ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΠΑΤΡΩΝ
UNIVERSITY OF PATRAS

ΑΝΟΙΚΤΑ ακαδημαϊκά μαθήματα

ΦΥΣΙΚΟΧΗΜΕΙΑ Ι

Ασκήσεις

Ενότητα 8
Ατομικά Τροχιακά

Δημήτρης Κονταρίδης
Αναπληρωτής Καθηγητής

Πολυτεχνική Σχολή
Τμήμα Χημικών Μηχανικών

Άσκηση 1

Να υπολογιστεί η πιθανότερη ακτίνα, r^*, στην οποία θα βρίσκεται ένα ηλεκτρόνιο που καταλαμβάνει το τροχιακό 1*s* ενός υδρογονοειδούς ατόμου.

Η πιθανότερη ακτίνα αντιστοιχεί στο μέγιστο της καμπύλης $P(r)$.

Αντιστοιχεί στο σημείο της καμπύλης όπου:

$$\frac{dP}{dr} = 0$$

Για το τροχιακό 1*s* :

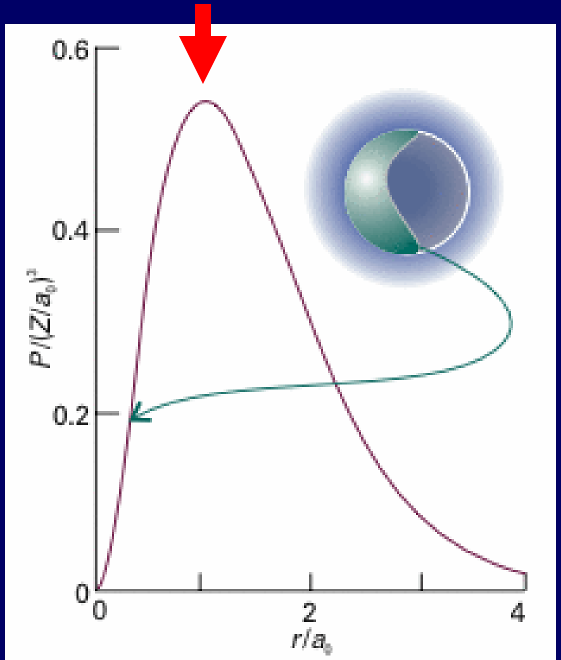
$$P(r) = 4\frac{Z^3}{a_0^3} r^2 e^{-2Zr/a_0}$$

$$\frac{dP}{dr} = 4\frac{Z^3}{a_0^3}\left(2r - \frac{2Zr^2}{a_0}\right)e^{-2Zr/a_0} = 0$$

$$\Rightarrow \left(2r - \frac{2Zr^2}{a_0}\right) = 0 \Rightarrow r^* = \frac{\boxed{a_0}}{Z}$$

52.9 pm

	H	He^+	Li^{2+}	Be^{3+}	B^{4+}	C^{5+}	N^{6+}	O^{7+}	F^{8+}	Ne^{9+}
r^*/pm	52.9	26.5	17.6	13.2	10.6	8.82	7.56	6.61	5.88	5.29



Άσκηση 2

Να προσδιοριστούν τα τροχιακά στα μπορεί να υποστεί μετάπτωση ένα ηλεκτρόνιο $4d$ με εκπομπή φωτονίου.

Αρχική κατάσταση | **Επιτρεπτές τελικές καταστάσεις**

Αρχική κατάσταση	Επιτρεπτές τελικές καταστάσεις	
$l = 2$	$l = 1$	$l = 3$
$4d$	np	nf

$$\Delta m_l = 0, \pm 1$$

$$\Delta l = \pm 1$$

$$\Delta m_l = 0, \pm 1$$

Μαθηματικό βοήθημα

Σφαιρικές συντεταγμένες

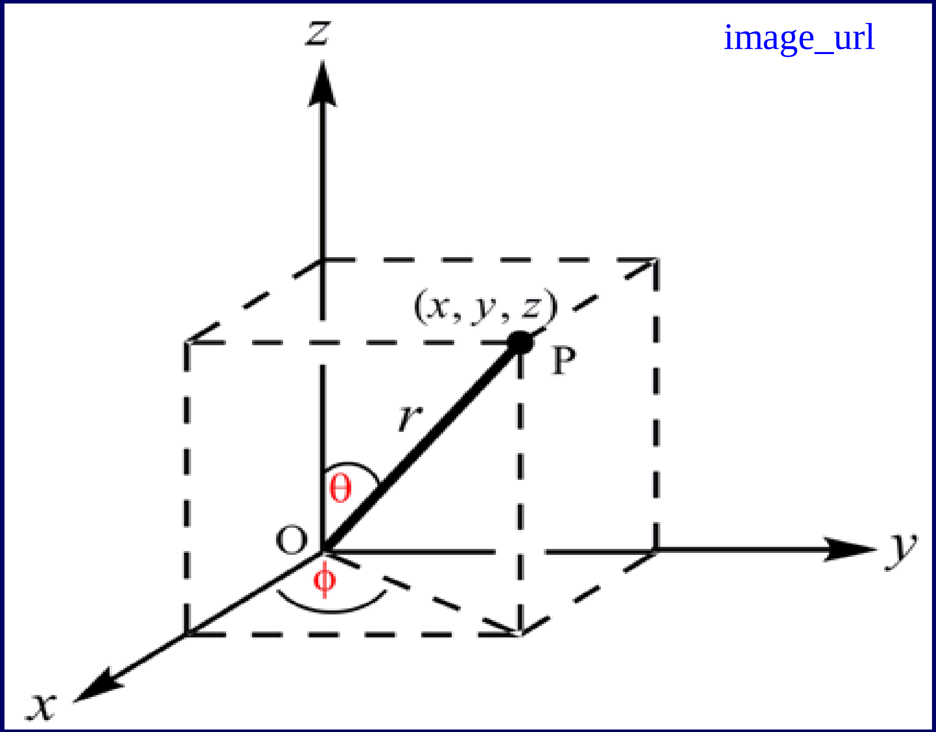
Η περιγραφή των ατομικών (και άλλων) συστημάτων όπου υπάρχει ένα φυσικό “κέντρο” γίνεται ευκολότερα με χρήση σφαιρικών συντεταγμένων.

