το νόμο Stefan-Boltzmann.
2. Το έργο εξαγωγής για τα στοιχεία Ni και Na είναι αντίστοιχα 5,0 και 2,3 eV. Ποιο είναι το μέγιστο μήκος κύματος φωτός το οποίο επαρκεί για την εξαγωγή ηλεκτρονίου από τα δύο αυτά στοιχεία ; Ποιά θα είναι η κινητική ενέργεια του ελεύθερου ηλεκτρονίου στις δύο περιπτώσεις αν χρησιμοποιηθεί ακτινοβολία μήκους κύματος (A/5) nm ; (A: ο αριθμός μητρώου σας).
3. α) Να ερμηνεύσετε το εικονιζόμενο διάγραμμα (μορφή και θέση των καμπυλών) και τα δεδομένα για τα τρία άτομα αλκαλίων.
   β) Αν πραγματοποιηθεί ακτινοβόληση του Rb με δέσμη λέιζερ σε μήκος κύματος λ = 310 nm, ποια θα είναι η μέγιστη κινητική ενέργεια των εξερχόμενων ηλεκτρονίων κατά τον ιοντισμό?



Β. Ανασκόπηση κβαντομηχανικής

4. Ποιο μήκος κύματος De Broglie αντιστοιχεί σε ηλεκτρόνιο με κινητική ενέργεια 1, 10 και 100 eV ;
5. Ηλεκτρόνιο επιταχύνει σε ηλεκτρικό δυναμικό V = 100 Volts. Ποιο είναι το μήκος κύματος De Broglie του ηλεκτρονίου ; (HB παρ.2-3) (λ = 1,226 Å)
6. Στο πείραμα Davisson-Germer, το οποίο επιβεβαίωσε την υπόθεση de Broglie, ηλεκτρόνια επιταχυνόμενα σε δυναμικό V = 54 Volts σκεδάζονται στην επιφάνεια κρυστάλλου Ni. Αν η απόσταση μεταξύ των ατόμων Ni είναι d = 2,15 Å να υπολογισθεί η γωνία κατά την οποία εμφανίζει μέγιστο η 1^{ης} τάξης περίθλαση του «κύματος» των ηλεκτρονίων. (HB 2-8) (θ = 50,9^{o})
   Υπόδειξη: Να αποδείξετε με βάση απλό γεωμετρικό σχήμα τη συνθήκη περίθλασης.
7. Να εξετάσετε αν οι συναρτήσεις $\psi = e^{iax}$, $\psi = \cos bx$ και $\psi = \sin bx$ αποτελούν ιδιοσυναρτήσεις της εξίσωσης Schrödinger με V(x) = c (σταθερό).
8. Να δείξετε οτι η συνάρτηση $\psi = x\exp(-x^2/2)$ αποτελεί ιδιοσυνάρτηση του τελεστή: $-d^2/dx^2+x^2$. Ποια είναι η αντίστοιχη ιδιοτιμή ; (HB 2-12)
9. Ποιες από τις καμπύλες του παρακάτω σχήματος είναι δυνατό να αποτελούν κυματοσυνάρτηση ενός συστήματος; Να αιτιολογήσετε.



Δ. Άγγλος (anglos@uoc.gr)

10. Έστω η κυματοσυνάρτηση σωματιδίου: $\psi(x) = [\exp(-x^2/2a^2)]^{1/2}$.

    α) Να κανονικοποιηθεί η συνάρτηση ψ(x).

    β) Να υπολογισθεί η πιθανότητα P(x) εύρεσης του σωματιδίου στο στοιχειώδες διάστημα (x, x+dx). Για ποια τιμή του x εμφανίζει μέγιστο η κατανομή πιθανότητας P(x) ;

    γ) Να υπολογισθούν επίσης οι αναμενόμενες τιμές ,$<x>$, $<x^2>$, $<x>^2$, $<p_x>$, $<(p_x)^2>$ και οι αντίστοιχες τιμές διασποράς σ_x και σ_{px}.

11. Έστω : $\Psi(x) = \Psi_2(x)+2\Psi_4(x)$, με $\Psi_2(x)$ και $\Psi_4(x)$ κυματοσυναρτήσεις σωματιδίου σε μονοδιάστατο φρέαρ δυναμικού εύρους L. Να υπολογισθεί η αναμενόμενη τιμή της ενέργειας $<E>$. Τι παρατηρείτε;

    α) Για σωματίδιο σε μονοδιάστατο φρέαρ δυναμικού εύρους L, να δείξετε οτι οι ιδιοσυναρτήσεις $\Psi_i(x)$ και $\Psi_j(x)$ είναι ορθογώνιες για $i \neq j$. (HB 2-18).

