ΦΥΣΙΚΟΧΗΜΕΙΑ Ι

Ασκήσεις

Ενότητα 5
Μεταφορική και Ταλαντωτική Κίνηση

Δημήτρης Κονταρίδης
Αναπληρωτής Καθηγητής

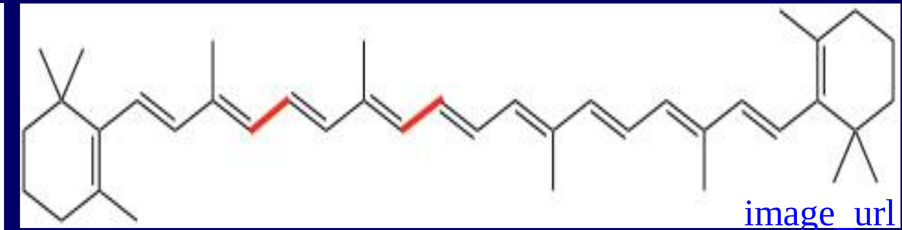
Πολυτεχνική Σχολή
Τμήμα Χημικών Μηχανικών

Εφαρμογές

Μεταφορική κίνηση

Άσκηση 1

Το **β-καροτένιο** είναι ένα γραμμικό πολυένιο στο οποίο εναλλάσσονται 10 απλοί και 10 διπλοί δεσμοί κατά μήκος μιας αλυσίδας 22 ατόμων άνθρακα.



Αν θεωρήσουμε πως το μήκος κάθε δεσμού C-C είναι περίπου 140 pm, τότε το ολικό μήκος του **μοριακού κιβωτίου** στο β-καροτένιο είναι L=0,294 nm.

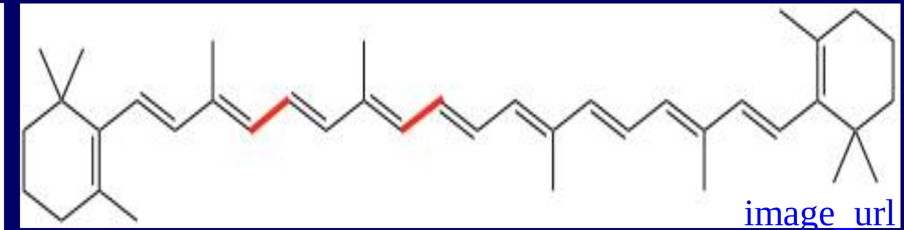
Ποια είναι η **ελάχιστη** ενέργεια που απαιτείται για τη διέγερση του μορίου από την **κατώτερη** ενεργειακή του κατάστασή;

Κάθε άτομο άνθρακα συνεισφέρει ένα p-ηλεκτρόνιο στα π τροχιακά και, επομένως, υπάρχουν **22 ηλεκτρόνια** τα οποία μπορούν να κινούνται κατά μήκος του μορίου.

Σε κάθε τροχιακό “χωρούν” 2 ηλεκτρόνια. Άρα, στην κατώτερη ενεργειακή κατάσταση, κάθε επίπεδο μέχρι το n=11 θα είναι κατειλημμένο.

Άσκηση 1

Το β-καροτένιο είναι ένα γραμμικό πολυένιο στο οποίο εναλλάσσονται 10 απλοί και 10 διπλοί δεσμοί κατά μήκος μιας αλυσίδας 22 ατόμων άνθρακα.



Αν θεωρήσουμε πως το μήκος κάθε δεσμού C-C είναι περίπου 140 pm, τότε το ολικό μήκος του μοριακού κιβωτίου στο β-καροτένιο είναι L=0.294 nm.