Στο σύστημα αυτό, ένα σημείο ορίζεται από τις σφαιρικές συντεταγμένες r, θ και φ, οι οποίες σχετίζονται με τις καρτεσιανές ως εξής:

$$x = r\sin\theta\cos\phi$$

$$y = r\sin\theta\sin\phi$$

$$z = r\cos\theta$$



Οι αντίστοιχες σχέσεις για μετατροπή των καρτεσιανών σε σφαιρικές συντεταγμένες είναι:

$$r = \left(x^2 + y^2 + z^2\right)^{1/2}$$

$$\cos\theta = \frac{z}{\left(x^2 + y^2 + z^2\right)^{1/2}}$$

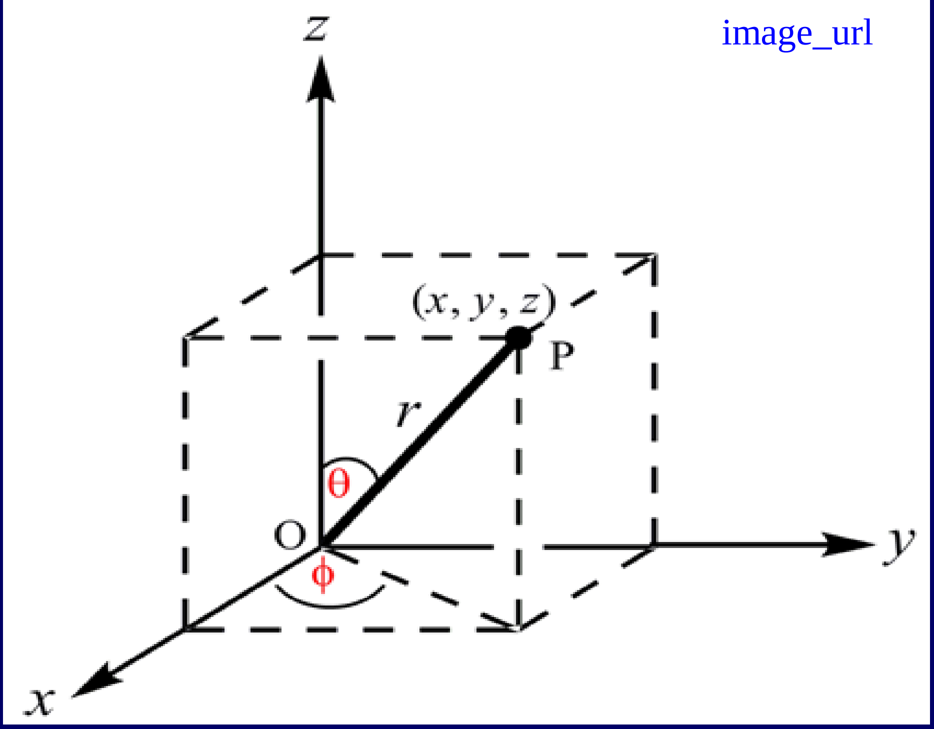
$$\tan\phi = \frac{y}{x}$$

Σφαιρικές συντεταγμένες

Κάθε σημείο στην επιφάνεια σφαίρας με μοναδιαία ακτίνα μπορεί να οριστεί από τις τιμές των θ και φ.

