



ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ
ΠΑΤΡΩΝ
UNIVERSITY OF PATRAS

ΑΝΟΙΚΤΑ ακαδημαϊκά
μαθήματα ΠΠ

ΦΥΣΙΚΟΧΗΜΕΙΑ Ι

Ασκήσεις

Ενότητα 3 Κβαντική Θεωρία

Δημήτρης Κονταρίδης
Αναπληρωτής Καθηγητής

Πολυτεχνική Σχολή
Τμήμα Χημικών Μηχανικών

Άσκηση 1

Να υπολογιστούν (α) η συχνότητα (σε Hz), (β) το μήκος κύματος (σε μm) και (γ) η ενέργεια (σε J) φωτονίου με κυματαριθμό 10^3 cm^{-1} .

$$\nu = c\bar{\nu} = (2,998 \times 10^{10} \text{ cm s}^{-1}) \times (10^3 \text{ cm}^{-1}) \Rightarrow \nu = 3 \times 10^{13} \text{ Hz}$$

$$\lambda = \frac{c}{\nu} = \frac{1}{\bar{\nu}} = \frac{1}{10^3 \text{ cm}^{-1}} = 10^{-3} \text{ cm} \Rightarrow \lambda = 10 \mu\text{m}$$

$$E = h\nu = (6,626 \times 10^{-34} \text{ J s}) \times (3 \times 10^{13} \text{ s}^{-1}) \Rightarrow E = 2 \times 10^{-20} \text{ J}$$

$$c = 2,998 \times 10^8 \text{ m s}^{-1}$$

$$h = 6,626 \times 10^{-34} \text{ J s}$$

Άσκηση 2

Να λυθεί η εξίσωση

$$\frac{d^2 y}{dx^2} - 3\frac{dy}{dx} + 2y = 0$$

Συνοριακές συνθήκες:

$$y(0) = 0 \quad \text{και} \quad y'(x) = -1$$

Θέτουμε $y(x) = e^{ax}$: $a^2 y - 3ay + 2y = 0 \Rightarrow (a^2 - 3a + 2)y = 0$

$$\Rightarrow (a - 2)(a - 1) = 0$$

$$a = 1, a = 2$$

Επομένως, η γενική λύση της εξίσωσης είναι η: $y(x) = c_1 e^x + c_2 e^{2x}$

Από τις
συνοριακές
συνθήκες:

$$y(0) = 0 \Rightarrow c_1 e^0 + c_2 e^0 = 0 \Rightarrow c_1 + c_2 = 0$$

$$y'(0) = c_1 e^0 + 2c_2 e^0 = -1 \Rightarrow c_1 + 2c_2 = -1$$

$$c_1 = 1, c_2 = -1$$

Η λύση που ικανοποιεί τις
συνοριακές συνθήκες είναι η:

$$y(x) = e^x - e^{2x}$$

Άσκηση 3

Η κυματοσυνάρτηση ενός ηλεκτρονίου στην κατώτερη ενεργειακή στάθμη του ατόμου του υδρογόνου είναι ανάλογη του:

$$e^{-r/a_0}$$

a_0 είναι μια σταθερά και r η απόσταση του ηλεκτρονίου από τον πυρήνα.

Να υπολογιστεί η σχετική πιθανότητα εύρεσης του ηλεκτρονίου σε περιοχή όγκου $1,0 \text{ pm}^3$ (α) στον πυρήνα, και (β) σε απόσταση a_0 από τον πυρήνα.

Ο όγκος είναι πολύ μικρός ακόμα και για τις διαστάσεις του ατόμου.

Επομένως, μπορεί να αγνοηθεί η μεταβολή του ψ μέσα στον όγκο αυτό και να θεωρηθεί πως η πιθανότητα P είναι ανάλογη του γινομένου της πυκνότητας πιθανότητας επί τον όγκο.

$$P \sim \psi^2 \delta V \Rightarrow P \sim e^{-2r/a_0} \delta V \quad \text{(a) } r=0 \rightarrow P \sim e^0 \times (1.0 \text{ pm}^3)$$

$$\psi \sim e^{-r/a_0}$$

$$\text{(b) } r=a_0 \rightarrow P \sim e^{-2} \times (1.0 \text{ pm}^3)$$

$$\delta V = 1.0 \text{ pm}^3$$

$$\frac{\text{(a)}}{\text{(b)}} = \frac{1.0}{0.14} = 7.1$$

Είναι 7 φορές πιθανότερο το ηλεκτρόνιο να βρίσκεται στο μικροσκοπικό αυτό όγκο, αν αυτός βρίσκεται κοντά στον πυρήνα.

Άσκηση 4

Να κανονικοποιηθεί η κυματοσυνάρτηση για το άτομο του υδρογόνου.

