

Svar till uppgifter i Atkins, Topic 4-26.

Peter Jason

October 2, 2018

Lektion 1

E8.1	a) 52pm, b) 5.8 μ m
E4.2	a) (i) Ingen emission, (ii) 2.82eV, 10 ⁶ m/s; b) (i)0.30eV, 320km/s, (ii) 1.4eV, 700km/s
E8.3a)	(i) 0 (ii) 0 (iii) $i\hbar$ (iv) $2i\hbar x$ (v) $i\hbar n x^{(n-1)}$
P5.8a,b)	a) $\Psi = \sqrt{2/L} \sin(n\pi x/L)$, b) $\Psi = 1/\sqrt{2L}$
E6.3a)	(i) Ja, ik , (ii) Nej, (iii) Nej, (iv) Nej, (v) Nej, (vi) Nej,
E6.3b)	(i) Ja, a^2 , (ii) Nej, (iii) Ja, 0 (ty $0 \cdot x = 0!$), (iv) Nej, (v) Ja, 0, (vi) Ja, $-k^2$
P5.1	a) 0.02, b) 0.047, c) $7 \cdot 10^{-6}$, d) 0.5, e) 0.61
P11.1	$E_2 - E_1 = 1.24 \cdot 10^{-39} J$, $n = 2.2 \cdot 10^9$, $E_n - E_{n-1} = 1.85 \cdot 10^{-30}$
P6.2	a) $-\hbar^2/2m(d^2/dx^2)$, $-\hbar^2\nabla^2/2m$, b) $1/x$, c) $\sum_j Q_j \bar{r}_j$, d) $\langle x \rangle = (\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2)^{1/2}$, $-i\hbar(\langle d^2/dx^2 \rangle - \langle d/dx \rangle^2)^{1/2}$

Lektion 2

E9.3a)	(a) $1.807 \cdot 10^{-19} J$, 1.13eV, 109kJ/mol, 9099cm ⁻¹ , (b) $6.627 \cdot 10^{-19} J$, 4.14eV, 399kJ/mol, 33360cm ⁻¹ ,
E9.3b)	(a) $2.14 \cdot 10^{-19} J$, ...eV, ...kJ/mol, ...cm ⁻¹ , (b) $3.48 \cdot 10^{-19} J$, ...eV, ...kJ/mol, ...cm ⁻¹ ,
E9.5	a) $\langle p \rangle = 0$, $\langle p^2 \rangle = h^2/4L^2$, b) $\langle p \rangle = 0$, $\langle p^2 \rangle = h^2/L^2$
E12.1	a) 0.1 eV, b) 0.026 eV
E12.2	a) 278 N/m, b) 260 N/m
P12.3	$\kappa = -m\omega/2\hbar = -\sqrt{mk}/2\hbar$
P13.6	(a) \hbar , (b) $-2\hbar$, (c) $\langle L_z \rangle = 0$, (d) $\langle L_z \rangle = \hbar \cos^2(\chi) - \hbar \sin^2(\chi) = \hbar \cos(2\chi)$,
P9.8	(a) 2.05eV, (b) 4.98×10^{14} Hz, (c) lower-increases

Lektion 3

- E17.4 (a) $r = 0, 4a_0$, (b) $r = 0, 3.5a_0, 11.5a_0$
 E18.4 a) $V = -e^2/\pi\epsilon_0a_0$, $\langle E_k \rangle = e^2/2\pi\epsilon_0a_0$
 E18.6 a) $r_{max} = 13.08a_0/Z$ b) $12a_0/Z$ (båda bestäms grafiskt)
 E21.8a) Spinn: $S = 1$, banrörelsemängdsmoment $L = 1$, totalt rörelsemängdsmoment $J = 2$
 E21.8b) Spinn: $S = 1/2$, banrörelsemängdsmoment $L = 2$, totalt rörelsemängdsmoment $J = 3/2$
 X2 $2s - 6a_0/Z$, $2p - 5a_0/Z$, dvs $2s$ är längst från kärnan.
 P17.1 Till $n = 6$ från $n = 7, 8, \dots$, $\lambda^{-1} = R_H(1/36 - 1/n^2)$, n $n = 7, 8, \dots$
 P18.3a På avståndet $2a_0$ från kärnan längs z -axeln ($\theta = 0$).