Η γωνία θ αναπαριστά την απόκλιση από το "βόρειο πόλο" της σφαίρας και, επομένως, $0 \le \theta \le \pi$

Η γωνία φ αναπαριστά την απόκλιση γύρω από τον "ισημερινό" της σφαίρας (κατά σύμβαση από τον άξονα x) και, επομένως, $0 \le \phi \le 2\pi$ **.**



Εφόσον το r είναι η απόσταση από το την αρχή των αξόνων (κέντρο της σφαίρας), λαμβάνει θετικές τιμές: $0 \le r < \infty$ **.**

Στις καρτεσιανές συντεταγμένες, ο στοιχειώδης όγκος είναι:

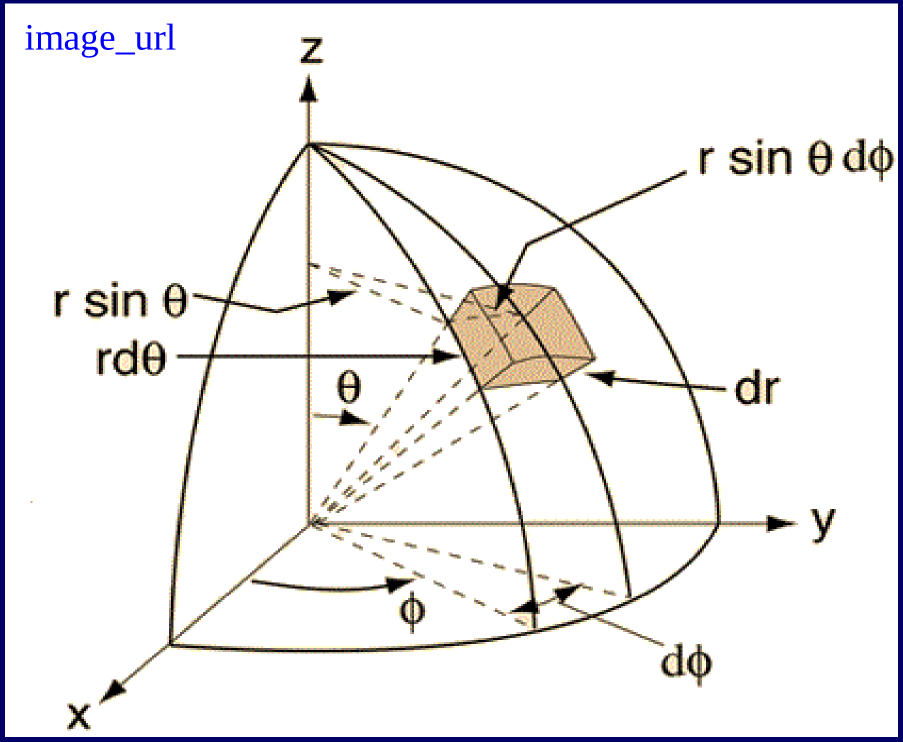
$$d\tau = dx\,dy\,dz$$

Στις σφαιρικές συντεταγμένες τα πράγματα δεν είναι τόσο απλά.

Σφαιρικές συντεταγμένες

Όπως γίνεται αντιληπτό από το Σχήμα, ο **στοιχειώδης όγκος** στις σφαιρικές συντεταγμένες δίνεται από τον τύπο:

$$dV = \left(r\sin\theta d\phi\right)\left(rd\theta\right)dr \Rightarrow dV = r^2 \sin\theta\, dr\, d\theta\, d\phi$$



Η **στοιχειώδης επιφάνεια** στην επιφάνεια σφαίρας ακτίνας r είναι:

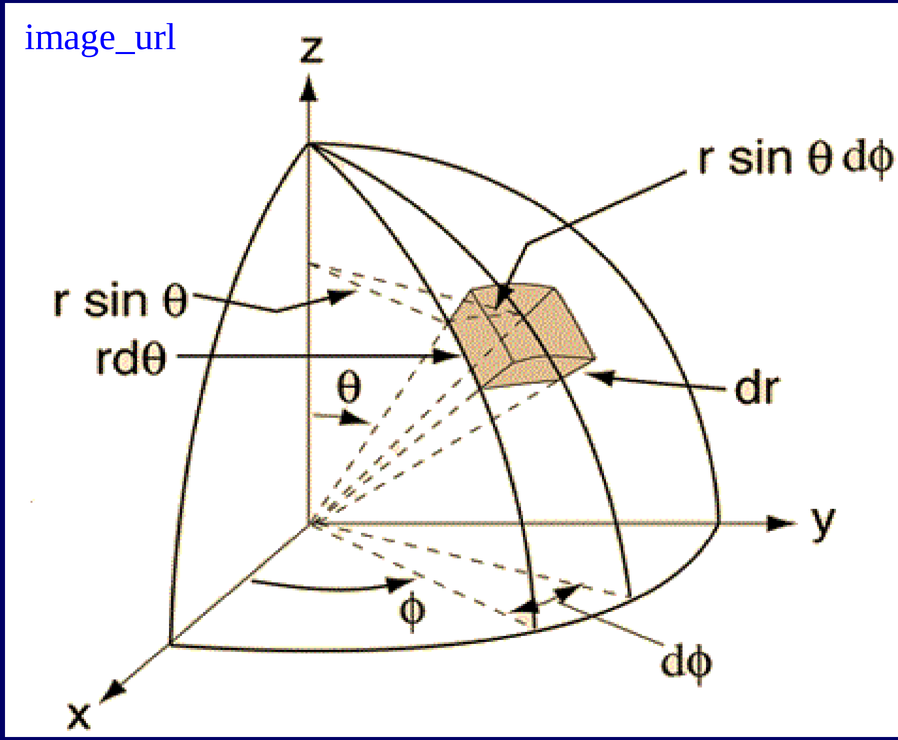
$$dA = r^2 \sin\theta\, d\theta\, d\phi$$