Για τη διέγερση ενός ηλεκτρονίου από την κατώτερη στάθμη (n=11) στην αμέσως επόμενη (n=12), απαιτείται ενέργεια:

$$E_{n+1} - E_n = (2n+1)\frac{h^2}{8mL^2} = (2\times 11+1)\frac{\left(6,626\times 10^{-34}\,Js\right)^2}{8\times\left(9,110\times 10^{-31}\,kg\right)\left(2,94\times 10^{-10}\,m\right)^2}$$

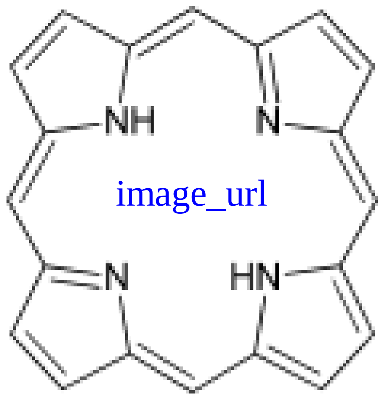
$$\Rightarrow \boxed{\Delta E = 1,60\times 10^{-19}\,J} \qquad \Delta E = h\nu \Rightarrow \boxed{\nu = 2,41\times 10^{14}\,s^{-1}}$$

Η πειραματική τιμή είναι ν=6.03x10^{14} s^{-1} (λ=497 nm) και αντιστοιχεί σε ακτινοβολία στην ορατή περιοχή του ηλεκτρομαγνητικού φάσματος.

Άσκηση 2

Πολλές πρωτεΐνες περιέχουν μόρια μεταλλοπορφυρίνης. Η πορφυρίνη είναι ένα επίπεδο μόριο και, επομένως, τα 22 π ηλεκτρόνιά της μπορεί να θεωρηθεί ότι βρίσκονται περιορισμένα σε ένα τετράγωνο πλευράς L=1000 pm.

Να υπολογιστεί η ελάχιστη ενέργεια απορρόφησης του μορίου της πορφυρίνης (πειραματική τιμή ~ 17000 cm^{-1}.



Ενεργειακό επίπεδο	(n_x, n_y)	Εκφυλισμός
E_{11}	(1, 1)	1
E_{12}	(1, 2) (2, 1)	2
E_{22}	(2,2)	1
E_{31}	(3, 1) (1, 3)	2
E_{23}	(3, 2) (2, 3)	2
E_{41}	(4, 1) (1, 4)	2
E_{33}	(3, 3)	1
E_{42}	(4, 2) (2, 4)	2
E_{43}	(4, 3) (3, 4)	2

Τα ενεργειακά επίπεδα σωματιδίου σε διδιάστατο κιβώτιο πλευράς L δίνονται από την εξίσωση

$$E_{n_x,n_y} = \frac{h^2}{8mL^2}\left(n_x^2 + n_y^2\right)$$

όπου n_1= 1,2,… και n_2=1,2,… είναι κβαντικοί αριθμοί.

Τα επίπεδα $E_{\mathrm{nx,ny}}$ είναι απλά εκφυλισμένα για $n_x=n_y$ και διπλά εκφυλισμένα για $n_x \neq n_y$.

Άσκηση 2

$$E_{n_x,n_y} = \frac{h^2}{8mL^2}\left(n_x^2 + n_y^2\right)$$

Επειδή σε κάθε ενεργειακό επίπεδο «χωρούν» 2 π-ηλεκτρόνια, η ανώτερη κατειλημμένη στάθμη είναι η $E_{3,3}$ και η κατώτερη μη κατειλημμένη στάθμη είναι η $E_{4,2}$.

Επομένως, η ενεργειακή μετάπτωση που ζητείται είναι η $E_{3,3} \rightarrow E_{4,2}$.

Ενεργειακό επίπεδο	(n_x, n_y)	Εκφυλισμός	Ηλεκτρόνια επιπέδου
E_{11}	(1, 1)	1	2
E_{12}	(1, 2) (2, 1)	2	4
E_{22}	(2,2)	1	2
E_{31}	(3, 1) (1, 3)	2	4
E_{23}	(3, 2) (2, 3)	2	4
E_{41}	(4, 1) (1, 4)	2	4
E_{33}	(3, 3)	1	2
E_{42}	(4, 2) (2, 4)	2	4
E_{43}	(4, 3) (3, 4)	2	4

22 e^-

Άσκηση 2

$$E_{n_x,n_y} = \frac{h^2}{8mL^2}\left(n_x^2 + n_y^2\right)$$

Επειδή σε κάθε ενεργειακό επίπεδο «χωρούν» 2 π-ηλεκτρόνια, η ανώτερη κατειλημμένη στάθμη είναι η $E_{3,3}$ και η κατώτερη μη κατειλημμένη στάθμη είναι η $E_{4,2}$.

