Τμήμα Επιστήμης των Υλικών
Πανεπιστήμιο Πατρών
ΣΤΟΙΧΕΙΑ ΜΟΡΙΑΚΗΣ ΦΥΣΙΚΗΣ ΚΑΙ ΚΒΑΝΤΙΚΗΣ ΧΗΜΕΙΑΣ
ΙΟΥΝΙΟΣ 2003

1

ΘΕΜΑ 1. (1.5 Μ) Απαντήστε σύντομα στις παρακάτω ερωτήσεις:

I. Ποια η τιμή του ολικού σπιν του μορίου O_2^+ στη θεμελιώδη του κατάσταση (σύντομη αιτιολόγηση); σελ 28 ?

Έχει λύση

~~II.~~ Διατυπώστε τη γενικευμένη αρχή του Pauli. Στη συνέχεια χρησιμοποιήστε την για να γράψετε την ολική (χωρική + σπιν) κυματοσυνάρτηση για τη θεμελιώδη κατάσταση του ατόμου ηλίου (He). σελ 11

III. Περιγράψτε τη θεωρία ζωνών σε μονοδιάστατα στερεά και βάσει αυτής εξηγήστε πως κατατάσσονται τα υλικά σε μονωτές, αγωγούς και ημιαγωγούς. σελ 24

Έχει λύση

~~ΘΕΜΑ~~ 2. (2.0 Μ) 8 ταυτόσημα, μη αλληλεπιδρόντα, σωματίδια μάζας m και σπιν 5/2 βρίσκονται μέσα σε μονοδιάστατο απειρόβαθρο πηγάδι δυναμικού με $V(x) = 0$ για $0 < x < L$ και $V(x) \to \infty$ διαφορετικά. Να βρεθεί η ελάχιστη ενέργεια του συστήματος σωματιδίων και το μέγιστο μήκος κύματος απορρόφησης εάν $\frac{\hbar^2\pi^2}{mL^2} = 50\ \text{meV}$. Επαναλάβετε το ίδιο εάν τα σωμάτια έχουν σπιν 2.

Υπενθυμίζεται ότι οι ιδιοενέργειες που περιγράφουν το πρόβλημα του απειρόβαθρου πηγαδιού είναι οι $E_n = \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}n^2$, *με* $n = 1,2,3,\ldots$. σελ. 13-17

Έχει λύση

~~ΘΕΜΑ~~ 3. (1.5 Μ) Σωμάτιο μάζας m βρίσκεται σε δυναμικό αρμονικού ταλαντωτή κυκλικής συχνότητας ω. Εάν το σωμάτιο υπόκειται σε διαταραχή $V^{(1)}(x) = \begin{cases} bx, & x \geq 0 \\ 0, & x < 0 \end{cases}$ όπου b θετική σταθερά, να βρεθεί η πρώτης τάξης διόρθωση στην ενέργεια της θεμελιώδους στάθμης. Υπό ποιες προϋποθέσεις θα μπορούσε να θεωρηθεί η διόρθωση πρώτης τάξης ικανοποιητική προσέγγιση;

Δίνεται ότι η νορμαλισμένη κυματοσυνάρτηση της θεμελιώδους στάθμης ενός αρμονικού ταλαντωτή έχει τη μορφή $\psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{1/4} \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right)$. σελ 2-4

~~ΘΕΜΑ~~ 4. (2.0 Μ) Εφαρμόστε τη θεωρία Hückel για τον υπολογισμό των ενεργειών και των αντίστοιχων μοριακών τροχιακών του αιθυλενίου (C_2H_4). σελ ~~30~~ 29-30

Υπόδειξη: Θεωρήστε ότι κάθε άτομο άνθρακα συμμετέχει με ένα p_z τροχιακό στη δημιουργία ενός απεντοπισμένου π τροχιακού.

ΘΕΜΑ 5. (1.5 Μ) Σε ποιες ομάδες σημειακής συμμετρίας ανήκουν τα μόρια (α) CH_3-CH_3, (β) CH_3Cl, (γ) CH_2=CH_2; Ποια από αυτά είναι δυνατό να παρουσιάσουν ηλεκτρική διπολική ροπή; ? σελ. 51
δ) H_2 ε) HCl

ΘΕΜΑ 6. (1.5 Μ) Για τη μετάβαση από την περιστροφική κατάσταση με J=0 προς την περιστροφική κατάσταση με J=1 το μόριο του CO πρέπει να απορροφήσει φωτόνιο συχνότητας 1.15□10^{11} Hz. Να υπολογίσετε το μήκος δεσμού του CO (απόσταση μεταξύ των κέντρων μάζας των ατόμων C και O), θεωρώντας το μόριο ως (άκαμπτο) στερεό στροφέα.

ΧΡΗΣΙΜΕΣ ΣΤΑΘΕΡΕΣ: h = 6.626□10^{-34} J sec = 4.136□10^{-15} eV sec, $\hbar$ = 1.054□10^{-34} J sec = 6.582□10^{-16} eV sec, u = 1.660□10^{-27} Kg = 931,50 MeV/c^2, c = 2.998□10^8 m/sec, m_C = 12 u, m_O = 15.995 u.

(3)

Τμήμα Επιστήμης των Υλικών

Πανεπιστήμιο Πατρών

ΣΤΟΙΧΕΙΑ ΜΟΡΙΑΚΗΣ ΦΥΣΙΚΗΣ ΚΑΙ ΚΒΑΝΤΙΚΗΣ ΧΗΜΕΙΑΣ

ΙΟΥΝΙΟΣ 2004

ΘΕΜΑ 1. Απαντήστε σύντομα στις παρακάτω ερωτήσεις:

~~I. (1. Μ) Ποιά η τιμή του ολικού σπιν του μορίου O_2 στη θεμελιώδη του κατάσταση (σύντομη αιτιολόγηση);~~ σελ 28

II. (1. Μ) Δύο ταυτόσημα, μη αλληλεπιδρώντα, σωματίδια μάζας m και σπιν 1/2 βρίσκονται μέσα σε μονοδιάστατο απειρόβαθρο πηγάδι δυναμικού με $V(x)=0$ για $0<x<L$ και $V(x)\to\infty$ διαφορετικά. Να γράψετε την ολική (χωρική $\otimes$ σπιν) κυματοσυνάρτηση για τη θεμελιώδη κατάσταση του συστήματος. σελ 13-17

Δίνεται ότι η νορμαλισμένη κυματοσυνάρτηση της θεμελιώδους στάθμης ενός σωματίου σε απειρόβαθρο πηγάδι δυναμικού $V(x)=0$ για $0<x<L$ και $V(x)\to\infty$ διαφορετικά, έχει τη μορφή $\psi_1(x)=\sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{\pi x}{L}\right)$.

III. (1. Μ) Σε ποιές ομάδες σημειακής συμμετρίας ανήκουν τα μόρια (α) N_2 (β) $NaCl$, (γ) H_2O; τελος

Έχει λύση

~~IV~~. (1. Μ) Εξηγήστε το φαινόμενο Raman σε ένα μόριο για το οποίο η πολωσιμότητα δίνεται από τη σχέση $\alpha=\alpha_0+\Delta\alpha\cos(\omega_{\text{int}}t)$, όπου α_0 η μέση μοριακή πολωσιμότητα, ω_{int} μια εσωτερική (π.χ. δονητική) συχνότητα του μορίου και $\Delta\alpha\neq 0$. σελ 45

Έχει λύση

→ ~~ΘΕΜΑ~~ 2. (2.0 Μ) Με χρήση της θεωρίας μεταβολών (παραλλαγών) υπολογίσετε την ενέργεια της θεμελιώδους στάθμης ενός σωματίου σε δυναμικό $V(x)=\begin{cases} bx, & x>0 \\ \infty, & x\le 0\end{cases}$. Πάρετε ως δοκιμαστική κυματοσυνάρτηση την $\psi(x)=Nx\exp(-\lambda x)$, όπου b,λ,N θετικές σταθερές.