Σφαιρικές συντεταγμένες

Όπως γίνεται αντιληπτό από το Σχήμα, ο **στοιχειώδης όγκος** στις σφαιρικές συντεταγμένες δίνεται από τον τύπο:

$$dV = (r\sin\theta d\phi)(rd\theta)dr \Rightarrow dV = r^2\sin\theta\, dr\, d\theta\, d\phi$$

Η εξίσωση αυτή μπορεί να χρησιμοποιηθεί για τον υπολογισμό του **όγκου** μιας σφαίρας με ακτίνα a:



$$V = \int_0^a r^2 dr \int_0^\pi \sin\theta d\theta \int_0^{2\pi} d\phi =$$

$$= \left(\frac{\alpha^3}{3}\right)(2)(2\pi) \Rightarrow$$

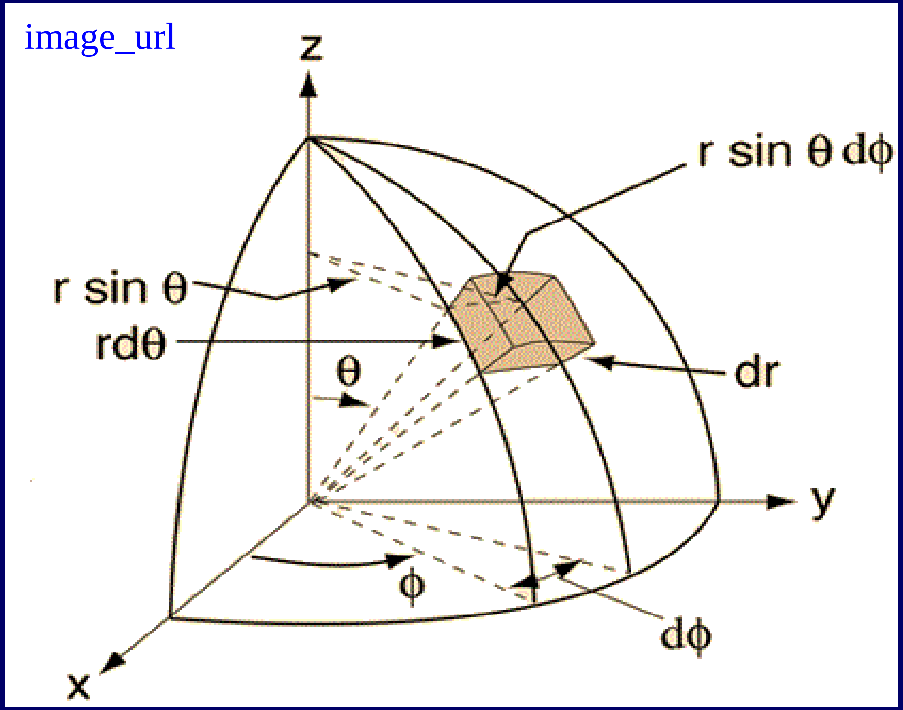
$$\Rightarrow V = \frac{4\pi a^3}{3}$$

Σφαιρικές συντεταγμένες

Όπως γίνεται αντιληπτό από το Σχήμα, ο στοιχειώδης όγκος στις σφαιρικές συντεταγμένες δίνεται από τον τύπο:

$$dV = \left(r\sin\theta d\phi\right)\left(rd\theta\right)dr \;\Rightarrow dV = r^2 \sin\theta\, dr\, d\theta\, d\phi$$

Με παρόμοιο τρόπο, εάν η ολοκλήρωση γίνει μόνο ως προς θ και φ, υπολογίζεται ο όγκος σφαιρικού φλοιού ακτίνας r και πάχους dr:



