



ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ
ΠΑΤΡΩΝ
UNIVERSITY OF PATRAS

ΑΝΟΙΚΤΑ ακαδημαϊκά
μαθήματα ΠΠ

ΦΥΣΙΚΟΧΗΜΕΙΑ Ι

Ασκήσεις

Ενότητα 7 Ατομική Δομή

Δημήτρης Κονταρίδης
Αναπληρωτής Καθηγητής

Πολυτεχνική Σχολή
Τμήμα Χημικών Μηχανικών

Υδρογονοειδή Άτομα

Άσκηση 1

Χρησιμοποιείστε τον τύπο του Rydberg για να βρείτε σε ποια φασματική περιοχή εμφανίζονται οι γραμμές της σειράς Lyman του ατομικού υδρογόνου.

Δίνεται: $R_H = 109677 \text{ cm}^{-1}$

Τα όρια της φασματικής περιοχής στην οποία εμφανίζονται οι γραμμές μιας σειράς (π.χ., Lyman, Balmer, κ.λ.) μπορούν να υπολογιστούν από τον τύπο του Rydberg ...

$$\frac{1}{\lambda} = \bar{\nu} = R_H \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right)$$

όπου $n_1 = 1, 2, 3, \dots$

$n_2 = n_1 + 1, n_1 + 2, \dots$

... λαμβάνοντας υπόψη ότι το μέγιστο μήκος κύματος αντιστοιχεί στη γραμμή με το μικρότερο n_2 ($n_2 = n_1 + 1$) ενώ το μικρότερο μήκος κύματος αντιστοιχεί στη μετάπτωση με το μεγαλύτερο n_2 ($n_2 = \infty$).

Για τη σειρά Lyman ($n_1 = 1$)

$$\frac{1}{\lambda_{\max}} = 109677 \text{ cm}^{-1} \left(1 - \frac{1}{2^2} \right) \Rightarrow \lambda_{\max} = 121,6 \text{ nm}$$

Οι γραμμές της σειράς Lyman του **H** εμφανίζονται στην περιοχή του υπεριώδους.

$$\frac{1}{\lambda_{\min}} = 109677 \text{ cm}^{-1} \left(1 - \frac{1}{\infty^2} \right) \Rightarrow \lambda_{\min} = 91,2 \text{ nm}$$

Άσκηση 2

Να υπολογιστεί η πυκνότητα πιθανότητας να βρεθεί ένα ηλεκτρόνιο με $n=1$, $l=0$, και $m_l=0$ στον πυρήνα υδρογονοειδούς ατόμου.

Η **πλήρης** κυματοσυνάρτηση για το ηλεκτρόνιο είναι:

$$\psi_{n,l,m_l}(r,\theta,\phi) = R_{n,l}(r) Y_{l,m_l}(\theta,\phi)$$

$$\psi_{1,0,0}(r,\theta,\phi) = R_{1,0}(r) Y_{0,0}(\theta,\phi) = 2 \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} e^{-\rho/2}$$

Table 10.1 Hydrogenic radial wavefunctions

[image url](#)

Orbital	n	l	$R_{n,l}$
1s	1	0	$2 \left(\frac{Z}{a} \right)^{3/2} e^{-\rho/2}$
2s	2	0	$\frac{1}{8^{1/2}} \left(\frac{Z}{a} \right)^{3/2} (2 - \rho) e^{-\rho/2}$

Άσκηση 2

Να υπολογιστεί η πυκνότητα πιθανότητας να βρεθεί ένα ηλεκτρόνιο με $n=1$, $l=0$, και $m_l=0$ στον πυρήνα υδρογονοειδούς ατόμου.

Η πλήρης κυματοσυνάρτηση για το ηλεκτρόνιο είναι:

$$\psi_{n,l,m_l}(r,\theta,\phi) = R_{n,l}(r) Y_{l,m_l}(\theta,\phi)$$

$$\psi_{1,0,0}(r,\theta,\phi) = R_{1,0}(r) Y_{0,0}(\theta,\phi) = 2 \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} e^{-\rho/2} \left(\frac{1}{4\pi} \right)^{1/2}$$

Table 9.3 The spherical harmonics [image url](#)

l	m_l	$Y_{l,m_l}(\theta,\phi)$
0	0	$\left(\frac{1}{4\pi} \right)^{1/2}$
1	0	$\left(\frac{3}{4\pi} \right)^{1/2} \cos \theta$
	± 1	$\mp \left(\frac{3}{8\pi} \right)^{1/2} \sin \theta e^{\pm i\phi}$

Στον πυρήνα του ατόμου, $r=0$ και, επομένως:

$$\rho = \frac{2Zr}{na_0} = 0$$

$$e^{\rho/2} = 1$$

Άσκηση 2

Να υπολογιστεί η πυκνότητα πιθανότητας να βρεθεί ένα ηλεκτρόνιο με $n=1$, $l=0$, και $m_l=0$ στον πυρήνα υδρογονοειδούς ατόμου.