ΘΕΜΑ 3. (2.0 Μ) Σωμάτιο μάζας m και φορτίου q βρίσκεται σε δυναμικό αρμονικού ταλαντωτή κυκλικής συχνότητας ω. Σε χρόνο $t=0$ το σωμάτιο βρίσκεται στην θεμελιώση στάθμη. Έαν σε χρόνους $t \geq 0$ το σωμάτιο υπόκειται σε χρονικά εξαρτημένο δυναμικό $V(x,t) = -qxE_0 \exp(-t/\tau)$, όπου E_0, τ θετικές σταθερές, να βρεθεί η πιθανότητα, μετά από χρόνο $t \to \infty$, να έχουμε μετάβαση από τη θεμελιώδη κατάσταση στην πρώτη διεγερμένη κατάσταση του συστήματος, με χρήση θεωρίας χρονικά εξαρτημένων διαταραχών πρώτης τάξης [illegible]

Δίνεται ότι η νορμαλισμένες κυματοσυνάρτησεις της θεμελιώδους στάθμης και της πρώτης διεγερμένης στάθμης ενός αρμονικού ταλαντωτή έχουν τη μορφή

$$\psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{1/4} \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right) \quad \textit{και} \quad \psi_1(x) = \left(2\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{1/2} x\psi_0(x),$$

αντίστοιχα. Επίσης, οι ιδιοενέργειες του αρμονικού ταλαντωτή δίνονται από τη σχέση $E_n = \hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)$, *με* $n = 0,1,\ldots$

Έχει λύση

ΘΕΜΑ 4. (2.0 Μ) Το (ιδεατό) μόριο A_3 απαντάται σε δύο διαμορφώσεις, μία γραμμική και μία κυκλική. Εφαρμόστε τη θεωρία Hückel για τον υπολογισμό των ενεργειών των π ηλεκτρονίων του μορίου A_3 στις δύο διαμορφώσεις του. Σε ποία διαμόρφωση το μόριο στη θεμελιώδη στάθμη του έχει χαμηλότερη ενέργεια;

Υπόδειξη: Θεωρήστε ότι κάθε άτομο A συμμετέχει με ένα p_z τροχιακό στη δημιουργία ενός απεντοπισμένου π τροχιακού. —

ΧΡΗΣΙΜΑ ΟΛΟΚΛΗΡΩΜΑΤΑ:

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

$$\int_{-\infty}^{\infty} x^{2n} e^{-\lambda x^2} dx = \frac{1.3.5\ldots(2n-1)}{(2\lambda)^n}\sqrt{\frac{\pi}{\lambda}},$$

όπου n ακέραιος και λ θετική σταθερά.

Εξετ. Ελενη 571
Γιαννης 539
Αντώνης 520
Hobbit 564

5

Τμήμα Επιστήμης των Υλικών

Πανεπιστήμιο Πατρών

ΣΤΟΙΧΕΙΑ ΜΟΡΙΑΚΗΣ ΦΥΣΙΚΗΣ ΚΑΙ ΚΒΑΝΤΙΚΗΣ ΧΗΜΕΙΑΣ

Εξεταστική Περίοδος Φεβρουαρίου 2005

ΘΕΜΑ 1. Απαντήστε σύντομα στις παρακάτω ερωτήσεις:

~~I. (1.0 Μ) Διατυπώστε τη γενικευμένη αρχή του Pauli. Στη συνέχεια χρησιμοποιήστε την για να γράψετε την ολική (χωρική + σπιν) κυματοσυνάρτηση για τη θεμελιώδη κατάσταση του ατόμου ηλίου (He).~~

~~II. (1.0 Μ) Περιγράψτε τη θεωρία ζωνών σε μονοδιάστατα στερεά και βάσει αυτής εξηγήστε πως κατατάσσονται τα υλικά σε μονωτές, αγωγούς και ημιαγωγούς.~~

III. (1.0 Μ) Σωμάτιο μάζας m βρίσκεται μέσα σε πηγάδι δυναμικού με $V(x)=0$ για $0<x<L/2$, $V(x)=bx$ για $L/2<x<L$ και $V(x)\to\infty$ διαφορετικά, όπου b θετική σταθερά. Να βρεθεί η πρώτης τάξης διόρθωση στην ενέργεια της θεμελιώδους στάθμης, θεωρώντας ως αδιατάραχτο σύστημα το σωμάτιο σε απειρόβαθο πηγάδι δυναμικού.

Δίνεται ότι η νορμαλισμένη κυματοσυνάρτηση της θεμελιώδους στάθμης ενός σωματίου σε απειρόβαθο πηγάδι δυναμικού $V(x)=0$ για $0<x<L$ και $V(x)\to\infty$ διαφορετικά, έχει τη μορφή $\psi_1(x)=\sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{\pi x}{L}\right)$.

~~IV. (1.0 Μ) Σε ποιες ομάδες σημειακής συμμετρίας ανήκουν τα μόρια (α) N_2, (β) HI, (γ) H_2O;~~

~~V. (1.0 Μ) Εξηγήστε το φαινόμενο Raman σε ένα μόριο για το οποίο η πολωσιμότητα δίνεται από τη σχέση $\alpha=\alpha_0+\Delta\alpha\cos(\omega_{int}t)$, όπου α_0 η μέση μοριακή πολωσιμότητα, ω_{int} μια εσωτερική (π.χ. δονητική) συχνότητα του μορίου και $\Delta\alpha\neq 0$.~~ σελ. 45

VI. (1.0 Μ) Το μήκος δεσμού του HCl (απόσταση μεταξύ των κέντρων μάζας των ατόμων H και Cl) είναι 127.5 pm. Να βρεθέι η συχνότητα μετάβασης από την περιστροφική κατάσταση με J=3 προς την περιστροφική κατάσταση με J=4.

ΘΕΜΑ 2. (2.0 Μ) Σωμάτιο μάζας m και φορτίου q βρίσκεται σε δυναμικό αρμονικού ταλαντωτή κυκλικής συχνότητας ω. Σε χρόνο $t = 0$ το σωμάτιο βρίσκεται στην θεμελιώση στάθμη. Έαν σε χρόνους $t \geq 0$ το σωμάτιο υπόκειται σε χρονικά εξαρτημένο δυναμικό $V(x,t) = -qx\mathrm{E}_0 \exp(-t/\tau)$, όπου E_0, τ θετικές σταθερές, να βρεθεί η πιθανότητα μετά από χρόνο t, να έχουμε μετάβαση από τη θεμελιώδη κατάσταση στην πρώτη διεγερμένη κατάσταση του συστήματος, με χρήση θεωρίας χρονικά εξαρτημένων διαταραχών πρώτης τάξης. σελ. 41

Δίνεται ότι η νορμαλισμένες κυματοσυνάρτησεις της θεμελιώδους στάθμης και της πρώτης διεγερμένης στάθμης ενός αρμονικού ταλαντωτή έχουν τη μορφή $\psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{1/4} \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right)$ *και* $\psi_1(x) = \left(2\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{1/2} x\psi_0(x)$, *αντίστοιχα. Επίσης, οι ιδιοενέργειες του αρμονικού ταλαντωτή δίνονται από τη σχέση* $E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)$, *με* $n = 0, 1, \ldots$