$$dV = r^2 dr\int_0^{\pi}\sin\theta d\theta\int_0^{2\pi} d\phi \Rightarrow$$

$$dV = \boxed{4\pi r^2}dr$$

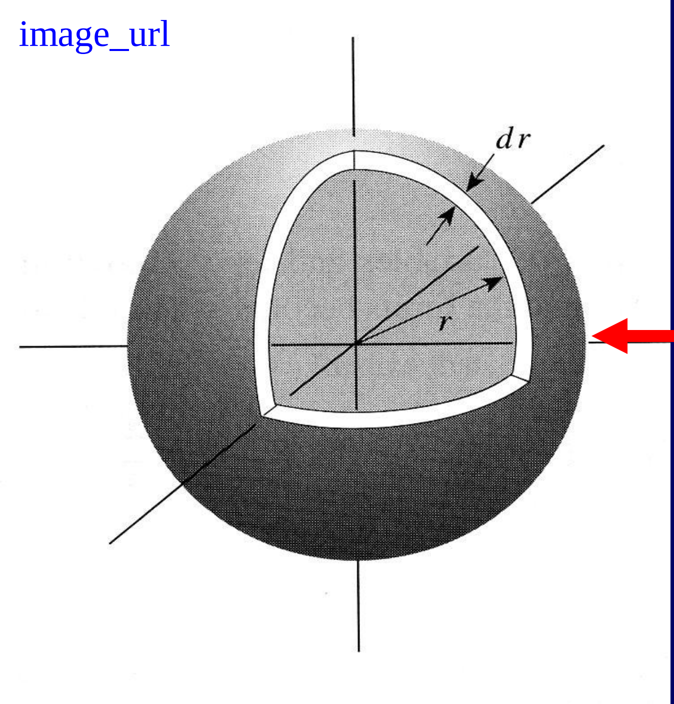
Επιφάνεια σφαίρας

Σφαιρικές συντεταγμένες

Όπως γίνεται αντιληπτό από το Σχήμα, ο στοιχειώδης όγκος στις σφαιρικές συντεταγμένες δίνεται από τον τύπο:

$$dV = \left(r\sin\theta d\phi\right)\left(rd\theta\right)dr \Rightarrow dV = r^2 \sin\theta\, dr\, d\theta\, d\phi$$

Με παρόμοιο τρόπο, εάν η ολοκλήρωση γίνει μόνο ως προς θ και φ, υπολογίζεται ο όγκος σφαιρικού φλοιού ακτίνας r και πάχους dr:



$$dV = 4\pi r^2\, dr$$

Άσκηση 3

Θεωρήστε ηλεκτρόνιο στο άτομο του υδρογόνου, το οποίο χαρακτηρίζεται από τους κβαντικούς αριθμούς n=2, l=1, m_l=0.

(α) Ποια κυματοσυνάρτηση περιγράφει την κατάσταση του ηλεκτρονίου;

(β) Να προσδιοριστούν τα σημεία του χώρου όπου υπάρχει η μεγαλύτερη πιθανότητα να εντοπιστεί το ηλεκτρόνιο όταν βρίσκεται σε αυτή την κατάσταση.

(γ) Να υπολογιστεί η ολική ενέργεια (σε eV) σε αυτήν την κατάσταση. Πόσες καταστάσεις του ατόμου υπάρχουν με αυτή την ενέργεια;

(δ) Να υπολογιστεί η συνολική στροφορμή καθώς και η z-συνιστώσα της.

Δίνονται

Μάζα ηλεκτρονίου: $m_e = 9,10939\times10^{-31}\,\mathrm{kg}$

Στοιχειώδες φορτίο: $e = 1,602177\times10^{-19}\,\mathrm{C}$

Διαπερατότητα κενού: $\varepsilon_0 = 8,85419\times10^{-12}\ \mathrm{J^{-1}C^2\,m^{-1}}$

Σταθερά του Planck: $\hbar = 1,05457\times10^{-34}\ \mathrm{J}\,s$

Χρήσιμες σχέσεις

$1\ \mathrm{eV} = 1,60219\times10^{-19}\ \mathrm{J}$

Άσκηση 3

(α) Ποια κυματοσυνάρτηση περιγράφει την κατάσταση του ηλεκτρονίου με $n=2$, $l=1$, $m_l=0$

$$\psi_{2,1,0} = R_{2,1}(r)Y_{1,0}(\theta,\phi)$$

Σφαιρικές αρμονικές

image_url

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

Ακτινικές συναρτήσεις υδρογονοειδών

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	$\frac{1}{8^{1/2}}\left(\frac{Z}{a}\right)^{3/2}(2-\rho)e^{-\rho/2}$
2p	2	1	$\frac{1}{24^{1/2}}\left(\frac{Z}{a}\right)^{3/2}\rho e^{-\rho/2}$
3s	3	0	$\frac{1}{243^{1/2}}\left(\frac{Z}{a}\right)^{3/2}(6-6\rho+\rho^2)e^{-\rho/2}$
3p	3	1	$\frac{1}{486^{1/2}}\left(\frac{Z}{a}\right)^{3/2}(4-\rho)\rho e^{-\rho/2}$
3d	3	2	$\frac{1}{2430^{1/2}}\left(\frac{Z}{a}\right)^{3/2}\rho^2 e^{-\rho/2}$

$$R_{2,1}(r) = \frac{1}{24^{1/2}}\left(\frac{Z}{a}\right)^{3/2}\rho e^{-\rho/2}$$

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

Άσκηση 3

(α) Ποια κυματοσυνάρτηση περιγράφει την κατάσταση του ηλεκτρονίου με $n=2$, $l=1$, $m_l=0$

$$\psi_{2,1,0} = R_{2,1}(r)Y_{1,0}(\theta,\phi) = \frac{1}{2\sqrt{6}}\left(\frac{1}{\alpha_0}\right)^{3/2}\frac{r}{a_0}e^{-\frac{r}{2a_0}}\left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/2}\cos\theta \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \boxed{\psi_{2,1,0} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}}\left(\frac{1}{\alpha_0}\right)^{3/2}\frac{r}{a_0}e^{-\frac{r}{2a_0}}\cos\theta}$$

$$Z=1,\ n=2$$

$$R_{2,1}(r) = \frac{1}{24^{1/2}}\left(\frac{Z}{a}\right)^{3/2}\rho e^{-\rho/2}$$

$$\rho = \frac{2Zr}{na_0} \Rightarrow \rho = \frac{r}{a_0}$$

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

Άσκηση 3

(β) Να προσδιοριστούν τα σημεία του χώρου όπου υπάρχει η μεγαλύτερη πιθανότητα να εντοπιστεί το ηλεκτρόνιο όταν βρίσκεται σε αυτή την κατάσταση.

