

Atomers och molekylers struktur delförhör 1 den 3.3.2000

1. Redogör för kvantmekanikens postulat. Förklara vad som menas med en operator och vad som menas med en egenfunktion. Vilka villkor måste vågfunktionen och dess kvadrat uppfylla? Beskriv kort några av de experimentella iakttagelser som bidrog till kvantmekanikens födelse och varför kvantiseringen måste införas.
2. Konstruera Hückelproblemet för 1,3-butadien. Lös Hückeldeterminanten för energier och rita ett energidiagram för π -elektronerna. Ange elektronkonfigurationen och totalenergin för molekylerna, dess katjon och anjon. Uppskatta vid vilken våglängd transitionen (övergången) mellan HOMO och LUMO sker om resonansparameterns (β) värde är -22000 cm^{-1} och α -värdet är -5.90 eV . Hur stor är molekylens elektronaffinitet och jonisationspotential?
3. En elektron befinner sig i en potential, som är $= 0$ inom intervallet $[0, 10 \text{ nm}]$, medan utanför detta intervall är potentialen oändligt stor. Anta att grundtillståndets vågfunktion kan beskrivas med hjälp av en Gaussisk klockkurva. Vilken exponent skall man välja för att den kinetiska energin för grundtillståndet skall bli så nära det analytiskt korrekta resultatet som möjligt.
4. Ett antal lågtliggande exciterade tillstånd hos Zn har elektronkonfigurationen $3d^9 4p^1$. Vilka termsymboler har dessa tillstånd? Vilket av dem ligger energetiskt lägst? Vilka är degenerationsgraden för de erhållna tillstånden? Vilka övergångar mellan dessa tillstånd är dipoltillåtna?
5. De två lägsta egenlösningarna till den harmoniska oscillatorn är:

$$\psi_0 = N_0 e^{-\frac{y^2}{2}}$$
$$\psi_1 = N_1 y e^{-\frac{y^2}{2}}$$

Bestäm normaliseringskoefficienterna när volymelementet är αdy . Är ψ_0 och ψ_1 ortogonala? Dipoloperatorn är proportionell mot y . Är en övergång från ψ_0 till ψ_1 dipoltillåten?

6. Redogör kort för:

- Tunneeffekten
- Born-Oppenheimer approximationen
- Hybridisering och hybridorbitaler
- Basfunktioner
- Obestämbarsrelationsrelationen (The uncertainty principle)
- Skillnaden mellan halvledare av n-typ och av p-typ.

Besvara gärna alla uppgifter, men endast de 5 bästbesvarade uppgifterna beaktas vid bedömningen.

Användbara integraler är:

$$\int_0^{\infty} e^{-a^2 x^2} dx = \frac{1}{2a} \sqrt{\pi} \quad (1)$$

$$\int_0^{\infty} x^{2n} e^{-ax^2} dx = \frac{1 \cdot 3 \cdot 5 \dots (2n-1)}{2^{n+1} a^n} \sqrt{\left(\frac{\pi}{a}\right)} \quad (2)$$

Den en-dimensionella Schrödinger ekvationen lyder:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{8\pi^2 m} \frac{d}{dx} + V(x)\right)\psi = E\psi \quad (3)$$