

Atkins: Fizikai kémia 12. fejezet

Vizsgakérdések és feladatok

1. A dobozba zárt részecske modell; a Schrödinger-egyenlet felírása.
2. A dobozba zárt részecske hullámfüggvénye: a kvantumszám lehetséges értékeinek megállapítása a hullámfüggvény folytonos voltának figyelembevételével.
3. A dobozba zárt részecske hullámfüggvényének normálása.
4. Tartózkodási valószínűségi sűrűségfüggvény a dobozba zárt részecske különböző kvantumszámú állapotaiban.
5. A korrespondencia-elv érvényesülése a dobozba zárt részecskénél.
6. A dobozba zárt részecske energiája; a zérusponti energia és a Heisenberg-elv.
7. A dobozba zárt részecske impulzusa.
8. A harmonikus oszcillátor klasszikus fizikai modellje: a mozgás jellege, a potenciális energia. Az egyensúlyi helyzettől való eltérés változása az időben; a mozgás frekvenciája.
9. A harmonikus oszcillátor Schrödinger-egyenlete.
10. A harmonikus oszcillátor sajátenergiái; a zérusponti energia és a Heisenberg-elv.
11. A harmonikus oszcillátor hullámfüggvénye és valószínűségi sűrűségfüggvénye a különböző kvantumszámú állapotokban.
12. A korrespondencia-elv érvényesülése a harmonikus oszcillátor esetében.
13. A harmonikus oszcillátor előfordulása a klasszikusan tiltott tartományban.
14. A körmozgás (kétdimenziós merev rotátor) modellje; impulzusmomentum.
15. A körmozgás Schrödinger-egyenlete. Energia-sajátértékek. Impulzusmomentum-sajátértékek.
16. A kétdimenziós merev rotátor hullámfüggvénye: a kvantumszám lehetséges értékeinek megállapítása a hullámfüggvény egyértékűségének felhasználásával.
17. Igazolja számítással, hogy a körmozgáshoz tartozó hullámfüggvény az impulzusmomentum-operátor z-komponensének is sajátfüggvénye!
18. A körmozgás és a határozatlansági elv.
19. A gömbi mozgás (háromdimenziós merev rotátor) modellje és Schrödinger-egyenlete.
20. A háromdimenziós merev rotátor hullámfüggvénye és energiája különböző kvantumszámú állapotokban; az energiaszintek elfajultsága.
21. A háromdimenziós merev rotátor impulzusmomentuma és annak iránykvantáltsága.
22. A degeneráció fogalma a kvantummechanikában (általános definíció és példák).
23. A 6.65×10^{-27} kg tömegű részecske végtelen mély, derékszögű potenciálvölgyben mozog. Az $n=3$ szinthez tartozó energiaérték 2×10^{-24} J. Mekkora a völgy szélessége? (6,09 nm)

