

Extra lektionsuppgifter i Molekylfysik

X 2

Är en elektron i en väte liknande atom i medeltal längst från kärnan i en $2s$ - eller en $2p$ -orbital? [P13.11 i 7 uppl.]

X 4:1

Energien hos H_2^+ med kärn-kärn-avståndet R ges av relationen

$$E = E_H + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 R} - \frac{V_1 + V_2}{1 + S}$$

Där $E_H = -13.6$ eV är energin hos en isolerad väteatom, V_1 den attraktiva potentiella energin mellan elektronen lokaliserad vid den ena kärnan och den andra kärnans laddning, V_2 är attraktionen mellan överlappstätheten och en kärna, S är överlappsintegralen. Värden för dessa är givna nedan; rita den molekylära potentiella energin, och sök dissociationsenergin (i eV) samt jämviktsavståndet.

R/a_0	0	1	2	3	4
V_1/E_h	11.000	10.729	10.473	10.330	10.250
V_2/E_h	11.000	10.736	10.406	10.199	10.092
S	1.000	0.858	0.587	0.349	0.189

där a_0 är Bohrradien, och $E_H = -E_h/2$. [P11.8 i 8 uppl.]

X 4:2

Använd data från uppgiften ovan för att beräkna och rita motsvarande potential för den antibindande orbitalen, vilken ges av

$$E = E_H + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 R} - \frac{V_1 - V_2}{1 - S}$$

[P11.9 i 8 uppl.]

X 5

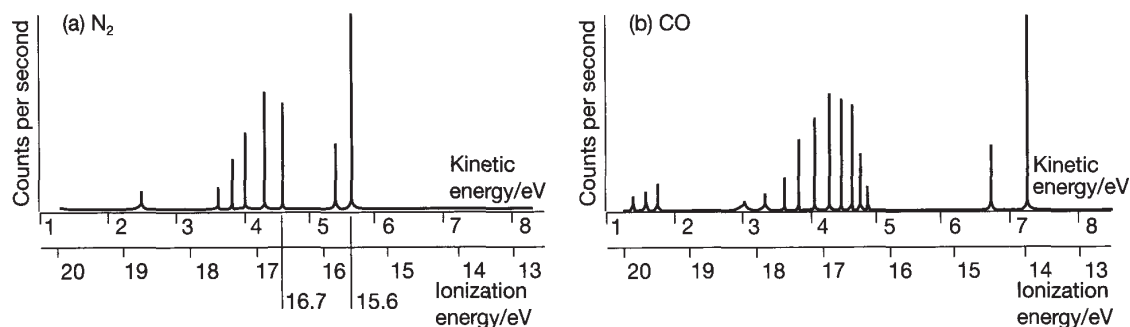
Använd funktionerna a) e^{-kr} och b) e^{-kr^2} som approximativa vågfunktioner för väteatomens grundtillstånd. Beräkna med hjälp av variationsprincipen det optimala värdet på k för respektive fall och avgör vilken funktion som är bäst. [P11.24 i 8 uppl.]

c) Använd ϕ för att approximera grundtillståndet för en partikel i en låda med längden a . Beräkna energin för detta tillstånd med variationsprincipen (notera att det inte finns någon parameter att optimera). Jämför med det exakta svaret!

$$\begin{aligned}\phi &= x(a-x), & 0 \leq x \leq a \\ &= 0, & x < 0, x > a\end{aligned}$$

X 7

Fotoelektron-spektra för N_2 och CO är givna i figuren nedan. Beskriv jonisationsprocesserna som givit upphov till respektive spektrallinje, och klassificera de orbitaler från vilka elektronerna har stötts ut som bindande, icke-bindande eller antibindande, med ledning av vibrationsstrukturen i banden. Vad kan man säga om vibrationsenerginivåerna i jonerna utifrån banden omkring 4 eV? [P17.11 i 7 uppl.]

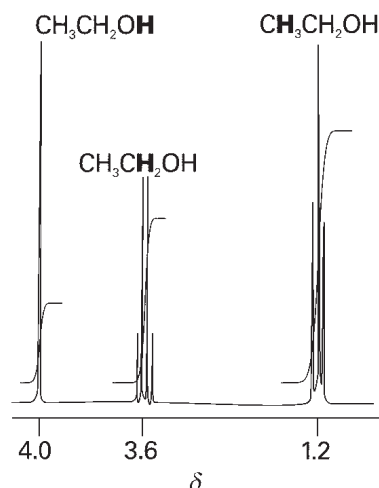


X 8

Figuren visar ett 1H -NMR-spektrum för etanol; fetstil indikerar protonen som svarar mot respektive resonans. De sigmoida kurvorna är den integrerade signalen.

a) Redogör för utseendet hos detta spektrum m.a.p. kemiskt skift, linjesplittring (CH_3 och CH_2) och intensitet.

b) Beskriv hur ett ^{13}C -spektrum för etanol ser ut. Ignorera spinn-spinn-koppling mellan grupper med olika kemiska skift.



X 9

Spinn-gitter-relaxationstiden (*spin-lattice relaxation time*) för bensen (en liten molekyl) i ett lätttröligt deutererat lösningsmedel ökar med temperaturen, medan den minskar för en oligonukleotid (en stor molekyl). Vad beror det på? [P14.23 i 9 uppl.]

X 10

z -komponenten hos ett magnetfält på avståndet R från ett magnetiskt moment parallellt med z -axeln, och med projektionen m_I , ges av

$$B_{nuc} = -\frac{\gamma \hbar \mu_0}{4\pi R^3} (1 - 3 \cos^2 \theta) m_I$$

I ett fast ämne kan splittringen detta ger upphov till användas för att beräkna avståndet R mellan protoner. I t.ex. gips kan splittringen av H_2O -resonansen tolkas som att protonerna påverkar varandra med ett fält om 0,715 mT. Beräkna utifrån detta avståndet mellan protonerna i H_2O . [P14.9 i 9 uppl.]