Έχει λύση

ΘΕΜΑ 3. (2.0 Μ) Εφαρμόστε τη θεωρία Hückel για τον υπολογισμό των ενεργειών των π ηλεκτρονίων του κυκλο-βουταδιενίου (C_4H_4). Ποιά η ενέργεια της θεμελιώδους στάθμης και ποιό το σπιν του μορίου στη θεμελιώδη του κατάσταση;

Υπόδειξη: Θεωρήστε ότι κάθε άτομο άνθρακα συμμετέχει με ένα p_z *τροχιακό στη δημιουργία ενός απεντοπισμένου π τροχιακού.*

ΧΡΗΣΙΜΕΣ ΣΤΑΘΕΡΕΣ: h = 6.626 10^{-34} J sec = 4.136 10^{-15} eV sec, $\hbar$ = 1.054 10^{-34} J sec = 6.582 10^{-16} eV sec, u = 1.660 10^{-27} Kg = 931,50 MeV/c^2, c = 2.998 10^8 m/sec, m_H = 1.008 u, m_{Cl} = 34.97 u

ΧΡΗΣΙΜΟ ΟΛΟΚΛΗΡΩΜΑ:

$$\int_{-\infty}^{\infty} x^{2n} e^{-\lambda x^2} dx = \frac{1.3.5\ldots(2n-1)}{(2\lambda)^n}\sqrt{\frac{\pi}{\lambda}} ,$$

όπου n ακέραιος και λ θετική σταθερά.

(8)

Τμήμα Επιστήμης των Υλικών

Πανεπιστήμιο Πατρών

ΣΤΟΙΧΕΙΑ ΜΟΡΙΑΚΗΣ ΦΥΣΙΚΗΣ ΚΑΙ ΚΒΑΝΤΙΚΗΣ ΧΗΜΕΙΑΣ

Εξέταση 12 Οκτωβρίου 2006

σε 2 ή 3 διαστάσεις

? ΘΕΜΑ 1. (1.5 Μ) 18 ταυτόσημα, μη αλληλεπιδρώντα, σωματίδια μάζας m και σπιν 1/2 βρίσκονται μέσα σε απειρόβαθο κυβικό κουτί δυναμικού με $V(x,y,z)=0$ για $0<x<L, 0<y<L, 0<z<L$ και $V(x,y,z)\to\infty$ διαφορετικά. Να βρεθεί η ελάχιστη ενέργεια του συστήματος σωματιδίων εάν $\frac{\hbar^2\pi^2}{mL^2}=10\,meV$. Επαναλάβετε το ίδιο εάν τα σωμάτια έχουν σπιν 2.

Έχει λύση

~~ΘΕΜΑ~~ 2. (2.0 Μ) Εφαρμόστε τη θεωρία Hückel για τον υπολογισμό των ενεργειών των π ηλεκτρονίων και των αντίστοιχων μοριακών τροχιακών του γραμμικού μορίου A_3.

Υπόδειξη: Θεωρήστε ότι κάθε άτομο Α συμμετέχει με ένα p_z τροχιακό στη δημιουργία ενός απεντοπισμένου π τροχιακού.

? ΘΕΜΑ 3. (1.5 Μ) Το περιστροφικό φάσμα του μορίου *HI* παρουσιάζει φασματικές γραμμές σε 64.275 cm^{-1}, 77.130 cm^{-1}, 89.985 cm^{-1} (μεταξύ των 60 cm^{-1} και 90 cm^{-1}). Χρησιμοποιήστε το μοντέλο του στερεού στροφέα για να υπολογίσετε τη ροπή αδράνειας και το μήκος δεσμού του μορίου.

Έχει λύση

? ~~ΘΕΜΑ~~ 4. (2.5 Μ) Σωμάτιο μάζας m και φορτίου q βρίσκεται σε δυναμικό αρμονικού ταλαντωτή κυκλικής συχνότητας ω. Σε χρόνο $t=0$ το σωμάτιο βρίσκεται στην θεμελιώδη στάθμη. Εάν σε χρόνους $t\geq 0$ το σωμάτιο υπόκειται σε χρονικά εξαρτημένο δυναμικό $V(x,t)=-qx\mathrm{E}_0\exp(-t/\tau)$, όπου E_0, τ θετικές σταθερές, να βρεθεί η πιθανότητα, μετά από χρόνο $t\to\infty$, να έχουμε μετάβαση από τη θεμελιώδη κατάσταση στην πρώτη διεγερμένη κατάσταση του συστήματος, με χρήση θεωρίας χρονικά εξαρτημένων διαταραχών πρώτης τάξης.

Έχει λύση

~~ΘΕΜΑ~~ 5. (2.5 Μ) Χρησιμοποιήστε θεωρία μεταβολών (παραλλαγών) για τον υπολογισμό της ενέργειας της θεμελιώδους στάθμης ενός σωματίου μάζας m σε κεντρικό δυναμικό

$V(r)=\frac{1}{2}kr^2$, με k θετική πραγματική σταθερά. Πάρετε ως δοκιμαστική κυματοσυνάρτηση την $\psi(r,\theta,\phi)=N\exp(-\lambda r)$, με N,λ θετικές πραγματικές σταθερές.

ΥΠΟΔΕΙΞΗ: Υπενθυμίζεται ότι οι ιδιοενέργειες που περιγράφουν το πρόβλημα του απειρόβαθου κυβικού κουτιού είναι οι $E_{n_x,n_y,n_z}=\frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}(n_x^2+n_y^2+n_z^2)$, *με* $n_x,n_y,n_z=1,2,3,\ldots$ *Δίνεται ότι η νορμαλισμένες κυματοσυνάρτησεις της θεμελιώδους στάθμης και της πρώτης διεγερμένης στάθμης ενός αρμονικού ταλαντωτή έχουν τη μορφή* $\psi_0(x)=\left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{1/4}\exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right)$ *και* $\psi_1(x)=\left(2\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{1/2}x\psi_0(x)$, *αντίστοιχα. Επίσης, οι ιδιοενέργειες του αρμονικού ταλαντωτή δίνονται από τη σχέση* $E_n=\hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)$, *με* $n=0,1,\ldots$ *Τέλος, σε σφαιρικές συντεταγμένες*

$$\nabla^2=\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)+\frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}.$$

ΧΡΗΣΙΜΕΣ ΣΤΑΘΕΡΕΣ: $h=6.626\ 10^{-34}$ *J sec* $=4.136\ 10^{-15}$ *eV sec,* $\hbar=1.054\ 10^{-34}$ *J sec* $=6.582\ 10^{-16}$ *eV sec,* $u=1.660\ 10^{-27}$ *Kg,* $c=2.998\ 10^{8}$ *m/sec,* $m_H=1u$, $m_I=127u$.

ΧΡΗΣΙΜΑ ΟΛΟΚΛΗΡΩΜΑΤΑ:

$$\int_0^\infty x^n e^{-\lambda x}dx=\frac{n!}{\lambda^{n+1}},\ \text{για}\ n=0,1,2,\ldots,$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\lambda x^2}dx=\sqrt{\frac{\pi}{\lambda}},$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} x^{2n}e^{-\lambda x^2}dx=\frac{1.3.5\ldots(2n-1)}{(2\lambda)^n}\sqrt{\frac{\pi}{\lambda}},\ \text{για}\ n=1,2,3,\ldots.$$

Σε όλα τα ολοκληρώματα $\lambda>0$.

