



ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ
ΠΑΤΡΩΝ
UNIVERSITY OF PATRAS

ΑΝΟΙΚΤΑ ακαδημαϊκά
μαθήματα ΠΠ

ΦΥΣΙΚΟΧΗΜΕΙΑ Ι

Ασκήσεις

Ενότητα 10 Μοριακή Δομή

Δημήτρης Κονταρίδης
Αναπληρωτής Καθηγητής

Πολυτεχνική Σχολή
Τμήμα Χημικών Μηχανικών

Άσκηση 1

(α) Να υπολογιστεί το ολικό πλάτος του κανονικοποιημένου δεσμικού και του αντιδεσμικού μοριακού τροχιακού LCAO τα οποία μπορούν να σχηματιστούν από δύο τροχιακά $H1s$ που απέχουν **106 pm**.

(β) Να σχεδιαστούν τα δύο πλάτη για διάφορες θέσεις κατά μήκος του άξονα του μορίου, μέσα και έξω από τη διαπυρηνική περιοχή.

Το ολοκλήρωμα επικάλυψης που απαιτείται για τους υπολογισμούς δίνεται από την έκφραση:

$$S = \left[1 + \frac{R}{a_0} + \frac{1}{3} \left(\frac{R}{a_0} \right)^2 \right] e^{-R/a_0}$$

Από τα δεδομένα του προβλήματος, μπορούμε να υπολογίσουμε την τιμή του ολοκληρώματος επικάλυψης, S :

$$S = \left(1 + 2 + \frac{4}{3} \right) e^{-2} \Rightarrow S = 0,587$$

$$R = 106 \text{ pm}$$

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

$$\frac{R}{a_0} \approx 2$$

Άσκηση 1

(α) Να υπολογιστεί το ολικό πλάτος του κανονικοποιημένου δεσμικού και του αντιδεσμικού μοριακού τροχιακού LCAO τα οποία μπορούν να σχηματιστούν από δύο τροχιακά $H1s$ που απέχουν **106 pm**.

Από τους Πίνακες με τις σφαιρικές αρμονικές και τις ακτινικές κυματοσυναρτήσεις, βρίσκουμε την κυματοσυνάρτηση για το ατομικό τροχιακό $H1s$:

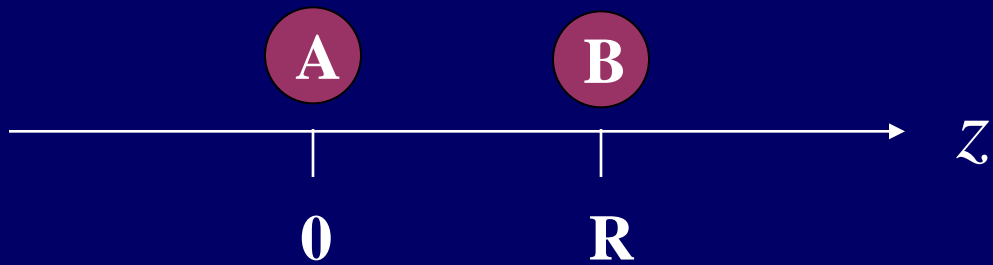
$$\psi_{1,0,0} = R_{1,0} Y_{0,0} = 2 \left(\frac{1}{a_0} \right)^{3/2} e^{-\frac{r}{a_0}} \left(\frac{1}{4\pi} \right)^{1/2} \Rightarrow \psi_{H1s} = \left(\frac{1}{\pi a_0^3} \right)^{1/2} e^{-\frac{r}{a_0}}$$

Αν οι κυματοσυναρτήσεις για τα δύο ατομικά τροχιακά συμβολιστούν με ψ_A και ψ_B , τότε οι ολικές κυματοσυναρτήσεις που προκύπτουν για το δεσμικό και το αντιδεσμικό τροχιακό θα δίνονται από την εξίσωση:

$$\psi_{\pm} = N_{\pm} (\psi_A \pm \psi_B) \Rightarrow \psi_{\pm} = N_{\pm} \left(\frac{1}{\pi a_0^3} \right)^{1/2} \left(e^{-\frac{r_A}{a_0}} \pm e^{-\frac{r_B}{a_0}} \right)$$