Επομένως, η ενεργειακή μετάπτωση που ζητείται είναι η $E_{3,3} \rightarrow E_{4,2}$.

$$\Delta E = E_{4,2} - E_{3,3} = \frac{h^2}{8mL^2}\left((4^2+2^2)-(3^2+3^2)\right) = \left(\frac{h^2}{8mL^2}\right)\times 2 \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \Delta E = 1,20\times 10^{-19}\ \text{J}$$

$$E = hc\bar{\nu} \Rightarrow \bar{\nu} = 6061\ \text{cm}^{-1}$$

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

$$m = 9,11\times 10^{-31}\ \text{kg}$$

$$L = 1000\times 10^{-12}\ \text{m}$$

Άλυτες Ασκήσεις

Σωματίδιο μάζας m=3,4×10^{-30} kg βρίσκεται εντός απειρόβαθου φρέατος δυναμικού μήκους L=1Å. Οι ιδιοσυναρτήσεις που περιγράφουν την κατάσταση του σωματιδίου έχουν τη μορφή:

$$\psi_n(x) = A_n \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$$

(α) Να υπολογιστεί η τιμή της σταθεράς A_n από τη συνθήκη κανονικοποίησης.

(β) Δίνεται ότι η κατάσταση του σωματιδίου περιγράφεται από την κυματοσυνάρτηση

$$\psi(x) = \frac{\sqrt{2}}{2}\psi_1(x) + \frac{\sqrt{2}}{4}\psi_2(x) + c\psi_3(x)$$

όπου $\psi_1(x), \psi_2(x), \psi_3(x)$, είναι οι αντίστοιχες κανονικοποιημένες ιδιοσυναρτήσεις. Ποια η τιμή της σταθεράς c ώστε η $\psi(x)$ να είναι κανονικοποιημένη;

(γ) Στην περίπτωση του παραπάνω υποερωτήματος, υπολογίστε την αναμενόμενη τιμή της ενέργειας $\langle E \rangle$.

(δ) Υπολογίστε την πιθανότητα η ενέργεια του σωματιδίου να είναι ίση με (i) 10 eV, (ii) 20 eV και (iii) 40 eV.

Άλυτες Ασκήσεις

Θεωρούμε σωματίδιο εντός απειρόβαθου φρέατος δυναμικού μήκους L που βρίσκεται σε κατάσταση :

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$$

(α) Ποια η πιθανότητα να εντοπιστεί το σωματίδιο στο αριστερό «τέταρτο» του φρέατος;

(β) Ποια η τιμή του κβαντικού αριθμού n που μεγιστοποιεί αυτήν την πιθανότητα;

(γ) Ποιο το όριο της πιθανότητας καθώς $n \to \infty$;

(δ) Ποια αρχή διαφαίνεται μέσω του υποερωτήματος (γ);

Εφαρμογές

Ταλαντωτική κίνηση

Άσκηση 1

Να υπολογιστεί η ενέργεια μηδενικού σημείου ενός αρμονικού ταλαντωτή, ο οποίος αποτελείται από σωματίδιο μάζας *m*= 2,33x10^{-26} kg και έχει σταθερά δύναμης ίση με 155 N m^{-1}.

$$E = \left(\upsilon + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega \qquad \upsilon = 0, 1, 2, \ldots$$

$$\omega = \sqrt{\frac{k}{m}} = \sqrt{\frac{155\ \text{N m}^{-1}}{2{,}33\times10^{-26}\ \text{kg}}} = 8{,}156\times10^{13}\ \text{s}^{-1}$$

$$E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega = \frac{1}{2}\times\left(1{,}055\times10^{-34}\ \text{J s}\right)\times\left(8{,}16\times10^{13}\ \text{Hz}\right) \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \boldsymbol{E_0 = 4{,}30\times10^{-21}\ \text{J}}$$

Άσκηση 2

Ιόν σε κρυσταλλικό πλέγμα έχει δυναμική ενέργεια $V(x)=\frac{1}{2}m\omega^2x^2$. Το ιόν περιγράφεται από την ιδιοσυνάρτηση:

$$\psi(x)=xe^{-x^2/2a^2}$$

Να υπολογιστούν (α) η ολική ενέργεια E και (β) η τιμή της σταθεράς a.