    β) Στη συνέχεια, να θεωρήσετε τις, Ψ_3 και Ψ_6, και χρησιμοποιώντας γραφικές μεθόδους (Graph, Origin) να δείξετε οτι είναι μεταξύ τους ορθοκανονικές.

    γ) Ποια είναι η πιθανότητα να ευρίσκεται το σωματίδιο στο μέσο του δοχείου στην περίπτωση της κατάστασης Ψ_3 και της κατάστασης Ψ_6.

12. Για σωματίδιο σε μονοδιάστατο φρέαρ δυναμικού εύρους L, να υπολογίσετε τις ποσότητες: $<x>$, $<x^2>$, $<x>^2$, $<p_x>$, $<(p_x)^2>$, $<p_x>^2$, και τις αντίστοιχες τιμές διασποράς σ_x και σ_{px}. (HB, λυμένο παράδειγμα)

13. Για σωματίδιο σε μονοδιάστατο φρέαρ δυναμικού εύρους L, να υπολογίσετε την πιθανότητα εύρεσης του σωματιδίου στο διάστημα: $0{,}9L \leq x \leq L$ για τις καταστάσεις Ψ_1, Ψ_8 και Ψ_{100}. Τι παρατηρείτε σε σχέση με την κλασσική πιθανότητα; (HB 2-19)

14. Άτομο αζώτου (N), ευρίσκεται σε μονο-διάστατο δοχείο (φρέαρ δυναμικού) μήκους L.

    (i) Να αναγράψετε την κυματοσυνάρτηση, που αντιστοιχεί στο κβαντικό επίπεδο n = 5 και να την παραστήσετε γραφικά.

    (ii) Επίσης να παραστήσετε γραφικά την αντίστοιχη πυκνότητα πιθανότητας.

    (iii) Με δεδομένη την κυματοσυνάρτηση για το επίπεδο n = 5, να υπολογίσετε την τιμή της πυκνότητας πιθανότητας εύρεσης του ατόμου στο μέσο του δοχείου (x = L/2) αν το μήκος του δοχείου είναι L = 10 Angstrom.

    (iv) Να υπολογίσετε την τιμή της πιθανότητας εύρεσης του ατόμου σε περιοχή εύρους dx = L/100 στο μέσο του δοχείου.

15. Στην περίπτωση φρεατίου 2D με διαστάσεις (x = 1, y = 1), (x = 1, y = 1,5) και (x = 1, y = 4) να προσδιοριστεί η ενέργεια που αντιστοιχεί στις 20 χαμηλότερες καταστάσεις και να παρασταθεί συγκριτικά σε διάγραμμα τύπου Grotrian. Υπόδειξη: να εκφράσετε την ενέργεια σε μονάδες $(\pi\hbar)^2/2m$ (ισοδύναμα: $h^2/8m$).

16. Το μόριο 1,3,5 εξατριένιο εμφανίζει εκτεταμένη συζυγία, οπότε θεωρούμε ότι τα π ηλεκτρόνια έχουν τη δυνατότητα να κινούνται ελεύθερα και ανεξάρτητα μεταξύ τους καθ' όλο το μήκος του. Είναι ως εκ τούτου εφικτό να περιγραφεί ικανοποιητικά η κίνηση των π ηλεκτρονίων με βάση το μοντέλο του σωματιδίου σε πηγάδι δυναμικού απείρου βάθους. (βλέπε επίσης Εργ. Άσκηση B17)

    α) Να προσδιορίσετε τη συνολική ενέργεια του συστήματος των π ηλεκτρονίων του μορίου στη

θεμελιώδη στάθμη θεωρώντας ότι κάθε ενεργειακή στάθμη δέχεται μέχρι 2 ηλεκτρόνια. Στη συνέχεια να υπολογίσετε την ενέργεια που αντιστοιχεί στην 1η και 2η διεγερμένη κατάσταση και το αντίστοιχο μήκος κύματος της ακτινοβολίας που απαιτείται για τη διέγερση.

β) Τι αναμένετε να προκύψει, όσον αφορά στο μήκος κύματος διέγερσης, αν αυξηθεί το μήκος του συζυγιακού πολυενίου; Να αιτιολογήσετε.

γ) Να επεκτείνετε την απάντησή σας στο (β) δίνοντας διάγραμμα ΔΕ ως συνάρτηση του αριθμού διπλών δεσμών n (3-7).

Μέσο μήκος δεσμού μεταξύ γειτονικών ατόμων C στην αλυσίδα : R = 1,4 Å

17. Έστω σωμάτιο που περιφέρεται σε επιφάνεια σφαίρας (3D).

Να υπολογίσετε το μέτρο του διανύσματος της τροχιακής στροφορμής αν ο κβαντικός αριθμός ℓ είναι : 0, 1, 2, 3. Στην συνέχεια να υπολογίσετε τη γωνία που σχηματίζουν οι προβολές του διανύσματος ℓ με τον άξονα κβάντωσης της στροφορμής.