Άσκηση 1

(α) Να υπολογιστεί το ολικό πλάτος του κανονικοποιημένου δεσμικού και του αντιδεσμικού μοριακού τροχιακού LCAO τα οποία μπορούν να σχηματιστούν από δύο τροχιακά $H1s$ που απέχουν **106 pm**.



$$r_A = |z|$$

$$r_B = |z - R|$$

$$\psi_{\pm} = N_{\pm} \left(\frac{1}{\pi a_0^3} \right)^{1/2} \left[e^{-\frac{|z|}{a_0}} \pm e^{-\frac{|z-R|}{a_0}} \right]$$

$$\psi_{\pm} = N_{\pm} (\psi_A \pm \psi_B) \Rightarrow \psi_{\pm} = N_{\pm} \left(\frac{1}{\pi a_0^3} \right)^{1/2} \left(e^{-\frac{r_A}{a_0}} \pm e^{-\frac{r_B}{a_0}} \right)$$

Άσκηση 1

(α) Να υπολογιστεί το ολικό πλάτος του κανονικοποιημένου δεσμικού και του αντιδεσμικού μοριακού τροχιακού LCAO τα οποία μπορούν να σχηματιστούν από δύο τροχιακά $H1s$ που απέχουν **106 pm**.

(i) Δεσμικό τροχιακό $\psi_+ = N_+ (\psi_A + \psi_B)$

$$\int \psi_+^* \psi_+ d\tau = 1 \Rightarrow N_+^2 \left[\int \psi_A^2 d\tau + \int \psi_B^2 d\tau + 2 \int \psi_A \psi_B d\tau \right] = 1$$

$$\Rightarrow N_+^2 [1+1+2S] = 1 \Rightarrow N_+ = \left[\frac{1}{2(1+S)} \right]^{1/2} \Rightarrow N_+ = 0,561$$

$S = 0,587$

Άσκηση 1

(α) Να υπολογιστεί το ολικό πλάτος του κανονικοποιημένου δεσμικού και του αντιδεσμικού μοριακού τροχιακού LCAO τα οποία μπορούν να σχηματιστούν από δύο τροχιακά $H1s$ που απέχουν **106 pm**.

(i) Δεσμικό τροχιακό $\psi_+ = N_+ (\psi_A + \psi_B)$

$$N_+ = 0,561$$

Επομένως, η κανονικοποιημένη κυματοσυνάρτηση για το δεσμικό τροχιακό θα είναι η:

$$\psi_+ = 0,561 \times (\psi_A + \psi_B) = 0,561 \times \left(\frac{1}{\pi a_0^3} \right)^{1/2} \left[e^{-\frac{|z|}{a_0}} + e^{-\frac{|z-R|}{a_0}} \right] \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \psi_+ = \frac{1}{1216 \text{ pm}^{3/2}} \times \left(e^{-\frac{|z|}{a_0}} + e^{-\frac{|z-R|}{a_0}} \right)$$

Άσκηση 1

(α) Να υπολογιστεί το ολικό πλάτος του κανονικοποιημένου δεσμικού και του αντιδεσμικού μοριακού τροχιακού LCAO τα οποία μπορούν να σχηματιστούν από δύο τροχιακά $H1s$ που απέχουν **106 pm**.