24. Számítsuk ki az L hosszúságú potenciáldobozban azt a koordinátát, amelynek kis környezetében a részecske a maximális valószínűség 25 %-ával tartózkodik, ha $n=1$, és a hullámfüggvény normálási tényezője $(2/L)^{1/2}$. ($L/6$ és $5L/6$)
25. Számítsuk ki az $n=4$ és $n=5$ szintek közötti energiakülönbséget az egydimenziós potenciáldobozban mozgó deutériumatom esetében, ha a doboz hossza 5 nm. A deutériumatom relatív atomtömege 2,014. ($5,91 \cdot 10^{-24}$ J)
26. Mennyi az L hosszúságú dobozba zárt részecske átlagos impulzusa az n kvantumszámmal jellemzett állapotban? A hullámfüggvény normálási tényezője $(2/L)^{1/2}$. (0)
27. Egy elektron 1 nm hosszúságú molekulában mozog. Mekkora az elektron (a) minimális energiája, (b) az a legkisebb gerjesztési energia, amellyel a minimális energiájú állapotból kimozdítható? ($6,02 \cdot 10^{-20}$ J; $1,806 \cdot 10^{-19}$ J)
28. Egy elektron 1 nm hosszúságú molekulában a minimális energiájú állapotban mozog. Mekkora annak a valószínűsége, hogy az $x_1=0$ és az $x_2=0.2$ nm koordináták között találjuk? A hullámfüggvény normálási tényezője $(2/L)^{1/2}$, ahol L a doboz hossza. (0,05)
29. Egy proton 10^{-15} m hosszúságú egydimenziós tartományban mozog. Mekkora annak a valószínűsége, hogy a részecskét alapállapotban az $x_1=0.25 L$ és az $x_2=0.75 L$ koordináták között találjuk? A hullámfüggvény normálási tényezője $(2/L)^{1/2}$, ahol L a doboz hossza. (0,82)
30. Számítsuk ki, hogy mekkora az 1 nm hosszúságú dobozba zárt elektron következő energiaszintjeinek különbsége J, kJ/mol és cm^{-1} egységekben: a) $n=2$ és $n=1$, b) $n=6$ és $n=5$. ($1,87 \cdot 10^{-19}$ J; 108,9 kJ/mol; 9099 cm^{-1} , ill. $6,626 \cdot 10^{-19}$ J; 399,2 kJ/mol; 33363 cm^{-1})
31. Mekkora a két legalacsonyabb energiaszint különbsége az 5 cm hosszúságú, egydimenziós tartályba zárt O_2 -molekula esetén? $M_r(\text{O}_2)=32$. ($1,24 \cdot 10^{-39}$ J)
32. Számítsuk ki, hogy mekkora annak a harmonikus oszcillátornak a zérusponti energiája, amelynél a részecske tömege $2,33 \cdot 10^{-26}$ kg, az erőállandó pedig 155 N/m! ($4,3 \cdot 10^{-21}$ J)
33. Mekkora az erőállandó annál a harmonikus oszcillátornál, amelynél a részecske tömege $1,33 \cdot 10^{-25}$ kg, a szomszédos energiaszintek energiakülönbsége pedig $4,82 \cdot 10^{-21}$ J? (277,8 N/m)
34. Számítsuk ki, hogy milyen hullámhosszú foton hoz létre átmenetet a harmonikus oszcillátor szomszédos energiaszintjei között, ha a részecske tömege épp a protontömeggel egyenlő, az erőállandó pedig 855 N/m! (2635 nm)
35. Számítsuk ki, hogy mekkorát változna a hullámhossz, ha az előző feladatban szereplő részecske tömegét megkétszereznénk! (1091,5 nm-rel növekedne)
36. Egy argonatom rögzített középpont körül, körpályán kering. Számítsuk ki, hogy mekkora távolságra van az atom a középponttól, ha a pályaimpulzusmomentumot jellemző kvantumszám $m_l=2$, a keringés energiája pedig $2,47 \cdot 10^{-23}$ J! (116,5 pm)
37. Számítsuk ki az első három energiaszint energiáját, impulzusmomentumának nagyságát és az egyes szintekhez tartozó m_l értékek számát a H_2 -molekula esetében a gömbi mozgás modelljének a felhasználásával, ha a molekula tehetetlenségi nyomatéka $4,603 \times 10^{-48} \text{ kgm}^2$! (0 J; $2,42 \cdot 10^{-21}$ J; $7,25 \cdot 10^{-21}$ J; 0 J·s; $1,49 \cdot 10^{-34}$ J·s; $2,58 \cdot 10^{-34}$ J·s; 1; 3; 5)
38. Egy tömegpont gömbfelületen mozog. Az $l=1$ -nek megfelelő állapotban számítsuk ki az impulzusmomentum nagyságát, valamint z -tengelyre vonatkozó vetületeinek lehetséges értékét! ($1,49 \cdot 10^{-34}$ J·s; $-1,0546 \cdot 10^{-34}$ J·s; 0; $1,0546 \cdot 10^{-34}$ J·s)

39. Mekkora a háromdimenziós forgómozgást végző $^1\text{H}^{127}\text{I}$ -molekula első két forgási szintjének energiája? A tehetetlenségi nyomaték $I=\mu R^2$, ahol μ a molekula redukált tömege, $R=160\text{ pm}$ a kötészossz. (0; $2,62\cdot 10^{-22}\text{ J}$)