18. Το[1] μέτρο του διανύσματος της τροχιακής στροφορμής, $|\vec{L}_z|$, σωματίου που κινείται σε περιφέρεια κύκλου και ευρίσκεται στο 4ο διεγερμένο κβαντικό επίπεδο είναι :

Α. $|\vec{L}_z| = 9\hbar$, Β. $|\vec{L}_z| = 2(\sqrt{3})\hbar$, Γ. $|\vec{L}_z| = 3\hbar$, Δ. $|\vec{L}_z| = 4\hbar$

19. Η κυματοσυνάρτηση, που περιγράφει την κατάσταση σωματίου κινούμενου σε επιφάνεια σφαίρας είναι:

$Y_{\ell m_\ell}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} cos\theta$. Το μέτρο της τροχιακής στροφορμής του σωματίου είναι :

Α. $|\vec{L}| = 0$, Β. $|\vec{L}| = \hbar\sqrt{2}$, Γ. $|\vec{L}| = (3/4\pi)^{1/2}\ \hbar$, Δ $|\vec{L}| = \hbar$

20. **Κίνηση σωματίου σε δακτύλιο.** Κατά μια προσέγγιση τα π ηλεκτρόνια στο βενζόλιο, εξαιτίας της συζυγίας, μπορεί να θεωρηθούν ως ελεύθερα σωμάτια κινούμενα σε κυκλικό δακτύλιο, αποτελούμενο από τους δεσμούς μεταξύ των 6 άτομων άνθρακα του βενζολίου.

i) Να παραστήσετε σε κατάλληλο ενεργειακό διάγραμμα τα 4 κατώτερα επίπεδα του συστήματος δίνοντας την τιμή της ενέργειας και τον εκφυλισμό κάθε επιπέδου. Το μήκος δεσμού C-C στο βενζόλιο είναι 1.40 Å.

ii) Να δείξετε σχηματικά (στο ενεργειακό διάγραμμα) την ηλεκτρονιακή δομή (διάταξη) του βενζολίου (μόνο τα 6 π ηλεκτρόνια) στη θεμελιώδη του κατάσταση και εν συνεχεία να υπολογίσετε την ελάχιστη ενέργεια που απαιτείται για τη διέγερση ενός ηλεκτρονίου από το υψηλότερο κατειλημμένο επίπεδο (HOMO) στο αμέσως επόμενο (LUMO).

iii) Ποια είναι η στροφορμή του διεγερμένου ηλεκτρονίου?

21. Για τις καταστάσεις υ = 0 και υ = 1 του απλού αρμονικού ταλαντωτή να υπολογίσετε τα ακόλουθα.

$\langle x \rangle$, $\langle x^2 \rangle$, $\langle p_x \rangle$, $\langle p_x^2 \rangle$ και τη διασπορά (σ) της μέσης θέσης και της μέσης ορμής.

Επίσης να επιβεβαιώσετε την ισχύ της αρχής της αβεβαιότητας στον αρμονικό ταλαντωτή.

[1] Οι Ασκήσεις 18 και 19 είναι αντιπροσωπευτικές ερωτήσεων πολλαπλής επιλογής παρόμοιες με εκείνες που θα κληθείτε να αντιμετωπίσετε στις εξετάσεις προόδου.

Πρόσθετες ασκήσεις από τα σχετικά κεφάλαια στο μάθημα Φυσική-ΙΙ

Να μελετήσετε ασκήσεις που έχετε συζητήσει στα αντίστοιχα κεφάλαια της Κβαντομηχανικής στο μάθημα Φυσική-ΙΙ.

==========

ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑΤΑ από το CHEM³.

Φωτοηλεκτρικό φαινόμενο

Παράδειγμα 3.3 Φωτοηλεκτρικό φαινόμενο

Όταν επιφάνεια νατρίου (Na) ακτινοβολείται στα 475 nm , απελευθερώνονται ηλεκτρόνια με κινητική ενέργεια 30.0 $kJmol^{-1}$. Ποια είναι η τιμή του έργου εξαγωγής για το νάτριο (σε μονάδες J);

Στρατηγική

Χρησιμοποιείστε την Εξ. 3.3 για να προσδιορίσετε το έργο εξαγωγής.

$$h\nu = \Phi + E_{KE} \qquad (3.3)$$

Η Εξίσωση 3.3 αναφέρεται σε ένα φωτόνιο. Άρα η κινητική ενέργεια που υπολογίζεται πρέπει να μετατραπεί από γραμμομοριακή ποσότητα σε τιμή που αντιστοιχεί σε ένα ηλεκτρόνιο.