Τμήμα Επιστήμης των Υλικών

Πανεπιστήμιο Πατρών

ΣΤΟΙΧΕΙΑ ΜΟΡΙΑΚΗΣ ΦΥΣΙΚΗΣ ΚΑΙ ΚΒΑΝΤΙΚΗΣ ΧΗΜΕΙΑΣ

26 Ιουνίου 2009

απλό ολοκλήρωμα

ΘΕΜΑ 1. (2.0 Μ) Δύο ταυτόσημα σωμάτια μάζας m και σπιν 1/2 βρίσκονται μέσα σε δυναμικό αρμονικού ταλαντωτή κυκλικής συχνότητας ω. Αν τα σωμάτια αλληλεπιδρούν μεταξύ τους με το δυναμικό $V_{\text{int}}(x_1, x_2) = g(x_1^4 + x_2^4)$ να υπολογίσετε την πρώτη τάξης διόρθωση στην ενέργεια της θεμελιώδους στάθμης, αν ο όρος $V_{\text{int}}(x_1, x_2)$ θεωρηθεί διαταραχή. $E_1 = \int \psi_0 V_{int} \psi_0$

ΘΕΜΑ 2. (1.5 Μ) 11 μη αλληλεπιδρώντα ηλεκτρόνια βρίσκονται εγκλωβισμένα μέσα σε δυναμικό διδιάστατου αρμονικού ταλαντωτή με $V(x,y) = \frac{1}{2} m\omega^2 (x^2 + y^2)$. Να βρεθεί η ελάχιστη ενέργεια του συστήματος και το μέγιστο μήκος κύματος απορρόφησης εάν $\hbar\omega = 10\ meV$. Φτιάχνουμε το διάγραμμα υπολογίζω το Sος

$\lambda_{max} = \frac{h \cdot c}{\Delta E_{min}}$

ΘΕΜΑ 3. (2.5 Μ) Με χρήση της θεωρίας μεταβολών (παραλλαγών) υπολογίσετε την ενέργεια της θεμελιώδους στάθμης σωματίου σε κεντρικό δυναμικό $V(r) = \frac{1}{2} k r^2$, με k θετική σταθερά. Χρησιμοποιήστε ως δοκιμαστική συνάρτηση την $\psi(r) = N \exp(-\lambda r^2)$, με N, λ θετικές πραγματικές σταθερές.

1. Κανονικοποιώ την $\psi(r)$
2. $\langle E \rangle = \langle V \rangle + \langle T \rangle$
3. $\frac{\partial \langle E \rangle}{\partial \lambda} = 0 \Rightarrow \lambda_{min} = \ldots$
4. $E_{θεμ.} = \langle E_{\lambda_{min}} \rangle$

ΘΕΜΑ 4. (2.0 Μ) Εφαρμόστε τη θεωρία Hückel για τον υπολογισμό των ενεργειών των π ηλεκτρονίων και των αντίστοιχων μοριακών τροχιακών του γραμμικού μορίου A_3.

Υπόδειξη: Θεωρήστε ότι κάθε άτομο Α συμμετέχει με ~~ένα~~ δύο *p_z τροχιακό στη δημιουργία ενός απεντοπισμένου π τροχιακού.*

ΘΕΜΑ 5. (2.0 Μ) Σωμάτιο μάζας m και φορτίου q είναι εγκλωβισμένο μέσα σε μονοδιάστατο απειρόβαθο πηγάδι δυναμικού με $V(x) = 0$ για $0 < x < L$ και $V(x) \to \infty$ διαφορετικά. Σε χρόνο $t = 0$ το σωμάτιο βρίσκεται στη θεμελιώδη στάθμη. Εάν σε χρόνους $t \geq 0$ το σωμάτιο υπόκειται σε χρονικά εξαρτημένο δυναμικό $V(x,t) = -qx\mathrm{E}_0 \exp(-t/\tau)$, όπου E_0, τ θετικές σταθερές, να βρεθεί η πιθανότητα μετά από χρόνο $t \to \infty$, να έχουμε μετάβαση από τη θεμελιώδη κατάσταση στην πρώτη διεγερμένη κατάσταση του συστήματος, με χρήση θεωρίας χρονικά εξαρτημένων διαταραχών πρώτης τάξης.

ΧΡΗΣΙΜΕΣ ΣΤΑΘΕΡΕΣ: $\hbar = 1.054\ 10^{-34}$ *J sec* = *6.582* 10^{-16} *eV sec και* m_e = *9.109* 10^{-31} *Kg.*

$\hbar = \frac{h}{2\pi}$

ΧΡΗΣΙΜΕΣ ΣΧΕΣΕΙΣ:

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\lambda x^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{\lambda}}$$

$$\int_0^{\infty} x^n e^{-\lambda x} dx = \frac{n!}{\lambda^{n+1}} \qquad \int_{-\infty}^{\infty} x^{2n} e^{-\lambda x^2} dx = \frac{1.3.5...(2n-1)}{(2\lambda)^n}\sqrt{\frac{\pi}{\lambda}}$$ για $n = 1,2,3,...$, και $\lambda > 0$.

$$\sin(a \pm b) = \sin(a)\cos(b) \pm \cos(a)\sin(b)$$

$$\cos(a \pm b) = \cos(a)\cos(b) \mp \sin(a)\sin(b)$$

Απειρόβαθο

ΥΠΟΔΕΙΞΕΙΣ: *Οι ορθοκανονικές κυματοσυναρτήσεις που περιγράφουν το πρόβλημα του μονοδιάστατου απειρόβαθου πηγαδιού με* $V(x) = 0$ *για* $0 < x < L$ *και* $V(x) \to \infty$ *διαφορετικά είναι οι* $\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$ *αν* $0 < x < L$ *και* $\psi_n(x) = 0$ *διαφορετικά, με ιδιοενέργειες* $E_n = \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}n^2$, *με* $n = 1,2,3,....$

Ταλαντωτής

Υπενθυμίζεται ότι οι ιδιοενέργειες που περιγράφουν το πρόβλημα του διδιάστατου αρμονικού ταλαντωτή είναι οι $E_{n_x,n_y} = \hbar\omega(n_x + n_y + 1)$, *με* $n_x, n_y = 0,1,2,....$ *Δίνεται ότι η νορμαλισμένη κυματοσυνάρτηση της θεμελιώδους στάθμης ενός αρμονικού ταλαντωτή με δυναμικό* $V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$ *έχει τη μορφή* $\psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{1/4}\exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right)$. *Επίσης, οι ιδιοενέργειες του αρμονικού ταλαντωτή δίνονται από τη σχέση* $E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)$, *με* $n = 0,1,....$ *Τέλος, σε σφαιρικές συντεταγμένες*

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}.$$

$-\frac{\hbar^2}{2m}$

Τμήμα Επιστήμης των Υλικών, Πανεπιστήμιο Πατρών

ΣΤΟΙΧΕΙΑ ΜΟΡΙΑΚΗΣ ΦΥΣΙΚΗΣ ΚΑΙ ΚΒΑΝΤΙΚΗΣ ΧΗΜΕΙΑΣ

8-9-2009

ΘΕΜΑ 1. (1.5 Μ)

(i) Διατυπώστε τη γενικευμένη αρχή του Pauli.

(ii) Δύο ταυτόσημα σωμάτια μάζας m και σπιν 1/2 βρίσκονται μέσα σε μονοδιάστατο απειρόβαθο πηγάδι δυναμικού μήκους L, με $V(x)=0$ για $0<x<L$ και $V(x)\to\infty$ διαφορετικά. Αν τα σωμάτια είναι μη αλληλεπιδρώντα να βρείτε την ολική (χωρική$\otimes$σπιν) κυματοσυνάρτηση: (α) για την θεμελιώδη κατάσταση του συστήματος και (β) για την πρώτη διεγερμένη κατάσταση του συστήματος.