$$\psi_{2,1,0} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}}\left(\frac{1}{\alpha_0}\right)^{3/2}\frac{r}{a_0}e^{-\frac{r}{2a_0}}\cos\theta$$

$$d\tau = r^2 \sin\theta \, dr \, d\theta \, d\phi$$

Η πιθανότητα P εύρεσης του σωματιδίου σε στοιχειώδη όγκο $d\tau$ είναι:

$$P = \psi^* \psi \boxed{d\tau}$$

$$P = \left(\frac{1}{32\pi a_0^5}\right)\underbrace{\left(r^4 e^{-\frac{r}{a_0}}\cos^2\theta \sin\theta\right)}_{f(r,\theta)} dr \, d\theta \, d\phi$$

Η πιθανότητα P μεγιστοποιείται όταν μεγιστοποιείται η συνάρτηση $f(r,\theta)$.

Άσκηση 3

(β) **Να προσδιοριστούν τα σημεία του χώρου όπου υπάρχει η μεγαλύτερη πιθανότητα να εντοπιστεί το ηλεκτρόνιο όταν βρίσκεται σε αυτή την κατάσταση.**

Άρα, πρέπει να βρεθούν τα σημεία του χώρου στα οποία μεγιστοποιείται η συνάρτηση: $f\left(r,\theta\right)=r^4e^{-\frac{r}{a_0}}\cos^2\theta\sin\theta$

(i) Μεγιστοποίηση ως προς r :

$$\frac{df\left(r,\theta\right)}{dr}=0\Rightarrow\frac{d}{dr}\left(r^4e^{-\frac{r}{a_0}}\right)=0\Rightarrow 4r^3e^{-\frac{r}{a_0}}-\frac{r^4}{a_0}e^{-\frac{r}{a_0}}=0\Rightarrow$$

$$\Rightarrow\left(4-\frac{r}{a_0}\right)r^3e^{-\frac{r}{a_0}}=0\Rightarrow\begin{cases} r=0 & \text{(απορρίπτεται)} \\ r=4a_0 & =2{,}1167\ \mathring{A}\end{cases}$$

Άσκηση 3

(β) Να προσδιοριστούν τα σημεία του χώρου όπου υπάρχει η μεγαλύτερη πιθανότητα να εντοπιστεί το ηλεκτρόνιο όταν βρίσκεται σε αυτή την κατάσταση.

Άρα, πρέπει να βρεθούν τα σημεία του χώρου στα οποία μεγιστοποιείται η συνάρτηση:

$$f(r,\theta) = r^4 e^{-\frac{r}{a_0}} \cos^2\theta \sin\theta$$

(ii) Μεγιστοποίηση ως προς θ :

$$\frac{df(r,\theta)}{d\theta} = 0 \Rightarrow \frac{d}{d\theta}\left(\cos^2\theta \sin\theta\right) = 0 \Rightarrow \cos^3\theta - 2\cos\theta\sin\theta = 0 \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \cos\theta\left(\cos^2\theta - 2\sin^2\theta\right) = 0 \Rightarrow \begin{cases} \cos\theta = 0 & \Rightarrow \theta = \dfrac{\pi}{2} \quad \text{(ελάχιστο)} \\ \tan^2\theta = 1/2 & \Rightarrow \theta = 35,2^{o} \\ & \theta = 144,8^{o} \end{cases}$$

Άσκηση 3

(β) Να προσδιοριστούν τα σημεία του χώρου όπου υπάρχει η μεγαλύτερη πιθανότητα να εντοπιστεί το ηλεκτρόνιο όταν βρίσκεται σε αυτή την κατάσταση.

Άρα, η πιθανότητα εύρεσης ηλεκτρονίου με κυματοσυνάρτηση

$$\psi_{2,1,0} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}}\left(\frac{1}{\alpha_0}\right)^{3/2} \frac{r}{a_0} e^{-\frac{r}{2a_0}} \cos\theta$$

μεγιστοποιείται στα σημεία όπου:

$$r = 4a_0 \qquad \theta = 35,2^{o}$$

και

$$r = 4a_0 \qquad \theta = 144,8^{o}$$

για κάθε φ $\left(0 \le \phi \le 2\pi\right)$

Άσκηση 3

Θεωρήστε ηλεκτρόνιο στο άτομο του υδρογόνου, το οποίο χαρακτηρίζεται από τους κβαντικούς αριθμούς n=2, l=1, m_l=0.