Επίλυση

Αρχικά μετατρέπετε το μήκος κύματος, λ, σε συχνότητα με βάση την Εξ. 3.1

$$c = \lambda\nu \qquad (3.1)$$

$$\nu = \frac{c}{\lambda} = \frac{2.998\times10^{8}\ m\,s^{-1}}{475\times10^{-9}\ m} = 6.31\times10^{14}\ s^{-1}$$

Στη συνέχεια υπολογίζετε την ποσότητα hν για ένα φωτόνιο με βάση την Εξ. 3.2

$$E = h\nu \qquad (3.2)$$

$$= (6.626\times10^{-34}\ J\,s) \times (6.31\times10^{14}\ s^{-1})$$
$$= 4.18\times10^{-19}\ J$$

Ακολούθως διαιρείτε την ηλεκτρονιακή κινητική ενέργεια με τη σταθερά του Avogadro και υπολογίζετε την κινητική ενέργεια για ένα ηλεκτρόνιο

$$E_{KE} = \frac{30.0\times10^{3}\ J\,mol^{-1}}{6.022\times10^{23}\ mol^{-1}} = 4.98\times10^{-20}\ J$$

Και λύνοντας την Εξ. 3.3 ως προς Φ υπολογίζετε το έργο εξαγωγής

$$\Phi = h\nu + E_{KE}$$

Έτσι: $\Phi = (4.18\times10^{-19}\ J) - (4.98\times10^{-20}\ J)$

$= 3.68\times10^{-19}\ J$

.....

Ερώτηση

Να υπολογίσετε την κινητική ενέργεια (σε $kJmol^{-1}$) των ηλεκτρονίων που απελευθερώνονται όταν στο πείραμα χρησιμοποιείται ακτινοβολία μήκους κύματος 450 nm .

Να επαναλάβετε τους υπολογισμούς εκφράζοντες την ενέργεια σε μονάδες eV.

Μήκος κύματος de Broglie

Παράδειγμα 3.6 Χρησιμοποιώντας την εξίσωση de Broglie

Ποιο είναι το μήκος κύματος που αντιστοιχεί σε ηλεκτρόνιο κινούμενο με ταχύτητα ίση με το ένα δέκατο της ταχύτητας του φωτός; (Η μάζα του ηλεκτρονίου δίδεται στον Πίνακα 3.1, σελ. 116).

Στρατηγική

Χρησιμοποιείστε την εξίσωση 3.9

$$\lambda = \frac{h}{mv} \qquad (h = 6.626\times10^{-34}\ Js)$$

Υπενθυμίζεται ότι 1 J = 1 $kg\ m^2\ s^{-1}$ (βλ. Πίνακα 1.2, σελ. 8). Στο σύστημα μονάδων SI η μονάδα μάζας είναι το kg (Ενότητα 1.2, σελ.7)

Επίλυση

Για το ηλεκτρόνιο

$$m = 9.109\times10^{-31}\ kg$$

και $v = 0.1 \times c = 2.998 \times 10^{7}\ m\,s^{-1}$

Βάσει της Εξίσωσης 3.9

$$\lambda = \frac{6.626\times10^{-34}\ kg\ m^2\ s^{-1}}{(9.109\times10^{-31}\ kg)\times(2.998\times10^{7}\ m\ s^{-1})} = 2.426\times10^{-11}\ m$$

.....

Ερώτηση

Ποιο είναι το μήκος κύματος νετρονίου κινούμενου με ταχύτητα ίση με το ένα δέκατο της ταχύτητας του φωτός; Η μάζα του νετρονίου δίδεται στον Πίνακα 3.1 (σελ. 116.

==========

Άσκηση 12 (από το βιβλίο «Symmetry and Spectroscopy», HB)

Σωμάτιο σε μονοδιάστατο φρέαρ δυναμικού

$$\langle x \rangle = (2/a)\int_0^a x \sin^2(n\pi x/a)dx = a/2$$

$$\langle x^2 \rangle = (2/a)\int_0^a x^2 \sin^2(n\pi x/a)dx = \frac{a^2}{3} - \frac{a^2}{2n^2\pi^2}$$

$$\sigma_x = \frac{a\sqrt{n^2\pi^2 - 6}}{2n\pi\sqrt{3}}$$

$$\langle p \rangle = (2/a)\int_0^a \sin(n\pi x/a)(-i\hbar\frac{d}{dx})\sin(n\pi x/a)dx = 0$$

$$\langle p^2 \rangle = (2/a)\int_0^a \sin(n\pi x/a)(-\hbar^2\frac{d^2}{dx^2})\sin(n\pi x/a)dx = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{a^2}$$

$$\sigma_p = \frac{n\pi\hbar}{a}$$

$$\sigma_x\sigma_p = \frac{\hbar\sqrt{n^2\pi^2 - 6}}{2\sqrt{3}}$$