ΘΕΜΑ 2. (1.5 Μ) Τέσσερα μη αλληλεπιδρώντα ηλεκτρόνια βρίσκονται μέσα σε μονοδιάστατο απειρόβαθο πηγάδι δυναμικού μήκους L, με $V(x)=0$ για $0<x<L$ και $V(x)\to\infty$ διαφορετικά. Η ελάχιστη ενέργεια του συστήματος είναι 100 meV. Να βρεθεί το μήκος του πηγαδιού και το μέγιστο μήκος κύματος απορρόφησης. φερμιόνια

των 4 $E_{min} = 100\,meV$

του συστήματος

ΘΕΜΑ 3. (1.5 Μ) Σωμάτιο μάζας m βρίσκεται μέσα σε μονοδιάστατο απειρόβαθο πηγάδι δυναμικού με $V(x)=0$ για $0<x<L$ και $V(x)\to\infty$ διαφορετικά. Να βρεθεί, με χρήση της πρώτης τάξης θεωρίας διαταραχών, η διόρθωση στην ενέργεια της πρώτης διεγερμένης στάθμης εάν το σύστημα υπόκειται σε επιπλέον διαταραχή της μορφής $V(x)=-\frac{\hat{p}^4}{8m^3c^2}$, όπου p η ορμή του σωματίου και c η ταχύτητα του φωτός.

ΘΕΜΑ 4. (2.5 Μ) Χρησιμοποιήστε θεωρία μεταβολών (παραλλαγών) για τον υπολογισμό της ενέργειας της θεμελιώδους στάθμης ενός σωματίου μάζας m σε κεντρικό δυναμικό $V(r)=\frac{1}{2}kr^2$, με k θετική πραγματική σταθερά. Πάρετε ως δοκιμαστική κυματοσυνάρτηση την $\psi(r,\theta,\phi)=N\exp(-ar)$, με N,a θετικές πραγματικές σταθερές.

3D κεντρικό δυναμικό

μόνο απ' το r

ΘΕΜΑ 5. (1.0 Μ) Ποια η τιμή του ολικού σπιν του μοριακού ιόντος N_2^{2-} στη θεμελιώδη του κατάσταση (σύντομη αιτιολόγηση); έχει 2 επιπλέον ηλεκτρόνια

$N_2 + 2e^-$

$\frac{J\,sec^2}{kg} = m^2$

345: Δημήτρης

ΘΕΜΑ 6. (1.0 Μ) Εφαρμόστε τη θεωρία Hückel για τον υπολογισμό του σπιν του κυκλικού μοριακού ιόντος A_3^- στη θεμελιώδη του κατάσταση.

Υπόδειξη: Θεωρήστε ότι κάθε άτομο Α συμμετέχει με ένα $2p_z$ τροχιακό στη δημιουργία ενός απεντοπισμένου π τροχιακού. A_3 και στο τέλος θα προσθέσω $1e^-$ μην ξεχάσω
το spin

ΘΕΜΑ 7. (1.0 Μ) Η σταθερά ελατηρίου του μορίου Br_2 είναι 240 $N \cdot m^{-1}$. Να βρεθεί η συχνότητα της κύριας φασματικής γραμμής στο δονητικό φάσμα του Br_2.

ΥΠΟΔΕΙΞΕΙΣ

Οι ορθοκανονικές κυματοσυναρτήσεις που περιγράφουν το πρόβλημα του μονοδιάστατου απειρόβαθου πηγαδιού με $V(x)=0$ *για* $0<x<L$ *και* $V(x)\to\infty$ *διαφορετικά είναι οι* $\psi_n(x)=\sqrt{\dfrac{2}{L}}\sin\left(\dfrac{n\pi x}{L}\right)$ *αν* $0<x<L$ *και* $\psi_n(x)=0$ *διαφορετικά, με ιδιοενέργειες* $E_n=\dfrac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}n^2$, *με* $n=1,2,3,\ldots$. *Σε σφαιρικές συντεταγμένες*

$$\nabla^2=\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)+\frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}.$$

ΧΡΗΣΙΜΕΣ ΣΤΑΘΕΡΕΣ: *h = 6.626 10^{-34} J sec = 4.136 10^{-15} eV sec, $\hbar$ = 1.054 10^{-34} J sec = 6.582 10^{-16} eV sec, m_e = 9.109 10^{-31} Kg, c = 2.998 10^{8} m/sec, u = 1.660 10^{-27} Kg,* $m_{Br}=78.92u$.

ΧΡΗΣΙΜΑ ΟΛΟΚΛΗΡΩΜΑΤΑ:

$\int_0^\infty x^n e^{-\lambda x}dx=\dfrac{n!}{\lambda^{n+1}}$, *για* $n=0,1,2,\ldots$, $\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\lambda x^2}dx=\sqrt{\dfrac{\pi}{\lambda}}$,

$\int_{-\infty}^{\infty} x^{2n}e^{-\lambda x^2}dx=\dfrac{1.3.5\ldots(2n-1)}{(2\lambda)^n}\sqrt{\dfrac{\pi}{\lambda}}$, *για* $n=1,2,3,\ldots$. *Σε όλα τα ολοκληρώματα* $\lambda>0$.

Τμήμα Επιστήμης των Υλικών

Πανεπιστήμιο Πατρών

ΣΤΟΙΧΕΙΑ ΜΟΡΙΑΚΗΣ ΦΥΣΙΚΗΣ ΚΑΙ ΚΒΑΝΤΙΚΗΣ ΧΗΜΕΙΑΣ

20 Σεπτεμβρίου 2010

√OK

ΘΕΜΑ 1. (1. Μ) Δύο ταυτόσημα σωματίδια μάζας m και σπιν 1/2 βρίσκονται μέσα σε μονοδιάστατο απειρόβαθο πηγάδι δυναμικού με $V(x)=0$ για $0<x<L$ και $V(x)\to\infty$ διαφορετικά. Να γράψετε την ολική (χωρική ⊗ σπιν) κυματοσυνάρτηση για την πρώτη διεγερμένη κατάσταση του συστήματος αν τα σωματίδια θεωρηθούν μη-αλληλεπιδρώντα.

√OK

ΘΕΜΑ 2. (1.5 Μ) Με ένα απλοϊκό μοντέλο η ηλεκτρονική δομή του μορίου καροτίνης περιγράφεται από 22 μη-αλληλεπιδρώντα ηλεκτρόνια μέσα σε μονοδιάστατο απειρόβαθο πηγάδι δυναμικού με $V(x)=0$ για $0<x<L$ και $V(x)\to\infty$ διαφορετικά. Αν το μέγιστο μήκος κύματος απορρόφησης της καροτίνης είναι 450 *nm* να βρεθεί το πλάτος του απειρόβαθου πηγαδιού *L*.

√OK √

ΘΕΜΑ 3. (2. Μ) Με χρήση της θεωρίας μεταβολών (παραλλαγών) υπολογίστε την ενέργεια της θεμελιώδους στάθμης σωματίου σε δυναμικό $V(x)=\frac{1}{2}kx^2$, με k θετική σταθερά. Χρησιμοποιήστε ως δοκιμαστική συνάρτηση την $\psi(x)=N\cos(\lambda x)$ για $-\frac{\pi}{2\lambda}\le x\le\frac{\pi}{2\lambda}$ με N,λ θετικές πραγματικές σταθερές, και μηδέν διαφορετικά.

√OK √

ΘΕΜΑ 4. (1.5 Μ) Εφαρμόστε τη θεωρία Hückel για τον υπολογισμό των ενεργειών των π ηλεκτρονίων και των αντίστοιχων μοριακών τροχιακών του μορίου A_2.

