NTNU
Kunnskap for en bedre verden

Institutt for kjemi

Eksamensoppgave i
KJ1041 Kjemisk binding, spektroskopi og kinetikk

Faglig kontakt under eksamen: Ida-Marie Høyvik

Tlf: 99 77 23 63

Eksamensdato: 1. desember 2015

Eksamenstid (fra–til): 09:00-13:00

Hjelpemiddelkode/Tillatte hjelpemidler: Alle trykte og handskrevne hjelpemiddel. Alle kalkulatorer er tillatt, med de vanlige begrensinger som gjelder for hjelpemiddelkode A.

Annen informasjon:
Alle deloppgaver teller likt. En karaktertabell og en liste over to nyttige integraler er vedlagt

Målform/språk: bokmål

Antall sider: 4

Antall sider vedlegg: 0

Kontrollert av:

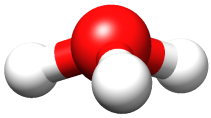
Dato Sign

Merk! Studenter finner sensur i Studentweb. Har du spørsmål om din sensur må du kontakte instituttet ditt. Eksamenskontoret vil ikke kunne svare på slike spørsmål.

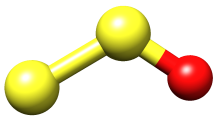
Oppgave 1

a) Bestem punktgruppene til molekylene

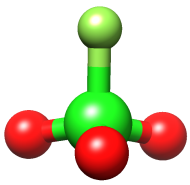
i) H_3O^+



ii) S_2O^-



iii) $ClFO_3$



b) Energiuttrykket (i enheter av bølgetallet) for en symmetrisk rotor er gitt ved

$$E(J,K) = BJ(J+1) + (A-B)K^2$$

der A og B er rotasjonelle konstanter ($A>B$), $J = 0, 1, 2, \cdots$ og $K = 0, \pm 1, \cdots, \pm J$. For $J = 2$, tegn energinivåene inn i et energinivå-diagram, og spesifiser degenerasjonen for hvert nivå.

c) Spinn-projeksjon operatoren for elektron 1, $\hat{s}_z(1)$, har følgende eigenfunksjoner og eigenverdier

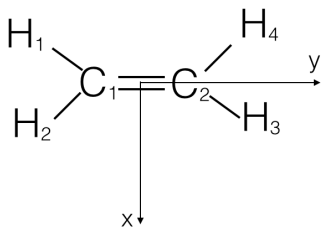
$$\hat{s}_z(1)\alpha(1) = \frac{1}{2}\hbar\alpha(1)$$
$$\hat{s}_z(1)\beta(1) = -\frac{1}{2}\hbar\beta(1)$$

og tilsvarende for elektron 2 med spin-projeksjon operator $\hat{s}_z(2)$. Kombinert spinn-projeksjon for elektron 1 og 2 er gitt ved $\hat{S}_z = \hat{s}_z(1) + \hat{s}_z(2)$. $F = \frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha(1)\beta(2) + \beta(1)\alpha(2))$ er en egenfunksjon til $\hat{S}_z$, finn tilhørende eigenverdi.

d) Vi antar at spinn-funksjonen i forrige oppgave, F, hører til heliumatomet. Hvilken av de følgende romlige bølgefunksjoner kan vi sette sammen med F og få en gyldig bølgefunksjon for heliumatomet?

$$\phi_a(1,2) = 1s(1)1s(2)$$
$$\phi_b(1,2) = \frac{1}{\sqrt{2}}(1s(1)2s(1) - 2s(1)1s(2))$$
$$\phi_c(1,2) = \frac{1}{\sqrt{2}}(1s(1)2s(1) + 2s(1)1s(2))$$

Oppgave 2 I denne oppgaven tar vi for oss eten, som tilhører punktgruppe D_{2h}.



Vi skal bruke en orbitalbasis bestående av 2s og 2p på karbonatomene og 1s på hydrogenatomene.

a) Del orbitalbasen inn i ekvivalente sett, og finn de irredusible representasjonene som de ekvivalente settene spenner.

Vi ser vekk fra 1s-elektronene til karbonatomene, og har følgende elektronkonfigurasjon for grunntilstanden til eten

$$(1a_g)^2(1b_{1u})^2(1b_{2u})^2(2a_g)^2(1b_{3g})^2(1b_{3u})^2$$

b) Gi termsymbolet for grunntilstanden.

c) LUMO for eten er gitt ved

$$\phi_{\text{LUMO}} = -0.8072p_z(C_1) + 0.8072p_z(C_2)$$

Bestem symmetrien til LUMO, og finn den romlige symmetrien til tilstanden vi får ved å eksitere et elektron fra HOMO til LUMO.

Oppgave 3 I denne oppgaven skal vi se på H_2 innenfor Born-Oppenheimer approksimasjonen.

a) Skriv opp leddene som inngår i den elektroniske Hamilton-operator for H_2, og forklar *kort* hva hvert ledd beskriver.

b) Gi antall translasjonelle, rotasjonelle og vibrasjonelle frihetsgrader for H_2, og kommenter hvilke av disse frihetsgradene den elektroniske energien vil være avhengig av. Anta rigid rotor tilnærming for rotasjon.

Vibrasjon av H_2 bindingen rundt likevektsavstand (R_e) kan studeres ved å tilnærme potensialet som

$$V(x) = \frac{1}{2}kx^2$$

der $x = R - R_e$ og R er avstanden mellom hydrogenatomene. Schrødingerligningen for vibrasjonsbevegelse er gitt ved

$$(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2}{dx^2} + V(x))\Psi_\nu(x) = E_\nu\Psi_\nu(x)$$

Den vibrasjonelle grunntilstanden er beskrevet av bølgefunksjonen $\Psi_0(x) = \exp(-\alpha x^2)$.

c) Normaliser bølgefunksjonen $\Psi_0(x)$.

d) Bestem α slik at $\Psi_0(x)$ er en løsning til Schrødingerligningen for vibrasjonsbevegelse gitt ovenfor.

e) Hva er forventingsverdien for den potensielle energien til den vibrasjonelle grunntilstanden?

Ymse nyttige saker (karaktertabell + to integral):

D_{2h} (mmm)	E	$C_2(z)$	$C_2(y)$	$C_2(x)$	i	$\sigma(xy)$	$\sigma(xz)$	$\sigma(yz)$		
A_g	1	1	1	1	1	1	1	1		x^2, y^2, z^2
B_{1g}	1	1	–1	–1	1	1	–1	–1	R_z	xy
B_{2g}	1	–1	1	–1	1	–1	1	–1	R_y	xz
B_{3g}	1	–1	–1	1	1	–1	–1	1	R_x	yz
A_u	1	1	1	1	–1	–1	–1	–1		
B_{1u}	1	1	–1	–1	–1	–1	1	1	z	
B_{2u}	1	–1	1	–1	–1	1	–1	1	y	
B_{3u}	1	–1	–1	1	–1	1	1	–1	x	

$$\int_{-\infty}^{\infty} \exp(-bx^2)dx = \sqrt{\frac{\pi}{b}}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} x^2 \exp(-bx^2)dx = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{b^3}}$$