Η πλήρης κυματοσυνάρτηση για το ηλεκτρόνιο είναι:

$$\psi_{n,l,m_l}(r,\theta,\phi) = R_{n,l}(r)Y_{l,m_l}(\theta,\phi)$$

$$\psi_{1,0,0}(r,\theta,\phi) = R_{1,0}(r)Y_{0,0}(\theta,\phi) = 2\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} e^{-\rho/2} \left(\frac{1}{4\pi}\right)^{1/2}$$

$$\psi_{1,0,0}(0,\theta,\phi) = 2\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \left(\frac{1}{4\pi}\right)^{1/2}$$

Άρα,

$$\psi_{1,0,0}(0,\theta,\phi)^2 = \frac{Z^3}{\pi a_0^3}$$

$$a_0 = 52,9 \text{ pm}$$

Για το υδρογόνο, $Z=1$

Οπότε,

$$\psi_{1,0,0}(0,\theta,\phi)^2 = 2,15 \times 10^{-6} \text{ pm}^{-3}$$

Χρηματοδότηση

- Το παρόν εκπαιδευτικό υλικό έχει αναπτυχθεί στο πλαίσιο του εκπαιδευτικού έργου του διδάσκοντα.
- Το έργο «**Ανοικτά Ακαδημαϊκά Μαθήματα στο Πανεπιστήμιο Αθηνών**» έχει χρηματοδοτήσει μόνο την αναδιαμόρφωση του εκπαιδευτικού υλικού.
- Το έργο υλοποιείται στο πλαίσιο του Επιχειρησιακού Προγράμματος «**Εκπαίδευση και Δια Βίου Μάθηση**» και συγχρηματοδοτείται από την Ευρωπαϊκή Ένωση (Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο) και από εθνικούς πόρους.



Σημείωμα Ιστορικού εκδόσεων έργου

Το παρόν έργο αποτελεί την έκδοση 1.0.0.

Σημείωμα αναφοράς

Copyright Πανεπιστήμιο Πατρών. Αναπληρωτής Καθηγητής, Δημήτρης Κονταρίδης. «Φυσικοχημεία Ι». Έκδοση: 1.0. Πάτρα 2015.

Διαθέσιμο από τη δικτυακή διεύθυνση:

<https://eclass.upatras.gr/courses/CMNG2172/>

Σημείωμα αδειοδότησης

Το παρόν υλικό διατίθεται με τους όρους της άδειας χρήσης Creative Commons Αναφορά, Μη Εμπορική Χρήση Παρόμοια Διανομή 4.0 [1] ή μεταγενέστερη, Διεθνής Έκδοση. Εξαιρούνται τα αυτοτελή έργα τρίτων π.χ. φωτογραφίες, διαγράμματα κ.λ.π., τα οποία εμπεριέχονται σε αυτό και τα οποία αναφέρονται μαζί με τους όρους χρήσης τους στο «Σημείωμα Χρήσης Έργων Τρίτων».

[1] <http://creativecommons.org/licenses/by-nc-sa/4.0/>



Ως **Μη Εμπορική** ορίζεται η χρήση:

- που δεν περιλαμβάνει άμεσο ή έμμεσο οικονομικό όφελος από την χρήση του έργου, για το διανομέα του έργου και αδειοδόχο
- που δεν περιλαμβάνει οικονομική συναλλαγή ως προϋπόθεση για τη χρήση ή πρόσβαση στο έργο
- που δεν προσπορίζει στο διανομέα του έργου και αδειοδόχο έμμεσο οικονομικό όφελος (π.χ. διαφημίσεις) από την προβολή του έργου σε διαδικτυακό τόπο

Ο δικαιούχος μπορεί να παρέχει στον αδειοδόχο ξεχωριστή άδεια να χρησιμοποιεί το έργο για εμπορική χρήση, εφόσον αυτό του ζητηθεί.