Υπόδειξη: Θεωρήστε ότι κάθε άτομο A συμμετέχει με ένα $2p_z$ τροχιακό στη δημιουργία ενός απεντοπισμένου π τροχιακού.

√OK

ΘΕΜΑ 5. (2.0 Μ) Το περιστροφικό φάσμα του μορίου *HCl* περιγράφεται από (σχεδόν) ισαπέχουσες φασματικές γραμμές με απόσταση 20.79 cm^{-1} μεταξύ δύο διαδοχικών γραμμών.

?

(α) Να βρεθεί το μήκος δεσμού R_e του μορίου *HCl*.

(β) Θεωρούμε ότι η σταθερά ελατηρίου του μορίου HCl περιγράφεται ικανοποιητικά από τη σχέση $k = \frac{2e^2}{4\pi\varepsilon_0 R_e^3}$. Να βρεθεί η συχνότητα της κύριας φασματικής γραμμής στο δονητικό φάσμα του HCl. $k = \mu_{HCl} \omega_e^2$

√ok ✗ √

→ ΘΕΜΑ 6. (2. Μ) Σωμάτιο μάζας m και φορτίου e είναι εγκλωβισμένο μέσα σε μονοδιάστατο απειρόβαθο πηγάδι δυναμικού με $V(x)=0$ για $0<x<L$ και $V(x)\to\infty$ διαφορετικά. Σε χρόνο $t=0$ το σωμάτιο βρίσκεται στη θεμελιώδη στάθμη. Σε χρόνους $t \geq 0$ το σωμάτιο υπόκειται σε χρονικά εξαρτημένο δυναμικό $V(x,t) = -ex\mathrm{E}_0 \sin\left(\frac{\pi t}{\tau}\right)$ για $0 \leq t \leq \tau$ με E_0, τ θετικές σταθερές, και μηδέν διαφορετικά. Με χρήση θεωρίας χρονικά εξαρτημένων διαταραχών πρώτης τάξης βρείτε την πιθανότητα μετά από χρόνο τ να έχουμε μετάβαση από τη θεμελιώδη κατάσταση στην πρώτη διεγερμένη κατάσταση του συστήματος.

ΧΡΗΣΙΜΕΣ ΣΤΑΘΕΡΕΣ: $h = 6.626\ 10^{-34}$ J sec $= 4.136\ 10^{-15}$ eV sec, $\hbar = 1.054\ 10^{-34}$ J sec $= 6.582\ 10^{-16}$ eV sec, $m_e = 9.109\ 10^{-31}$ Kg, $c=3\ 10^8$ m/sec, $e = 1.602\ 10^{-19}$ C, $4\pi\varepsilon_0 = 1.112\ 10^{-10}\ C^2/N\,m^2$, $u = 1.66\ 10^{-27}$ Kg, $m_H = 1\ u$, $m_{Cl} = 35\ u$

ΧΡΗΣΙΜΕΣ ΣΧΕΣΕΙΣ:

$$\int_0^L x \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right)\sin\left(\frac{2\pi x}{L}\right)dx = -\frac{8L^2}{9\pi^2}, \qquad \int_0^\tau \sin\left(\frac{\pi t}{\tau}\right)e^{i\alpha t}dt = \frac{\left(1+e^{i\alpha\tau}\right)\pi\tau}{\pi^2 - \alpha^2\tau^2}$$

$$\int_{-\alpha}^{\alpha} x^2\cos^2(\lambda x)\,dx = \frac{4\alpha^3\lambda^3 + 6\alpha\lambda\cos(2\alpha\lambda) + \left(-3+6\alpha^2\lambda^2\right)\sin(2\alpha\lambda)}{12\lambda^3},$$

$$\int_{-\alpha}^{\alpha} \cos^2(\lambda x)\,dx = \alpha + \frac{\sin(2\alpha\lambda)}{2\lambda}.$$ *Οι σταθερές L, α, τ, λ, θεωρούνται θετικές και πραγματικές*

→**ΥΠΟΔΕΙΞΗ:** *Οι ορθοκανονικές κυματοσυναρτήσεις που περιγράφουν το πρόβλημα του μονοδιάστατου απειρόβαθου πηγαδιού με* $V(x)=0$ *για* $0<x<L$ *και* $V(x)\to\infty$ *διαφορετικά είναι οι* $\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$ *αν* $0<x<L$ *και* $\psi_n(x)=0$ *διαφορετικά, με ιδιοενέργειες* $E_n = \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}n^2$, *με* $n = 1,2,3,\ldots$

Τμήμα Επιστήμης των Υλικών, Πανεπιστήμιο Πατρών

ΣΤΟΙΧΕΙΑ ΜΟΡΙΑΚΗΣ ΦΥΣΙΚΗΣ ΚΑΙ ΚΒΑΝΤΙΚΗΣ ΧΗΜΕΙΑΣ

26 Ιανουαρίου 2012

<u>ΘΕΜΑ 1.</u> (2.0 Μ) 8 ταυτόσημα, μη αλληλεπιδρώντα, σωματίδια μάζας m_e και σπιν 1/2 βρίσκονται μέσα σε διδιάστατο απειρόβαθο τετραγωνικό πηγάδι δυναμικού με $V(x,y)=0$ για $0<x<L, 0<y<L$ και $V(x,y)\to\infty$ διαφορετικά. Εάν η (συνολική) ελάχιστη ενέργεια του συστήματος σωματιδίων είναι 200 meV, να βρεθούν το μήκος του ~~κουτιού~~ πηγαδιού L και το μέγιστο μήκος κύματος απορρόφησης. Επαναλάβετε το ίδιο αν το σπιν των σωματιδίων είναι 1.

<u>ΘΕΜΑ 2.</u> (2.0 Μ) Δύο ταυτόσημα σωμάτια μάζας m και σπιν 1/2 βρίσκονται μέσα σε δυναμικό μονοδιάστατου αρμονικού ταλαντωτή με $V(x)=\frac{1}{2}m\omega^2x^2$. Αν τα σωμάτια αλληλεπιδρούν μεταξύ τους με το δυναμικό $V_{\text{int}}(x_1,x_2)=gx_1^2e^{-\gamma\left(x_1^2+2x_2^2\right)}$, με g, γ θετικές, πραγματικές σταθερές να υπολογίσετε την πρώτη τάξης διόρθωση στην ενέργεια της θεμελιώδους στάθμης, αν ο όρος $V_{\text{int}}(x_1,x_2)$ θεωρηθεί διαταραχή.

<u>ΘΕΜΑ 3.</u> (2.5 Μ) Με χρήση της θεωρίας μεταβολών (παραλλαγών) υπολογίσετε την ενέργεια της θεμελιώδους στάθμης ενός σωματίου μάζας m σε δυναμικό $V(x)=\begin{cases}\frac{1}{2}kx^2, & \text{x}>0\\ \infty, & \text{x}\le 0\end{cases}$. Πάρετε ως δοκιμαστική κυματοσυνάρτηση την $\psi(x)=Nxe^{-\lambda x^2/2}$ για $x>0$ και μηδέν διαφορετικά, όπου k,λ,N θετικές, πραγματικές σταθερές.

<u>ΘΕΜΑ 4.</u> (1.5 Μ) Εφαρμόστε τη θεωρία Hückel για τον υπολογισμό των ενεργειών των π ηλεκτρονίων και των αντίστοιχων μοριακών τροχιακών του μορίου A_2.

Υπόδειξη: Θεωρήστε ότι κάθε άτομο Α συμμετέχει με ένα $2p_z$ τροχιακό στη δημιουργία ενός απεντοπισμένου π τροχιακού.