(ii) Αντιδεσμικό τροχιακό $\psi_- = N_- (\psi_A - \psi_B)$

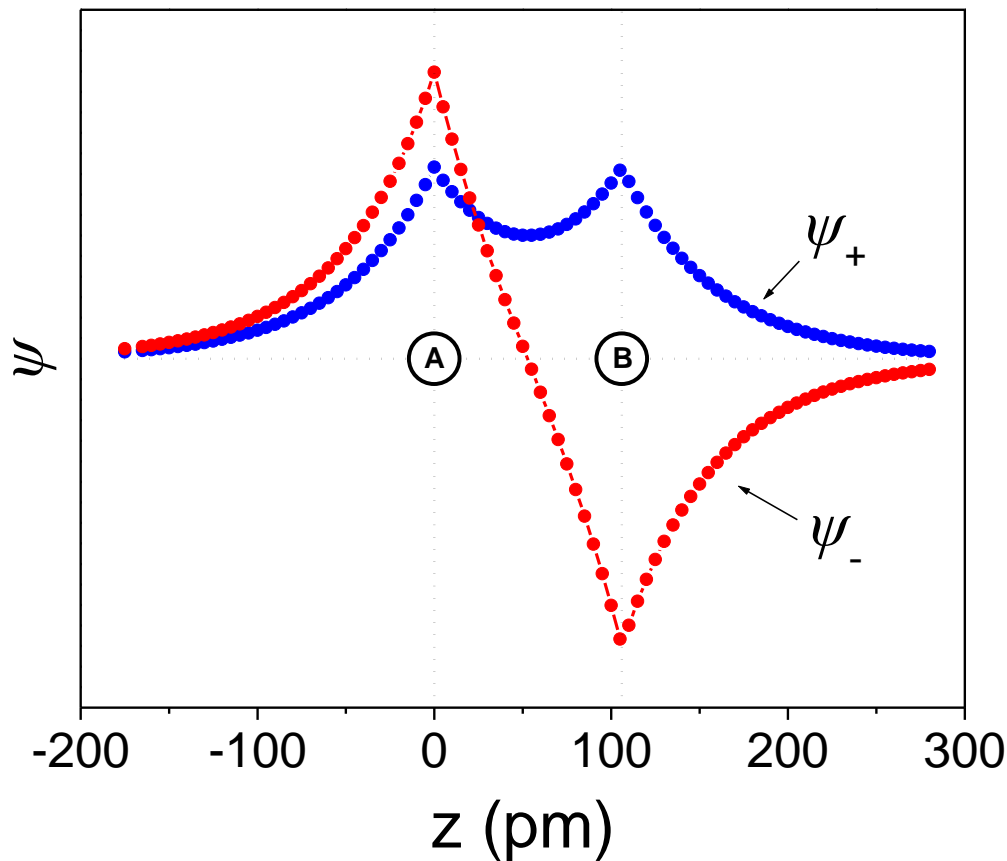
$$\int \psi_-^* \psi_- d\tau = 1 \Rightarrow N_-^2 \left[\int \psi_A^2 d\tau + \int \psi_B^2 d\tau - 2 \int \psi_A \psi_B d\tau \right] = 1 \Rightarrow$$

$$\Rightarrow N_- = \sqrt{\frac{1}{2(1-0,587)}} \Rightarrow N_- = 1,10$$

$$\psi_- = 1,10 \times (\psi_A - \psi_B) \Rightarrow \psi_- = \frac{1}{620 \text{ pm}^{3/2}} \times \left(e^{-\frac{|z|}{\alpha_0}} - e^{-\frac{|z-R|}{\alpha_0}} \right)$$

Άσκηση 1

(β) Να σχεδιαστούν τα δύο πλάτη για διάφορες θέσεις κατά μήκος του άξονα του μορίου, μέσα και έξω από τη διαπυρηνική περιοχή.



$$\psi_+ = \frac{e^{-\frac{|z|}{\alpha_0}} + e^{-\frac{|z-R|}{\alpha_0}}}{1216 \text{ pm}^{3/2}}$$

$$\psi_- = \frac{e^{-\frac{|z|}{\alpha_0}} - e^{-\frac{|z-R|}{\alpha_0}}}{620 \text{ pm}^{3/2}}$$

Άσκηση 2

(α) Να επαναληφθούν οι υπολογισμοί της Άσκησης 1 σχεδιάζοντας όμως τις πυκνότητες πιθανότητας των δύο τροχιακών

(β) Να σχηματίσετε τη “διαφορά πυκνότητας”, δηλαδή τη διαφορά μεταξύ των ψ^2 και $1/2(\psi_A^2 + \psi_B^2)$.

(α) Από τη λύση της προηγούμενης Άσκησης προέκυψαν τα πλάτη των κανονικοποιημένων δεσμικών και αντιδεσμικών τροχιακών LCAO.

Οι αντίστοιχες πυκνότητες πιθανότητας θα είναι:

$$\rho_+ = \psi_+^2 \Rightarrow \rho_+ = \frac{1}{(1216)^2 \text{ pm}^3} \times \left(e^{-\frac{|z|}{\alpha_0}} + e^{-\frac{|z-R|}{\alpha_0}} \right)^2$$

$$\rho_- = \psi_-^2 \Rightarrow \rho_- = \frac{1}{(620)^2 \text{ pm}^3} \times \left(e^{-\frac{|z|}{\alpha_0}} - e^{-\frac{|z-R|}{\alpha_0}} \right)^2$$

Άσκηση 2

(β) Να σχηματίσετε τη “διαφορά πυκνότητας”, δηλαδή τη διαφορά μεταξύ των ψ^2 και $1/2(\psi_A^2 + \psi_B^2)$.

