

## ΦΥΣΙΚΟΧΗΜΕΙΑ Ι (ΧΗΜ-048)

### ΜΟΡΙΑΚΗ ΦΑΣΜΑΤΟΣΚΟΠΙΑ

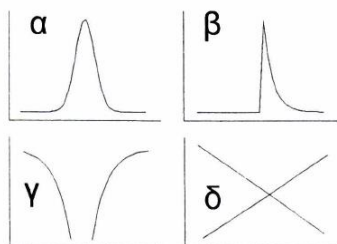
#### Ομάδα ασκήσεων 2 :

#### **A. Ακτινοβολία μέλανος σώματος. Φωτοηλεκτρικό φαινόμενο**

- α) Να παρασταθεί γραφικά (Graph, Origin, Excel, ...) η εξάρτηση της πυκνότητας ακτινοβολίας που εκπέμπεται από μέλαν σώμα ως συνάρτηση του μήκους κύματος,  $\lambda$  (nm), για  $T = A, 2A$ , 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.
- 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)

#### **B. Ανασκόπηση κβαντομηχανικής**

- Ποιο μήκος κύματος De Broglie αντιστοιχεί σε ηλεκτρόνιο με κινητική ενέργεια 1, 10 και 100 eV ;
- Ηλεκτρόνιο επιταχύνει σε ηλεκτρικό δυναμικό  $V = 100$  Volts. Ποιο είναι το μήκος κύματος De Broglie του ηλεκτρονίου ; (HB παρ.2-3) ( $\lambda = 1,226 \text{ \AA}$ )
- 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  $d = 2,15 \text{ \AA}$  να υπολογισθεί η γωνία κατά την οποία εμφανίζει μέγιστο η 1<sup>η</sup> τάξης περίθλαση του «κύματος» των ηλεκτρονίων. (HB 2-8) ( $\theta = 50,9^\circ$ )  
Υπόδειξη: Να αποδείξετε με βάση απλό γεωμετρικό σχήμα τη συνθήκη περίθλασης.
- 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).
- Να δείξετε ότι 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)
- Ποιες από τις καμπύλες του παρακάτω σχήματος είναι δυνατό να αποτελούν κυματοσυνάρτηση ενός συστήματος; Να αιτιολογήσετε.



9. Έστω η κυματοσυνάρτηση σωματιδίου:  $\psi(x) = [\exp(-x^2/2a^2)]^{1/2}$ .
- Να κανονικοποιηθεί η συνάρτηση  $\psi(x)$ .
  - 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  $P(x)$  ;
  - Να υπολογισθούν επίσης οι αναμενόμενες τιμές  $\langle x \rangle$ ,  $\langle x^2 \rangle$ ,  $\langle x \rangle^2$ ,  $\langle p_x \rangle$ ,  $\langle (p_x)^2 \rangle$  και οι αντίστοιχες τιμές διασποράς  $\sigma_x$  και  $\sigma_{p_x}$ .
10. 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  $\langle E \rangle$ . Τι παρατηρείτε;
- Για σωματίδιο σε μονοδιάστατο φρέαρ δυναμικού εύρους  $L$ , να δείξετε ότι οι ιδιοσυναρτήσεις  $\Psi_i(x)$  και  $\Psi_j(x)$  είναι ορθογώνιες για  $i \neq j$ . (HB 2-18).
  - Στη συνέχεια, να θεωρήσετε τις  $\Psi_3$  και  $\Psi_6$ , και χρησιμοποιώντας γραφικές μεθόδους (Graph, Origin) να δείξετε ότι είναι μεταξύ τους ορθοκανονικές.
  - Ποιά είναι η πιθανότητα να ευρίσκεται το σωματίδιο στο μέσο του δοχείου περίπτωση της κατάστασης  $\Psi_3$  και της κατάστασης  $\Psi_6$ .
11. 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  $\Psi_1$ ,  $\Psi_8$  και  $\Psi_{100}$ . Τι παρατηρείτε σε σχέση με την κλασική πιθανότητα; (HB 2-19)
12. 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 Grottrian. Υπόδειξη: να εκφράσετε την ενέργεια σε μονάδες  $(\pi\hbar)^2/2m$ .
13. Το μόριο 1,3,5 εξατριένιο εμφανίζει εκτεταμένη συζυγία, οπότε θεωρούμε ότι τα  $\pi$  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  $\pi$  ηλεκτρονίων με βάση το μοντέλο του σωματιδίου σε πηγάδι δυναμικού απείρου βάθους. (βλέπε επίσης Εργ. Άσκηση B17)
- Να προσδιορίσετε τη συνολική ενέργεια του συστήματος των  $\pi$  ηλεκτρονίων του μορίου στη θεμελιώδη στάθμη θεωρώντας ότι κάθε ενεργειακή στάθμη δέχεται μέχρι 2 ηλεκτρόνια. Στη συνέχεια να υπολογίσετε την ενέργεια που αντιστοιχεί στην 1<sup>η</sup> και 2<sup>η</sup> διεγερμένη κατάσταση και το αντίστοιχο μήκος κύματος της ακτινοβολίας που απαιτείται για τη διέγερση.
  - Τι αναμένετε να προκύψει, όσον αφορά στο μήκος κύματος διέγερσης, αν αυξηθεί το μήκος του συζυγιακού πολυενίου; Να αιτιολογήσετε.
  - Να επεκτείνετε την απάντησή σας στο (β) δίνοντας διάγραμμα  $\Delta E$  ως συνάρτηση του αριθμού διπλών δεσμών  $n$  (3-7).
- Μέσο μήκος δεσμού μεταξύ γειτονικών ατόμων C στην αλυσίδα :  $R = 1,4 \text{ \AA}$
14. Έστω σωματίδιο που περιφέρεται σε επιφάνεια σφαίρας (3D).
- Να υπολογίσετε το μέτρο του διανύσματος της τροχιακής στροφορμής αν ο κβαντικός αριθμός  $\ell$  είναι : 0, 1, 2, 3. Στη συνέχεια να υπολογίσετε τη γωνία που σχηματίζουν οι προβολές του διανύσματος  $\ell$  με τον άξονα κβάντωσης της στροφορμής.

15. Για τις καταστάσεις  $v = 0$  και  $v = 1$  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 ( $\sigma$ ) της μέσης θέσης και της μέσης ορμής. Επίσης να επιβεβαιώσετε την ισχύ της αρχής της αβεβαιότητας στον αρμονικό ταλαντωτή.
16. Να παραστήσετε διαγραμματικά (σε 2 διαστάσεις – Graph, Origin) τις κυματοσυναρτήσεις  $\psi_{n00}$ , που αντιστοιχούν στα ατομικά τροχιακά  $1s$ ,  $2s$ ,  $3s$  καθώς και τα  $(\psi_{n00})^2$  και  $4\pi^2(\psi_{n00})^2$ . (Υπόδειξη: Αν κρατήσετε την κλίμακα στον άξονα  $x$  (δηλαδή  $r$ ) σταθερή θα έχετε άμεση εικόνα του «μεγέθους» των τροχιακών).

### **Πρόσθετες ασκήσεις από τα σχετικά κεφάλαια στο μάθημα Φυσική-II**

Lecture20230503.pdf

Lecture20230508.pdf

Lecture20230517.pdf

Chapter38-Problems.pdf

Chapter39-Problems.pdf

Ασκήσεις Αξιώματα Κβαντικής Μηχανικής.pdf