<u>ΘΕΜΑ 5.</u> (2.0 Μ) Το περιστροφικό φάσμα του μορίου HCl περιγράφεται από (σχεδόν) ισαπέχουσες φασματικές γραμμές με απόσταση 20.79 cm^{-1} μεταξύ δύο διαδοχικών γραμμών.

(α) Να βρεθεί το μήκος δεσμού R_e του μορίου *HCl*.

(β) Θεωρούμε ότι η σταθερά ελατηρίου του μορίου *HCl* περιγράφεται ικανοποιητικά από τη σχέση $k_0 = \frac{2e^2}{4\pi\varepsilon_0 R_e^3}$. Να βρεθεί η συχνότητα της κύριας φασματικής γραμμής στο δονητικό φάσμα του *HCl*.

ΧΡΗΣΙΜΕΣ ΣΤΑΘΕΡΕΣ: $h = 6.626\ 10^{-34}$ *J sec* $= 4.136\ 10^{-15}$ *eV sec*, $\hbar = 1.054\ 10^{-34}$ *J sec* $= 6.582\ 10^{-16}$ *eV sec*, $m_e = 9.109\ 10^{-31}$ *Kg*, $c=3\ 10^8$ *m/sec*, $e = 1.602\ 10^{-19}$ *C*, $4\pi\varepsilon_0 = 1.112\ 10^{-10}\ C^2/N\,m^2$, $u = 1.66\ 10^{-27}$ *Kg*, $m_H = 1\ u$, $m_{Cl} = 35\ u$

ΧΡΗΣΙΜΕΣ ΣΧΕΣΕΙΣ:

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\lambda x^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{\lambda}} \qquad \int_{-\infty}^{\infty} x^{2n} e^{-\lambda x^2} dx = \frac{1.3.5...(2n-1)}{(2\lambda)^n}\sqrt{\frac{\pi}{\lambda}} \quad \text{για } n = 1,2,3,\ldots, \text{ και } \lambda > 0$$

$$\int_{0}^{\infty} x^n e^{-\lambda x} dx = \frac{n!}{\lambda^{n+1}} \quad \text{για } n = 0,1,2\ldots, \text{ και } \lambda > 0$$

ΥΠΟΔΕΙΞΕΙΣ: *Οι ιδιοτιμές της ενέργειας ενός σωματίου μάζας m σε διδιάστατο απειρόβαθο τετραγωνικό πηγάδι δυναμικού με* $V(x,y) = 0$ *για* $0 < x < L, 0 < y < L$ *και* $V(x,y) \to \infty$ *διαφορετικά είναι* $E_{p,q} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}\left(p^2+q^2\right)$, *με* $p,q = 1,2,3,\ldots.$ *Υπενθυμίζεται ότι οι ιδιοτιμές της ενέργειας που περιγράφουν το πρόβλημα του μονοδιάστατου αρμονικού ταλαντωτή με δυναμικό* $V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$ *είναι οι* $E_n = \hbar\omega(n+\frac{1}{2})$, *με* $n = 0,1,2,\ldots.$ *Επίσης η κανονικοποιημένη (νορμαλισμένη) κυματοσυνάρτηση της θεμελιώδους στάθμης ενός μονοδιάστατου αρμονικού ταλαντωτή έχει τη μορφή* $\psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{1/4}\exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right)$.

Τμήμα Επιστήμης των Υλικών

Πανεπιστήμιο Πατρών

ΣΤΟΙΧΕΙΑ ΜΟΡΙΑΚΗΣ ΦΥΣΙΚΗΣ ΚΑΙ ΚΒΑΝΤΙΚΗΣ ΧΗΜΕΙΑΣ

Εξέταση 13-6-2012

ΘΕΜΑ 1. (1.5 Μ) Διατυπώστε τη γενικευμένη αρχή του Pauli. Στη συνέχεια χρησιμοποιήστε την για να γράψετε την ολική (χωρική ⊗ σπιν) κυματοσυνάρτηση για την πρώτη διεγερμένη κατάσταση του ατόμου ηλίου (He).

ΘΕΜΑ 2. (1.5 Μ) Σωμάτιο μάζας m βρίσκεται σε δυναμικό αρμονικού ταλαντωτή κυκλικής συχνότητας ω. Εάν το σωμάτιο υπόκειται σε διαταραχή $V^{(1)}(x)=\begin{cases} bx, & x\geq 0 \\ 0, & x<0 \end{cases}$ όπου b θετική, πραγματική σταθερά, να βρεθεί η πρώτης τάξης διόρθωση στην ενέργεια της θεμελιώδους στάθμης.

Δίνεται ότι η κανονικοποιημένη κυματοσυνάρτηση της θεμελιώδους στάθμης ενός αρμονικού ταλαντωτή έχει τη μορφή $\psi_0(x)=\left(\dfrac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{1/4}\exp\left(-\dfrac{m\omega}{2\hbar}x^2\right)$.

ΘΕΜΑ 3. (1.5 Μ) Ένα απλοϊκό μοντέλο του βενζολίου αποτελείται από 6 μη αλληλεπιδρώντα, ηλεκτρόνια που βρίσκονται πάνω σε ένα κυκλικό δακτύλιο ακτίνας R. Να βρεθεί η ελάχιστη ενέργεια του μορίου εάν $R=1.39\;10^{-10}\,m$.

Υπενθυμίζεται ότι οι ιδιοενέργειες που περιγράφουν το πρόβλημα του κυκλικού δακτυλίου ακτίνας R είναι οι $E_m=\dfrac{\hbar^2}{2m_eR^2}m^2$, *με* $m=0,\pm1,\pm2,\ldots$

ΘΕΜΑ 4. (2.0 Μ) Εφαρμόστε τη θεωρία Hückel για τον υπολογισμό των ενεργειών και των αντίστοιχων μοριακών τροχιακών του αιθυλενίου (C_2H_4).

Υπόδειξη: Θεωρήστε ότι κάθε άτομο άνθρακα συμμετέχει με ένα $2p_z$ τροχιακό στη δημιουργία ενός απεντοπισμένου π τροχιακού.

$\psi = c\varphi_1 c\varphi_2 = c(2p_z)\,c(2p_z)$

ΘΕΜΑ 5. (2.0 Μ) Σωμάτιο μάζας m και φορτίου e είναι εγκλωβισμένο μέσα σε απειρόβαθο πηγάδι δυναμικού με $V(x)=0$ για $0<x<L$ και $V(x)\to\infty$ διαφορετικά. Σε χρόνο $t=0$ το σωμάτιο βρίσκεται στη θεμελιώδη στάθμη. Εάν σε χρόνους $t\geq0$ το σωμάτιο υπόκειται σε

χρονικά εξαρτημένο δυναμικό $V_{\text{int}}(x) = -eE_0 x \exp(-\gamma t)$, όπου E_0, γ θετικές, πραγματικές σταθερές, να βρεθεί, με χρήση θεωρίας χρονικά εξαρτημένων διαταραχών πρώτης τάξης, η πιθανότητα, μετά από χρόνο $t \to \infty$, να έχουμε μετάβαση από τη θεμελιώδη κατάσταση στην πρώτη διεγερμένη κατάσταση του συστήματος.

Υπενθυμίζεται ότι οι ορθοκανονικές κυματοσυναρτήσεις που περιγράφουν το πρόβλημα του μονοδιάστατου απειρόβαθου πηγαδιού με $V(x) = 0$ για $0 < x < L$ και $V(x) \to \infty$ διαφορετικά είναι οι $\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$ αν $0 < x < L$ και $\psi_n(x) = 0$ διαφορετικά, με ιδιοενέργειες $E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} n^2$, με $n = 1,2,3,\dots$.

