

Eksamensoppgave i
KJ1041 Kjemisk bindingsteori, spektroskopi og kinetikk

Faglig kontakt under eksamen: Eirik Hjertenæs

Tlf: 92 60 03 64

Eksamensdato: 6. desember 2013

Eksamenstid (fra–til): 09:0013:00

Hjelpemiddelkode/Tillatte hjelpemidler: A: Alle trykte og håndskrevne hjelpemidler tillatt.
Alle kalkulatorer tillatt.

Målform/språk: bokmål

Antall sider: 3

Antall sider vedlegg: 0

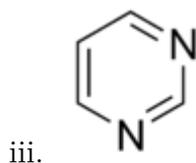
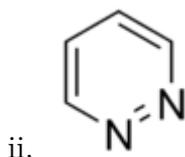
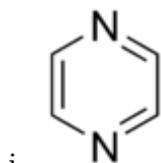
Kontrollert av:

Dato

Sign

Oppgave 1

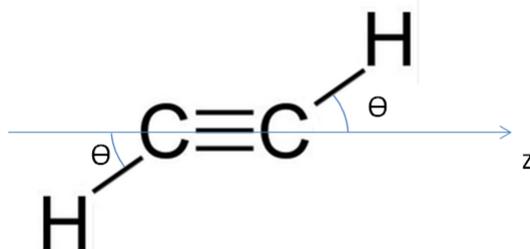
a) Bestem punktgruppen til hver av de følgende planære molekylene



- b) Ved hjelp av symmetriargument, bestem om molekylene over har permanente dipolmoment.
- c) Vi betrakter to hermiteske operatorer \hat{A} og \hat{B} og produktoperatoren $\hat{A}\hat{B}$. Vis at produktoperatoren er hermitesk hvis \hat{A} og \hat{B} kommuterer ($[\hat{A}, \hat{B}] = 0$). Er operatoren $\hat{O} = \frac{1}{2}(\hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A})$ hermitesk hvis $[\hat{A}, \hat{B}] \neq 0$?
- d) Vi betrakter en eksitert tilstand til et molekyl i punktgruppen C_{3v} med elektronkonfigurasjon $(1a_1)^2(1a_2)^2(2a_1)^2(1e)^1(2e)^1$. Bestem termsymbolene til tilstandene som kan oppstå fra denne elektronkonfigurasjonen.

Oppgave 2

I denne oppgaven betrakter vi et etyn-molekyl i likevektsgeometrien til den første eksiterte elektroniske tilstanden som vist under. Denne geometrien har C_{2h} -symmetri.



- I en molekylorbital-beregning har vi brukt en minimal basis som består av 1s, 2s og 2p på karbon og 1s på hydrogen. Del orbitalene inn i ekvivalente sett og bestem symmetrien til hvert sett.
- Fra en Hartree-Fock-beregning i Spartan med basis-settet 3-21G får vi følgende molekylorbitaler med orbitalenergiene som oppgitt:

Tabell 1: MO-energi

Symmetri	Orbital energi (a.u.)
a_g	-11.185
b_u	-11.182
a_g	-1.073
b_u	-0.762
a_g	-0.614
b_u	-0.423
a_u	-0.422
a_g	0.096
b_g	0.222

Bestem elektronkonfigurasjonen for grunntilstanden og tilstandene som oppstår fra den første elektroniske eksitasjonen. Oppgi termsymbolene for hver tilstand. Er overganger fra grunntilstanden til de to eksiterte tilstandene tillatt i overgangsdipol-approksimasjonen?

- Bestem elektronkonfigurasjon og termsymbol til den første ioniserte tilstanden.

Oppgave 3

- a) Finn symmetrien til vibrasjonskoordinatene for H_2O i punktgruppen C_{2v} . Plasser molekylet i xz -planet. Lag en skisse som viser hver av vibrasjonsmodene.
- b) Forklar kortfattet hvordan isotopsubstitusjon kan brukes til å bestemme strukturen til molekyl ved hjelp av mikrobølge-spektroskopi.

Oppgave 4

To funksjoner, ψ_1 og ψ_2 , oppfyller:

$$\hat{H}\psi_i = \psi_i E_i \quad (1)$$

hvor $i = 1, 2$. De er altså simultane løsninger av den samme stasjonære Schrödingerligningen. Vi antar at de to løsningene er normerte og ikke degenererte ($E_1 \neq E_2$). Fra disse to stasjonære løsningene kan vi lage en tidsavhengig lineærkombinasjon:

$$\Psi(t) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\psi_1 e^{-\frac{iE_1 t}{\hbar}} + \psi_2 e^{-\frac{iE_2 t}{\hbar}} \right) \quad (2)$$

- a) Vis at den tidsavhengige bølgefunksjonen, $\Psi(t)$, er normert for alle verdier av t .
- b) Beregn forventingsverdien til Hamilton-operatoren og diskuter om energien varierer eller er konstant i tiden.
- c) Vis at $\Psi(t)$ er en løsning til den tidsavhengige Schrödingerligningen.

Lykke til og god jul!