

Svar till uppgifter i Atkins, Topic 41-54

Thomas Ederth, 13 Oktober 2014

Lektion 6, Vibrationsspektroskopi

- E43.2 a) 1,1 %, b) 28,4 %
E44.2a a) 3 moder, b) 6 st, c) 12 st
E44.2b a) 30 st, b) 39 st, c) 13 st (linjär)
E44.1a b) , c) och d)
E44.1b a) , b) , och c)
P43.1 Kraftkonstant 93,8 N/m, nollpunktsenergi 143 cm⁻¹, dissociationsenergi 3,4 eV
E43.4a $k_{\text{HF}} = 969$ N/m, $k_{\text{H}^{35}\text{Cl}} = 516$ N/m, $k_{\text{H}^{81}\text{Br}} = 412$ N/m, $k_{\text{H}^{126}\text{I}} = 315$ N/m
E43.4b 3002 cm⁻¹, 2142 cm⁻¹, 1884 cm⁻¹ och 1639 cm⁻¹ (samma ordning som ovan)
P43.2 a) 5,15 eV, b) 5,20 eV
P43.5 $\nu_{\text{max}} = 2D_e/\tilde{\nu} - 1/2$
-

Lektion 7, Elektronspektroskopi

- E40.9a a) 26,5 ps, b) 2,65 ps
E40.9b a) 0,796 ns, b) 2,17 ps
P45.1 $1\sigma_g^2 1\sigma_u^2 1\pi_u^4 2\sigma_g^0 1\pi_g^1$
E40.2 a) 5340 M⁻¹ cm⁻¹, b) 1177 M⁻¹ cm⁻¹ = 1 177 000 cm² mol⁻¹
X7a Rik vibrationsstruktur innebär i allmänhet att elektroner från bindande orbitaler har emitterats.
P46.1 Topparna kommer från vibrationsstruktur, se kurslitt. för detaljer.
E45.11a Dimetylbuten har absorption vid den kortare våglängden
P45.8 Lägsta absorptionsenergin ökar
P40.14 Hastigheten är 0,077c, T = 8,34 × 10⁵ K
P45.3 49360 cm⁻¹
P40.11 497 kDa , 51 nm
-

Lektion 8, Magnetresonans

- E47.5 a) 165 MHz, b) 44,2 MHz (fel tecken på potensen för γ_N i uppgiften!)
E47.9a a) $\delta N/N = 1,029 \times 10^{-6}$, b) $5,15 \times 10^{-6}$, c) $3,43 \times 10^{-5}$
E47.9b a) $4,31 \times 10^{-7}$, b) $2,16 \times 10^{-6}$, c) $1,34 \times 10^{-5}$
E48.2a a) $\Delta B_{\text{loc}} = 11,4 \times 10^{-6}$ T, b) 114×10^{-6} T
E48.2b a) $4,2 \times 10^{-6}$ T, b) $3,6 \times 10^{-5}$ T
P48.3 Det är ingen större skillnad mellan hur de två ekvationerna passar.
X9 Slumprörelser hos bensen sker vid hastigheter nära ν_L vid rumstemperatur vilket ger kort T_1 , men vid ökande temperatur ökar skillnaden och T_1 ökar. För en större molekyl sker rörelser långsamt vid RT (T_1 stort), men med ökande temperatur hamnar frekvensen i rörelsen närmare ν_L , och T_1 minskar.
P48.1 Fältgradienten är 29 $\mu\text{T}/\text{m}$
X10 158 pm
-

Lektion 9, Statistisk termodynamik

- E51.3 a) 1 (båda lika), b) 0 eller ∞ beroende på hur man räknar, alla i grundtillståndet!
- E52.1a a) (i) 8,23 pm (ii) 2,60 pm, b) (i) $1,79 \times 10^{27}$ (ii) $5,67 \times 10^{28}$
- E52.1b a) (i) 22,4 pm (ii) 7,1 pm, b) (i) $8,9 \times 10^{25}$ (ii) $2,8 \times 10^{27}$
- E52.13a $q = 4,292$, populationerna förhåller sig som 0.035 : 0.038 : 1
- E52.13b $q = 5,805$, populationerna förhåller sig som 0.754 : 0.181 : 1
- P51.1** a) $W = 1$, b) De mest sannolika är $\{2,2,0,1,0,0\}$ och $\{2,1,2,0,0,0\}$
- P52.3** a) (i) 5,00 (ii) 6,26
b) Vid 298 K: $p_0 = 1,00$ och $p_2 = 6,5 \times 10^{-11}$. 5000 K: $p_0 = 0,80$ och $p_2 = 0,12$
- E51.6 a) 354 K, b) 213 K (15% på den övre nivån, inte 15% i varje exciterat tillstånd!)
- P52.7 a) 100 K: $q = 1,049$, $p_0 = 0,953$, $p_1 = 0,044$, $p_2 = 0,0002$
b) 298 K: $q = 1,55$, $p_0 = 0,645$, $p_1 = 0,23$, $p_2 = 0,083$
- P51.4 Jämförelse mellan kvoterna n_1/n_0 ger att det inte råder jämvikt.
-