1 4 5 $R_{H_2}=R_{D_2}$

ΘΕΜΑ 6. (1.5 M)

Θεωρούμε ότι τα μόρια H_2 και D_2 έχουν το ίδιο μήκους δεσμού (απόσταση μεταξύ των κέντρων μάζας των ατόμων H και H ή D και D). Εάν το περιστροφικό φάσμα του H_2 παρουσιάζει φασματικές γραμμές απόστασης 121.52 cm^{-1} μεταξύ δύο διαδοχικών γραμμών, να σχεδιάσετε το περιστροφικό φάσμα του D_2 και να υπολογίσετε την απόσταση μεταξύ δύο διαδοχικών γραμμών του φάσματος. 2B

Υπόδειξη: Χρησιμοποιήστε το μοντέλο του (άκαμπτου) στερεού στροφέα για να την περιγραφή του περιστροφικού φάσματος.

ΣΤΑΘΕΡΕΣ: *$h = 6.626\ 10^{-34}$ J sec = $4.136\ 10^{-15}$ eV sec, $\hbar = 1.054\ 10^{-34}$ J sec = $6.582\ 10^{-16}$ eV sec, $m_e = 9.109\ 10^{-31}$ Kg, $c = 2.998\ 10^8$ m/sec, $u = 1.66\ 10^{-27}$ Kg, $m_H = 1\ u$, $m_D = 2\ u$*

ΟΛΟΚΛΗΡΩΜΑΤΑ:

$$\int_0^\infty x^n e^{-\lambda x} dx = \frac{n!}{\lambda^{n+1}}, \text{ για } n = 0,1,2,\dots,$$

$$\int_{-\infty}^\infty e^{-\lambda x^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{\lambda}},$$

$$\int_{-\infty}^\infty x^{2n} e^{-\lambda x^2} dx = \frac{1.3.5\dots(2n-1)}{(2\lambda)^n} \sqrt{\frac{\pi}{\lambda}}, \text{ για } n = 1,2,3,\dots.$$

$$\int_0^L x \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right) \sin\left(\frac{2\pi x}{L}\right) dx = -\frac{8L^2}{9\pi^2}.$$

Σε όλα τα ολοκληρώματα $\lambda > 0$.

Τμήμα Επιστήμης των Υλικών

Πανεπιστήμιο Πατρών

ΣΤΟΙΧΕΙΑ ΜΟΡΙΑΚΗΣ ΦΥΣΙΚΗΣ ΚΑΙ ΚΒΑΝΤΙΚΗΣ ΧΗΜΕΙΑΣ

Εξέταση 28-9-2012

ΘΕΜΑ 1. (2.0 M) 12 ταυτόσημα, μη αλληλεπιδρώντα, σωματίδια μάζας m και σπιν 1/2 ...ρίσκονται εγκλωβισμένα μέσα σε δυναμικό διδιάστατου αρμονικού ταλαντωτή με $V(x,y)=\frac{1}{2}m\omega^2\left(x^2+y^2\right)$. Να βρεθεί η ελάχιστη ενέργεια του συστήματος σωματιδίων και ... μέγιστο μήκος κύματος απορρόφησης εάν $\hbar\omega = 20\ meV$. Επαναλάβετε το ίδιο εάν τα ...ματίδια έχουν σπιν 1.

...ενθυμίζεται ότι οι ιδιοενέργειες που περιγράφουν το πρόβλημα του διδιάστατου αρμονικού ...αντωτή είναι οι $E_{n_x,n_y} = \hbar\omega(n_x+n_y+1)$, με $n_x, n_y = 0,1,2,\ldots$

...ΜΑ 2. (2.5 M) Χρησιμοποιήστε θεωρία μεταβολών (παραλλαγών) για τον υπολογισμό ... ενέργειας της θεμελιώδους στάθμης ενός σωματίου μάζας m σε κεντρικό δυναμικό ...$(r)=\frac{1}{2}kr^2$, με k θετική πραγματική σταθερά. Πάρετε ως δοκιμαστική κυματοσυνάρτηση $\psi(r,\theta,\phi) = N\exp(-\lambda r)$, με N, λ θετικές πραγματικές σταθερές.

...ΜΑ 3. (2.0 M) Εφαρμόστε τη θεωρία Hückel για τον υπολογισμό των ενεργειών των ...τρονίων του κυκλο-βουταδιενίου (C_4H_4). Ποια η ενέργεια του μορίου και ποιο το σπ... ...ορίου στη θεμελιώδη του κατάσταση;

...ξη: Θεωρήστε ότι κάθε άτομο άνθρακα συμμετέχει με ένα $2p_z$ τροχιακό στη δημιουργί... ...εντοπισμένου π τροχιακού.

...4. (1.5 M) Θεωρούμε ότι τα μόρια $^1H_2$ και $^2H_2$ περιγράφονται από την ίδι... ...ελατηρίου. Εάν το δονητικό φάσμα του $^1H_2$ παρουσιάζει κύρια φασματική γραμμ... ...5.2 cm^{-1}, υπολογίστε την κύρια φασματική γραμμή του δονητικού φάσματος το...

ΘΕΜΑ 5 (2.0 Μ) Σωμάτιο μάζας m και φορτίου q βρίσκεται σε δυναμικό αρμονικού ταλαντωτή σταθεράς συχνότητας ω. Τη χρόνο $t=0$ το σωμάτιο βρίσκεται στην θεμελιώδη στάθμη. Εάν σε χρόνους $t \geq 0$ το σωμάτιο υπόκειται σε χρονικά εξαρτημένο δυναμικό $V(x,t) = -qxE_0 \exp(-t/\tau)$, όπου E_0, τ θετικές σταθερές, να βρεθεί η πιθανότητα, μετά από χρόνο $t \to \infty$, να έχει μεταβεί από τη θεμελιώδη κατάσταση στην πρώτη διεγερμένη κατάσταση του συστήματος, με χρήση θεωρίας χρονικά εξαρτημένων διαταραχών πρώτης τάξης.

Δίνεται ότι οι κανονικοποιημένες ιδιοσυναρτήσεις της θεμελιώδους στάθμης και της πρώτης διεγερμένης στάθμης ενός αρμονικού ταλαντωτή έχουν τη μορφή $\psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{1/4} \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right)$ και $\psi_1(x) = \left(2\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{1/2} x\psi_0(x)$, αντίστοιχα. Επίσης, οι ιδιοτιμές της ενέργειας του αρμονικού ταλαντωτή δίνονται από τη σχέση $E_n = \hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)$,

$n = 0,1,\ldots$

ΣΤΑΘΕΡΕΣ: $h = 6.626\ 10^{-34}$ J sec $= 4.136\ 10^{-15}$ eV sec, $\hbar = 1.054\ 10^{-34}$ J sec $= 6.582\ 10^{-16}$ eV sec, $m_e = 9.109\ 10^{-31}$ Kg, $c = 2.998\ 10^{8}$ m/sec, $u = 1.66\ 10^{-27}$ Kg, $m_H = 1u$, $m_D = 2u$

ΟΛΟΚΛΗΡΩΜΑΤΑ:

$$\int_0^{\infty} x^n e^{-\lambda x} dx = \frac{n!}{\lambda^{n+1}}, \text{ για } n = 0,1,2,\ldots$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\lambda x^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{\lambda}}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} x^{2n} e^{-\lambda x^2} dx = \frac{1.3.5\ldots(2n-1)}{(2\lambda)^n}\sqrt{\frac{\pi}{\lambda}}, \text{ για } n = 1,2,3,\ldots$$

Σε όλα τα ολοκληρώματα $\lambda > 0$

ΥΠΟΔΕΙΞΗ: Σε σφαιρικές συντεταγμένες

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}$$