Χρησιμοποιούμε την εξίσωση Schrodinger:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi+V\psi=E\psi$$

Άσκηση 2

Ιόν σε κρυσταλλικό πλέγμα έχει δυναμική ενέργεια $V(x)=\boxed{\frac{1}{2}m\omega^2 x^2}$. Το ιόν περιγράφεται από την ιδιοσυνάρτηση:

$$\psi(x)=\boxed{xe^{-x^2/2a^2}}$$

Να υπολογιστούν (α) η ολική ενέργεια E και (β) η τιμή της σταθεράς α.

$$\frac{d^2}{dx^2}\psi=\ldots=\boxed{e^{-x^2/2a^2}\left(-\frac{3x}{a^2}+\frac{x^3}{a^4}\right)}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\boxed{\frac{d^2}{dx^2}}\psi+\boxed{V}\psi=E\psi$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{x^3}{a^4}-\frac{3x}{a^2}\right)e^{-x^2/2a^2}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2\left(xe^{-x^2/2a^2}\right)=E\left(xe^{-x^2/2a^2}\right)\Rightarrow$$

$$\Rightarrow\ldots\Rightarrow\left(\frac{m\omega^2}{2}-\frac{\hbar^2}{2ma^4}\right)x^3+\left(\frac{3\hbar^2}{2ma^2}-E\right)x=0$$

Άσκηση 2

Ιόν σε κρυσταλλικό πλέγμα έχει δυναμική ενέργεια $V(x)=\frac{1}{2}m\omega^2 x^2$. Το ιόν περιγράφεται από την ιδιοσυνάρτηση:

$$\psi(x)=xe^{-x^2/2a^2}$$

Να υπολογιστούν (α) η ολική ενέργεια E και (β) η τιμή της σταθεράς a.

Η εξίσωση αυτή ικανοποιείται όταν:

$$\frac{m\omega^2}{2}-\frac{\hbar^2}{2ma^4}=0 \Rightarrow \boxed{a=\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}}$$

και

$$\frac{3\hbar^2}{2ma^2}-E=0 \Rightarrow \boxed{E=\frac{3}{2}\hbar\omega}$$

Άρα n=1
(1η διεγερμένη κατάσταση)

$$\Rightarrow \ldots \Rightarrow \left(\frac{m\omega^2}{2}-\frac{\hbar^2}{2ma^4}\right)x^3+\left(\frac{3\hbar^2}{2ma^2}-E\right)x=0$$

Άλυτες Ασκήσεις

Η διαφορά μεταξύ των διαδοχικών ενεργειακών σταθμών ενός αρμονικού ταλαντωτή μάζας $1{,}33 \times 10^{-25}$ kg είναι ίση με $4{,}82 \times 10^{-21}$ J. Να υπολογιστεί η σταθερά δύναμης του ταλαντωτή.

Το φάσμα ταλάντωσης του $^{1}H^{9}F$ αποτελείται από μια ταινία στο εγγύς υπέρυθρο με κυματαριθμό $\bar{\nu} = 3958 \text{ cm}^{-1}$. Να υπολογιστούν:

(α) Η θεμελιώδης συχνότητα ταλάντωσης (Hz) του μορίου και η αντίστοιχη γωνιακή ταχύτητα (rad/sec).

(β) Η ενέργεια μηδενικού σημείου (eV).

(γ) Η ισοδύναμη σταθερά του ελατηρίου.

***Δίνονται*:**

Ατομική μονάδα μάζας:	$1\, m_u = 1.66054 \times 10^{-27}$ kg
Σταθερά του Planck:	$h = 6{,}62608 \times 10^{-34}$ J s
Ταχύτητα του φωτός:	$c = 2{,}99792458 \times 10^{8}$ m s^{-1}
Χρήσιμη σχέση:	$1 \text{ eV} = 1{,}60219 \times 10^{-19}$ J

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

Διαθέσιμο από τη δικτυακή διεύθυνση:

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

Σημείωμα αδειοδότησης