Η “ατομική πυκνότητα”, ρ , είναι το ημίθροισμα των επιμέρους πυκνοτήτων πιθανότητας των δύο ατομικών τροχιακών:

$$\rho = \frac{1}{2}(\psi_A^2 + \psi_B^2) = \frac{1}{2} \times \left(\frac{1}{\pi a_0^3} \right) \left(e^{-\frac{2r_A}{a_0}} + e^{-\frac{2r_B}{a_0}} \right) = \frac{e^{-\frac{2r_A}{a_0}} + e^{-\frac{2r_B}{a_0}}}{9,3 \times 10^5 \text{ pm}^3} \Rightarrow$$

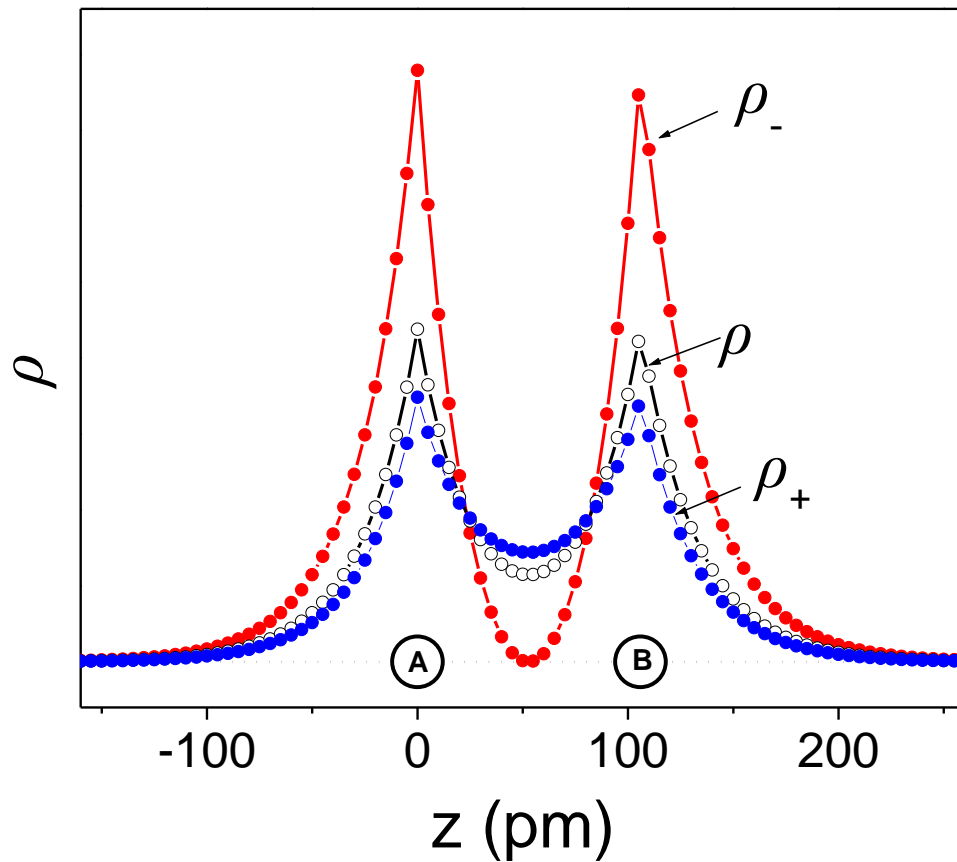
$$\Rightarrow \rho = \frac{e^{-\frac{2|z|}{a_0}} + e^{-\frac{2|z-R|}{a_0}}}{9,3 \times 10^5 \text{ pm}^3}$$

Οι ζητούμενες “διαφορές πυκνότητας” υπολογίζονται από τη σχέση:

$$\delta\rho_{\pm} = \rho_{\pm} - \rho$$

Άσκηση 2

(α) Να επαναληφθούν οι υπολογισμοί της Άσκησης 1 σχεδιάζοντας όμως τις πυκνότητες πιθανότητας των δύο τροχιακών



$$\rho_+ = \frac{\left(e^{-\frac{|z|}{\alpha_0}} + e^{-\frac{|z-R|}{\alpha_0}} \right)^2}{(1216)^2 \text{ pm}^3}$$