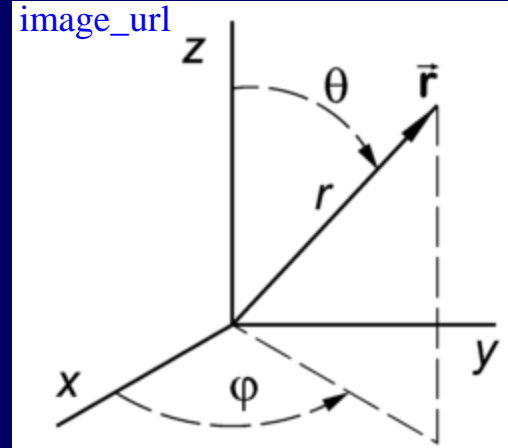
$$\psi \sim e^{-r/a_0}$$

Επειδή το σύστημα είναι σφαιρικό, θα χρησιμοποιήσουμε σφαιρικές πολικές συντεταγμένες.

$$\int_0^{\infty} \int_0^{\pi} \int_0^{2\pi} \psi^* \psi r^2 \sin \theta dr d\theta d\phi = 1$$

$$\psi^* \psi = N^2 e^{-2r/a_0}$$

$$\int_0^{\infty} x^n e^{-ax} dx = \frac{n!}{a^{n+1}}$$



$$\int \psi^* \psi d\tau = N^2 \int_0^{\infty} r^2 e^{-2r/a_0} dr \int_0^{\pi} \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} d\phi$$

$$= N^2 \left[\frac{2}{(2/a_0)^3} \right] [-\cos \theta]_0^{\pi} [\phi]_0^{2\pi} = N^2 \left(\frac{a_0^3}{4} \right) \times (2) \times (2\pi)$$

$$\int \psi^* \psi d\tau = \pi N^2 a_0^3$$

Άσκηση 4

Να κανονικοποιηθεί η κυματοσυνάρτηση για το άτομο του υδρογόνου.

$$\psi \sim e^{-r/a_0}$$

$$\left. \begin{aligned} \int \psi^* \psi d\tau &= \pi N^2 a_0^3 \\ \int \psi^* \psi d\tau &= 1 \end{aligned} \right\} N = \left(\frac{1}{\pi a_0^3} \right)^{1/2}$$

Επομένως, η κανονικοποιημένη κυματοσυνάρτηση θα είναι η:

$$\psi = \left(\frac{1}{\pi a_0^3} \right)^{1/2} e^{-r/a_0}$$

Το a_0 έχει διαστάσεις μήκους, επομένως το ψ έχει διαστάσεις $1/\mu\eta\kappa\omicron\varsigma^{3/2}$ και το ψ^2 διαστάσεις $1/\mu\eta\kappa\omicron\varsigma^3$ (π.χ. $1/m^3$), όπως άλλωστε αναμένεται για την πυκνότητα πιθανότητας.

Άσκηση 5

Δείξτε ότι $e^{i\pi} = -1$ και σχολιάστε το αποτέλεσμα.

$$e^{i\theta} = \cos \theta + i \sin \theta$$

$$e^{i\pi} = \cos \pi + i \sin \pi = -1 + 0 = -1$$

Πρόκειται για μια εκπληκτική εξίσωση! Δείχνει ότι ένας υπερβατικός αριθμός (e) υψωμένος στο γινόμενο ενός φανταστικού αριθμού (i) και ενός άλλου υπερβατικού αριθμού (π) είναι ακέραιος.

Σημείωση:

Αλγεβρικός: Είναι κάθε αριθμός, α , ο οποίος δύναται να είναι ρίζα ενός πολυωνύμου με ακεραίους συντελεστές.

Υπερβατικός: Είναι κάθε αριθμός, ξ , ο οποίος δεν είναι αλγεβρικός.

Άλυτες Ασκήσεις

Να κανονικοποιηθεί η συνάρτηση $\psi = \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$ όπου $n=1,2,3,\dots$ στην περιοχή $0 \leq x \leq L$.

Να κανονικοποιηθεί η συνάρτηση $\psi = c$ στην περιοχή $-L \leq x \leq L$.

Η κυματοσυνάρτηση του τροχιακού $2p_y$ του ατόμου του υδρογόνου είναι η

$$\psi_{2p_y} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} r e^{-r/2} \sin \theta \sin \phi$$

Δείξτε ότι η κυματοσυνάρτηση είναι κανονικοποιημένη.

Χρήσιμες σχέσεις:

$$\int \sin^2 ax dx = \frac{x}{2} - \frac{\sin 2ax}{4a}$$

$$\int_0^{\infty} x^n e^{-ax} dx = \frac{n!}{a^{n+1}}$$

$$\int \sin^3 ax dx = -\frac{3 \cos ax}{4a} + \frac{\cos 3ax}{12a}$$

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.