

# Räkneövning 1 i atomers och molekylers struktur

(14.1.2000)

1. **de Broglie:** Beräkna de Broglievåglängden för en elektron som har accelererats med en spänningsdifferens på a) 100 V, b) 1,0 kV, c) 100 kV.
2. **Planck distributionslag:** Visa att medelenergin för en oscillator är  $h\nu (e^{h\nu/kT} - 1)^{-1}$ .
3. **Operatorer:** Vilka av följande funktioner är egenfunktioner till  $\frac{d}{dx}$  operatorn a)  $e^{ikx}$  b)  $\cos(kx)$  c)  $k$ , d)  $kx$  och e)  $e^{ax^2}$ ? Vad fås när man opererar med andra derivata operatorn ( $\frac{d^2}{dx^2}$ ) och vilka av funktionerna kan anses vara egenfunktioner till  $\frac{d^2}{dx^2}$  ?
4. **Kommutatorer:** Visa att impulsoperatorn och lägesoperatorn inte kommuterar.
5. **Normalisering:** Gauss funktioner ( $e^{-\alpha r^2}$ ) används ofta som basfunktioner när man söker approximativa lösningar till atomära och molekylära Schrödinger ekvationer. Normalisera den radiella funktionen och beräkna det förväntade medelavståndet från atomkärnan för en elektron i heliumatomen om  $\alpha=1.68$  a.u.
6. **Enheter:** En spektroskopist uppmätte energiövergångar vid följande våglängder: a) 600 nm b) 550 nm c) 400 nm d) 200 nm e) 150 pm f) 1 cm. Härled omvandlingsfaktorerna och beräkna övergångsenergierna i kJ/mol, kcal/mol, atomära enheter, elektronvolt, J, hertz, och K. Ange vilken typ av elektromagnetisk strålning det är fråga om, samt eventuellt dess färg.