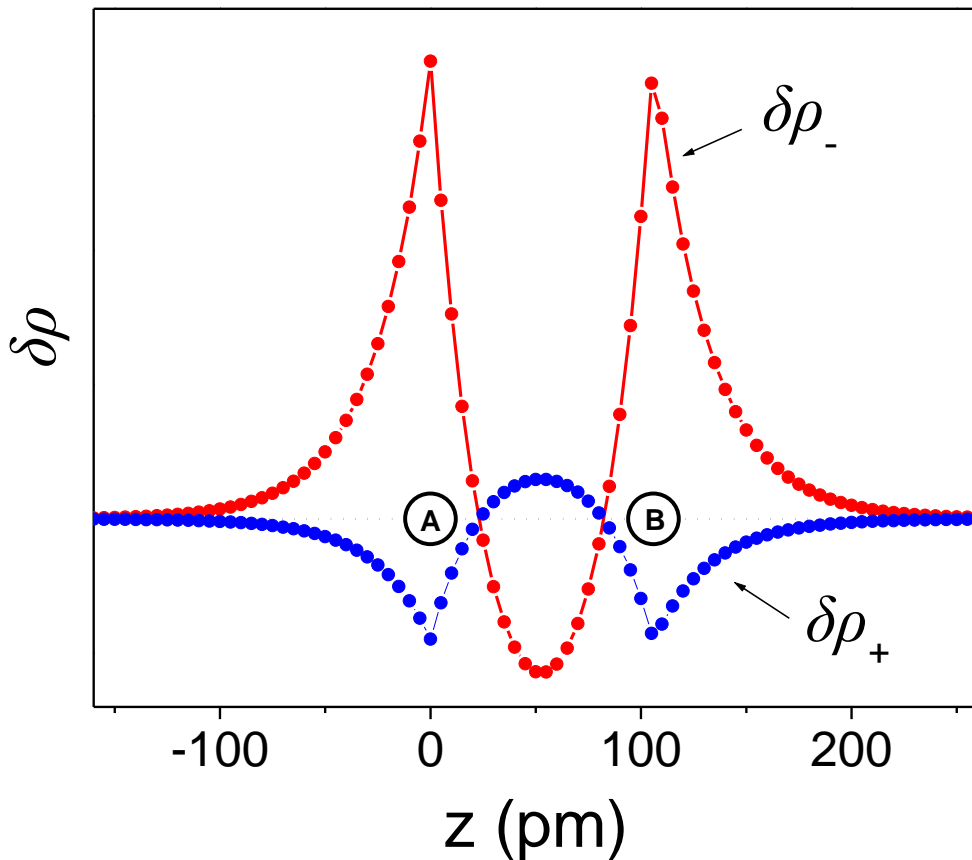
$$\rho_- = \frac{\left(e^{-\frac{|z|}{\alpha_0}} - e^{-\frac{|z-R|}{\alpha_0}} \right)^2}{(620)^2 \text{ pm}^3}$$

$$\rho = \frac{e^{-\frac{2|z|}{\alpha_0}} + e^{-\frac{2|z-R|}{\alpha_0}}}{9,3 \times 10^5 \text{ pm}^3}$$

Άσκηση 2

(β) Να σχηματίσετε τη “διαφορά πυκνότητας”, δηλαδή τη διαφορά μεταξύ των ψ^2 και $1/2(\psi_A^2 + \psi_B^2)$.

$$\delta\rho_{\pm} = \rho_{\pm} - \rho$$



$$\rho_+ = \frac{\left(e^{-\frac{|z|}{\alpha_0}} + e^{-\frac{|z-R|}{\alpha_0}} \right)^2}{(1216)^2 \text{ pm}^3}$$

$$\rho_- = \frac{\left(e^{-\frac{|z|}{\alpha_0}} - e^{-\frac{|z-R|}{\alpha_0}} \right)^2}{(620)^2 \text{ pm}^3}$$

$$\rho = \frac{e^{-\frac{2|z|}{\alpha_0}} + e^{-\frac{2|z-R|}{\alpha_0}}}{9,3 \times 10^5 \text{ pm}^3}$$

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.