(γ) Να υπολογιστεί η ολική ενέργεια (σε eV) σε αυτήν την κατάσταση. Πόσες καταστάσεις του ατόμου υπάρχουν με αυτή την ενέργεια;

Οι ενεργειακές στάθμες υδρογονοειδούς ατόμου με κβαντικό αριθμό n υπολογίζονται από την εξίσωση:

$$E_n = -\left(\frac{Z^2 me^4}{32\pi^2\varepsilon_0^2\hbar^2}\right)\frac{1}{n^2}$$

$$\left.\begin{array}{l} Z = 1 \\ n = 2 \\ \dfrac{me^4}{32\pi^2\varepsilon_0^2\hbar^2} = 2{,}18\times10^{-18}\,\mathrm{J} \end{array}\right\} E_2 = -5{,}45\times10^{-19}\,\mathrm{J} \Rightarrow \boxed{E_2 = -3{,}4\,\mathrm{eV}}$$

Ο αριθμός των (εκφυλισμένων) καταστάσεων με την ενέργεια αυτή είναι $g=n^2$:

$$\boxed{g = 4}$$

Άσκηση 3

Θεωρήστε ηλεκτρόνιο στο άτομο του υδρογόνου, το οποίο χαρακτηρίζεται από τους κβαντικούς αριθμούς n=2, l=1, m_l=0.

(δ) Να υπολογιστεί η συνολική στροφορμή καθώς και η *z*-συνιστώσα της.

Οι τιμές αυτές υπολογίζονται από τις παρακάτω εξισώσεις, θέτοντας l=1 και m_l=0 :

$$L = \sqrt{l\left(l+1\right)}\,\hbar \; = \sqrt{2} \times \left(1,05457 \times 10^{-34} \text{ J } s\right) \Rightarrow \boxed{L = 1,49139 \times 10^{-34} \text{ J } s}$$

$$L_z = m_l\,\hbar \;\Rightarrow \boxed{L_z = 0}$$

Άσκηση 4

Να υπολογιστεί η τιμή του $<r>$ για τις καταστάσεις (α) n=2, l=0 (β) n=2, l=1 του ατόμου του υδρογόνου, και να σχολιαστεί το αποτέλεσμα.

Για ευκολία, μπορεί να χρησιμοποιηθεί η γενική σχέση:

$$\left\langle r_{n,l} \right\rangle = n^2 \left[1 + \frac{1}{2}\left(1 - \frac{l(l+1)}{n^2} \right) \right] \frac{\alpha_0}{Z}$$

$$\left\langle r_{2,0} \right\rangle = 2^2 \left[1 + \frac{1}{2}(1-0) \right] \frac{\alpha_0}{1} \Rightarrow \left\langle r_{2,0} \right\rangle = 6\alpha_0$$

$$\left\langle r_{2,1} \right\rangle = 2^2 \left[1 + \frac{1}{2}\left(1 - \frac{1(1+1)}{2^2} \right) \right] \frac{\alpha_0}{1} \Rightarrow \left\langle r_{2,1} \right\rangle = 5\alpha_0$$

***Σχόλιο*: Τα αποτελέσματα δείχνουν ότι ένα ηλεκτρόνιο στο τροχιακό 2s βρίσκεται (κατά μέσο όρο) μακρύτερα από τον πυρήνα σε σχέση με ένα ηλεκτρόνιο 2p, σε αντίθεση με όσα γνωρίζουμε από τη βασική χημεία για τα πολυηλεκτρονιακά άτομα. Αυτό οφείλεται στο ότι οι κυματοσυναρτήσεις των υδρογονοειδών ατόμων διαφέρουν από εκείνες των πολυηλεκτρονιακών.**

Άσκηση 5

Να υπολογιστεί <u>αναλυτικά</u> η τιμή του $< r >$ για την κατάσταση n=2, l=0 του ατόμου του υδρογόνου.

Βρίσκουμε πρώτα την έκφραση για την κυματοσυνάρτηση ανατρέχοντας στους Πίνακες με τις σφαιρικές αρμονικές και τις ακτινικές κυματοσυναρτήσεις:

$$R_{2,0}(r) = \frac{1}{2\sqrt{2}}\left(\frac{Z}{\alpha_0}\right)^{3/2}(2-\rho)e^{-\frac{1}{2}\rho}$$

$$\rho = \frac{2Zr}{na_0} \xrightarrow[n=2]{Z=1} \rho = \frac{r}{a_0}$$

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

$$\boxed{\psi_{2,0,0} = \frac{1}{\sqrt{32\pi}}\left(\frac{1}{\alpha_0}\right)^{3/2}\left(2-\frac{r}{\alpha_0}\right)e^{-\frac{r}{2\alpha_0}}}$$

Άσκηση 5

Να υπολογιστεί **αναλυτικά** η τιμή του **< r >** για την κατάσταση n=2, l=0 του ατόμου του υδρογόνου.