Lektion 4

- E24.1a) $Li_2 : 1\sigma_g^2, b = 1; Be_2 : 1\sigma_g^2 1\sigma_u^2, b = 0; C_2 : 1\sigma_g^2 1\sigma_u^2 1\pi_u^4, b = 2$
 E24.1b) $F_2^- : 1\sigma_g^2 1\sigma_u^2 2\sigma_g^2 1\pi_u^4 1\pi_g^4 2\sigma_u^1, b = 0.5;$
 $N_2 : 1\sigma_g^2 1\sigma_u^2 1\pi_u^4 2\sigma_g^2, b = 3;$
 $O_2^{2-} : 1\sigma_g^2 1\sigma_u^2 2\sigma_g^2 1\pi_u^4 1\pi_g^4, b = 1$
 E25.3 NO^- $b=2$, NO^+ $b=3$, d.v.s. NO^+ har kortast bindning.
 SO^- $b=3/2$, SO^+ $b=5/2$, d.v.s. SO^+ har kortast bindning.
 E23.1a) $N = (1 + \lambda^2 + 2\lambda S)^{-1/2}$
 E24.6 a) 374km/s , b) 1.78Mm/s
 P24.1 $S \rightarrow 0$, då $r \rightarrow 0$, ty blir då som två ortogonala atomorbitaler.
 $S \rightarrow 0$, då $r \rightarrow \infty$, ty vågfunktionerna avtar exponentialt, dvs litet överlapp.
 S_{max} då $r = 2.1a_0$
 P23.3 -
 X4.1 $E_{Diss} = 1.9\text{eV}$, $r_e = 130\text{pm}$

Lektion 5

E26.1a) Linjärt: $\begin{vmatrix} \alpha - E & \beta & 0 \\ \beta & \alpha - E & \beta \\ 0 & \beta & \alpha - E \end{vmatrix}$ Cykliskt: $\begin{vmatrix} \alpha - E & \beta & \beta \\ \beta & \alpha - E & \beta \\ \beta & \beta & \alpha - E \end{vmatrix}$

E26.1b) Linjärt: $\begin{vmatrix} \alpha - E & \beta & 0 & 0 \\ \beta & \alpha - E & \beta & 0 \\ 0 & \beta & \alpha - E & \beta \\ 0 & 0 & \beta & \alpha - E \end{vmatrix}$ Cykliskt: $\begin{vmatrix} \alpha - E & \beta & 0 & \beta \\ \beta & \alpha - E & \beta & 0 \\ 0 & \beta & \alpha - E & \beta \\ \beta & 0 & \beta & \alpha - E \end{vmatrix}$

E26.3

a) benzene cation $E_{deloc} = 3\beta$, benzene anion $E_{deloc} = \beta$
 b) allyl radical $E_{deloc} = (2\sqrt{2} - 2)\beta \approx 0.83\beta$, cyclobutadiene $E_{deloc} = 2\beta$

X5c

$$E = \frac{5\hbar^2}{a^2m}; E_0 = \frac{\pi^2\hbar^2}{2a^2m} \text{ och } E - E_0 = \frac{10 - \pi^2}{\pi^2} \frac{\pi^2\hbar^2}{2a^2m} = \left(\frac{10}{\pi^2} - 1\right) E_0 \approx 0.013E_0$$

P26.1

$$E = \alpha_O, \frac{1}{2}(\alpha_O + \alpha_C \pm (\alpha_O - \alpha_C)\sqrt{1 + \frac{12\beta^2}{(\alpha_O - \alpha_C)^2}}),$$

$$E_{deloc} = (\alpha_O - \alpha_C)\left(\sqrt{1 + \frac{12\beta^2}{(\alpha_O - \alpha_C)^2}} - \sqrt{1 + \frac{4\beta^2}{(\alpha_O - \alpha_C)^2}}\right), 4\beta^2/(\alpha_O - \alpha_C)$$