

Θέμα 3^ο:

(α) [10 μονάδες]. Για την θεμελιώδη κατάσταση 1s του υδρογόνου, ενώ η πυκνότητα πιθανότητας $|\Psi_{1s}|^2$ είναι μέγιστη στην αρχή των αξόνων, η πιθανότητα $P(r)$ να βρεθεί το ηλεκτρόνιο σε απόσταση r από τον πυρήνα μηδενίζεται στην αρχή των αξόνων. Εξηγήστε γιατί. Δίνεται: $\Psi_{1s} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2} e^{-r/a_0}$.

Απάντηση:

$$P(r) = |\Psi_{1s}|^2 dV = \left| \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2} e^{-r/a_0} \right|^2 r^2 \sin\theta \cos\theta dr d\theta d\phi \sim |r e^{-r/a_0}|^2 \Rightarrow P(r=0) = 0$$

(β) [5 μονάδες]. Ένα ηλεκτρόνιο βρίσκεται στην κατάσταση $4F_{5/2}$. i) Βρείτε τις τιμές των κβαντικών αριθμών n , ℓ και j . ii) Ποιο είναι το μέτρο της ολικής στροφορμής του ηλεκτρονίου; iii) Ποιες είναι οι δυνατές τιμές της συνιστώσας z της ολικής στροφορμής του ηλεκτρονίου;

Απάντηση:

i) $n = 4, \ell = 4, j = 5/2$

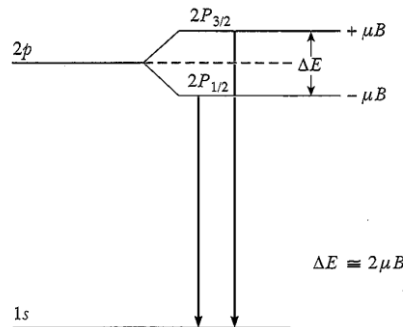
ii) $J = \sqrt{j(j+1)}\hbar = \sqrt{35}/2\hbar$

iii) $J_z = m_j \hbar, m_j \in \{J_{min}, J_{max}\} = \{-5/2, -3/2, -1/2, 1/2, 3/2, 5/2\}$

(γ) [10 μονάδες]. Θεωρείστε τις στάθμες 1s και 2p του υδρογόνου.: i) Παρουσιάστε σε ενεργειακό διάγραμμα τις δοθείσες ενεργειακές στάθμες, καθώς και αυτές που προκύπτουν λαμβάνοντας υπ' όψιν την σύζευξη της τροχιακής στροφορμής και της στροφορμής του σπιν. Χρησιμοποιήστε τον αντίστοιχο φασματοσκοπικό συμβολισμό των καταστάσεων. ii) Πώς ονομάζεται το φαινόμενο; iii) Ποια σχέση περιγράφει την ενεργειακή διαφορά ΔE των νέων ενεργειακών σταθμών της αρχικής κατάστασης 2p; iv) Εάν $\Delta E = 5 \times 10^{-5}$ eV υπολογίστε την ένταση του μαγνητικού πεδίου στην περιοχή του ηλεκτρονίου 2p. Δίνεται: Μαγνητόνη Bohr $\mu_B = 5,788 \times 10^{-9}$ eV/Gauss.

Απάντηση:

i)



ii) Λεπτή υφή

iii) $U = -\vec{\mu}_s \cdot \vec{B}_l = -\mu_z B_z = -(-2 \frac{\mu_B}{\hbar} S_z) B_z = 2 \frac{\mu_B}{\hbar} m_s \hbar B_z = 2 \mu_B m_s B_z$

$$U(2P_{3/2}) = 2 \mu_B \left(\frac{1}{2}\right) B_z = \mu_B B_z, \quad U(2P_{1/2}) = 2 \mu_B \left(-\frac{1}{2}\right) B_z = -\mu_B B_z$$

$$\Delta E = U(2P_{3/2}) - U(2P_{1/2}) = 2 \mu_B B_z$$

Σημειώνεται πως και μόνο το τελικό αποτέλεσμα είναι σωστό ως απάντηση.

iv) $\Delta E = 2 \mu_B B_z \Rightarrow B_z = 4300 \text{ Gauss} \text{ ή } 0,43 \text{ Tesla.}$

Θέμα 4^ο:

(α) [5 μονάδες]. Η ολική εσωτερική ενέργεια ενός διατομικού μορίου είναι E_0 . Εκφράστε την E_0 ως άθροισμα συνεισφορών των επί μέρους τρόπων διεγέρσης των καταστάσεων του διατομικού μορίου κι εξηγήστε ποιοι είναι αυτοί. Εάν χρησιμοποιήσουμε ηλεκτρομαγνητική ακτινοβολία για την διεγέρση των ανωτέρω τρόπων, τι μήκη κύματος πρέπει να χρησιμοποιηθούν για τον κάθε τρόπο; Σε θερμοκρασία δωματίου ποιοι τρόποι μπορεί να είναι διεγερμένοι;