Η μέση τιμή του r υπολογίζεται από τη σχέση

$$\langle r \rangle = \int \psi_{n,l}(r,\theta,\phi)^* \; r \; \psi_{n,l}(r,\theta,\phi)\, d\tau$$

όπου

$$d\tau = r^2 \sin\theta \, dr \, d\theta \, d\phi$$

$$\langle r_{2.0,0} \rangle = \int \psi_{2,0,0}{}^* \; r^3 \; \psi_{2,0,0} \; \sin\theta \, dr \, d\theta \, d\phi$$

$$= \int \frac{1}{32\pi} \left(\frac{1}{\alpha_0}\right)^3 \left(2 - \frac{r}{\alpha_0}\right)^2 e^{-\frac{r}{\alpha_0}} \; r^3 \; \sin\theta \, dr \, d\theta \, d\phi$$

$$\boxed{\psi_{2,0,0} = \frac{1}{\sqrt{32\pi}} \left(\frac{1}{\alpha_0}\right)^{3/2} \left(2 - \frac{r}{\alpha_0}\right) e^{-\frac{r}{2\alpha_0}}}$$

Άσκηση 5

Να υπολογιστεί <u>αναλυτικά</u> η τιμή του < *r* > για την κατάσταση *n*=2, *l*=0 του ατόμου του υδρογόνου.

Η μέση τιμή του *r* υπολογίζεται από τη σχέση

$$\langle r \rangle = \int \psi_{n,l}(r,\theta,\phi)^* \; r \;\; \psi_{n,l}(r,\theta,\phi) \, d\tau$$

όπου

$$d\tau = r^2 \sin\theta \, dr \, d\theta \, d\phi$$

$$\langle r_{2.0,0} \rangle = \int \psi_{2,0,0}{}^* \; r^3 \;\; \psi_{2,0,0} \;\; \sin\theta \, dr \, d\theta \, d\phi$$

$$= \int \frac{1}{32\pi}\left(\frac{1}{\alpha_0}\right)^3 \left(2 - \frac{r}{\alpha_0}\right)^2 e^{-\frac{r}{\alpha_0}} \, r^3 \;\; \sin\theta \, dr \, d\theta \, d\phi$$

$$= \frac{1}{32\pi a_0^3} \underbrace{\int_0^\infty r^3 \left(2 - \frac{r}{\alpha_0}\right)^2 e^{-\frac{r}{\alpha_0}} \, dr}_{I_1} \; \underbrace{\int_0^\pi \sin\theta \, d\theta}_{I_2} \; \underbrace{\int_0^{2\pi} d\phi}_{I_3}$$

Άσκηση 5

Να υπολογιστεί αναλυτικά η τιμή του $<r>$ για την κατάσταση n=2, l=0 του ατόμου του υδρογόνου.

$$I_1 = \int_0^\infty r^3 \left(2 - \frac{r}{\alpha_0}\right)^2 e^{-\frac{r}{\alpha_0}}\, dr$$

Θέτουμε

$$x = r/\alpha_0 \Rightarrow r = \alpha_0 x$$

$$dx = dr/\alpha_0 \Rightarrow dr = a_0 dx$$

$$= \int_0^\infty a_0^3 x^3 (2-x)^2 e^{-x}\, a_0 dx$$

$$= 4a_0^4 \int_0^\infty x^3 e^{-x}\, dx - 4a_0^4 \int_0^\infty x^4 e^{-x}\, dx + a_0^4 \int_0^\infty x^5 e^{-x}\, dx$$

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

$$= 4a_0^4 (3!) - 4a_0^4 (4!) + a_0^4 (5!)$$

$$\Rightarrow \boxed{I_1 = 48\, a_0^4}$$

Άσκηση 5

Να υπολογιστεί <u>αναλυτικά</u> η τιμή του $< r >$ για την κατάσταση n=2, l=0 του ατόμου του υδρογόνου.

$$\boxed{I_1 = 48\, a_0^4}$$

$$I_2 = \int_0^{\pi} \sin\theta \, d\theta \; = \left[-\cos\theta\right]_0^{\pi} \Rightarrow \boxed{I_2 = 2}$$

$$I_3 = \int_0^{2\pi} d\phi \Rightarrow \boxed{I_3 = 2\pi}$$

$$\left\langle r_{2.0,0} \right\rangle = \frac{1}{32\pi a_0^3} \underbrace{\int_0^{\infty} r^3 \left(2 - \frac{r}{\alpha_0}\right)^2 e^{-\frac{r}{\alpha_0}} dr}_{I_1} \; \underbrace{\int_0^{\pi} \sin\theta \, d\theta}_{I_2} \; \underbrace{\int_0^{2\pi} d\phi}_{I_3} \Rightarrow \boxed{\left\langle r_{2.0,0} \right\rangle = 6\alpha_0}$$

Άσκηση 6

Να υπολογιστεί <u>αναλυτικά</u> η τιμή του $< r >$ για την κατάσταση n=2, l=1, m_l=0 του ατόμου του υδρογόνου.

Δίνονται:

$$R_{2,1}(r) = \frac{1}{2\sqrt{6}}\left(\frac{Z}{\alpha_0}\right)^{3/2} \rho e^{-\frac{1}{2}\rho} \qquad \rho = \frac{2Zr}{na_0}$$

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

Χρήσιμες σχέσεις:

$$\int_0^\infty x^n e^{-\lambda x} dx = \frac{n!}{\lambda^{n+1}} \qquad \int \cos^2 x \sin x \, dx = -\frac{1}{3}\cos^3 x$$

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.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

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