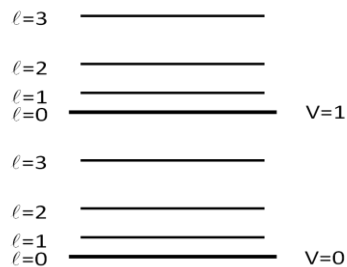
Απάντηση:

$E_0 = E_{el} + E_{vib} + E_{rot}$, όπου: E_{el} οι ηλεκτρονικές διεγέρσεις, E_{vib} οι ταλαντωτικές διεγέρσεις και E_{rot} οι περιστροφικές διεγέρσεις.

$E_{el} \rightarrow$ οπτικά μήκη κύματος, $E_{vib} \rightarrow$ υπέρυθρο μήκος κύματος, $E_{rot} \rightarrow$ μικροκύματα

Σε θερμοκρασία δωματίου διεγερμένοι είναι οι περιστροφικοί τρόποι.

(β) [5 μονάδες]. Δίνεται το παρακάτω ταλαντωτικό-περιστροφικό ενεργειακό διάγραμμα. Ποιες διεγέρσεις που επάγονται από ηλεκτρομαγνητική ακτινοβολία είναι επιτρεπτές;



Απάντηση: Κανόνες επιλογής: $\Delta v = \pm 1$, $\Delta l = \pm 1$. Συμβολίζοντας την κάθε κατάσταση ως (v, l) είναι:

1. $(0,0) \rightarrow (1,1)$
2. $(0,1) \rightarrow (1,0)$, $(0,1) \rightarrow (1,2)$
3. $(0,2) \rightarrow (1,1)$, $(0,2) \rightarrow (1,3)$
4. $(0,3) \rightarrow (1,2)$

(γ) [15 μονάδες]. Το μεγαλύτερο μήκος κύματος του περιστροφικού φάσματος απορρόφησης του HCl είναι $\lambda = 0,48$ mm. i) Ποιο είναι το μήκος κύματος της μετάβασης $l=3 \rightarrow l=4$; ii) Ποιο είναι το μήκος ισορροπίας R του μορίου στη θεμελιώδη του κατάσταση; Δίνονται: Ατομικές μάζες H = 1 u, Cl = 35 u, $u = 1,66 \times 10^{-27}$ kg, $\hbar = 1,055 \times 10^{-34}$ J·s, $c = 3 \times 10^8$ m/s.

Απάντηση:

i) Το μεγαλύτερο μήκος κύματος αντιστοιχεί στην μετάβαση με την μικρότερη ενέργεια που είναι η

$l = 0 \rightarrow l = 1$. Επομένως επειδή $\Delta E = \frac{\hbar^2}{2I} l(l+1)$:

$$|\Delta E(l=0 \rightarrow l=1)| = \left| \frac{\hbar^2}{2I} 0(0+1) - \frac{\hbar^2}{2I} 1(1+1) \right| = \frac{\hbar^2}{I} = \hbar \omega_0 = \hbar \frac{2\pi c}{\lambda_0} \Rightarrow I = \frac{\hbar \lambda_0}{2\pi c}$$

Άρα

$$|\Delta E(l=3 \rightarrow l=4)| = \left| \frac{\hbar^2}{2I} 3(3+1) - \frac{\hbar^2}{2I} 4(4+1) \right| = \frac{4\hbar^2}{I} = 4\hbar^2 \frac{2\pi c}{\hbar \lambda_0} = \frac{8\hbar \pi c}{\lambda_0} = \hbar \omega_4 = \hbar \frac{2\pi c}{\lambda_4} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \lambda_4 = \frac{\lambda_0}{4} = 0.12 \text{ mm}$$

ii) Είναι $I = \mu R^2$ όπου $\mu = M_H M_{Cl} / (M_H + M_{Cl}) = (35/36) u$. Άρα

$$R = \sqrt{\frac{I}{\mu}} = \sqrt{\frac{\hbar \lambda_0}{2\pi c} \frac{36}{35u}} = \sqrt{\frac{1,055 \times 10^{-34} \text{ J sec} \times 0,48 \times 10^{-3} \text{ m}}{2\pi \times 3 \times 10^8 \text{ m/sec}} \frac{36}{35}} / 1,66 \times 10^{-27} \text{ Kg} = 1,3 \text{ \AA}$$