



### Försättsblad Prov Original

Kurskod	Provkod	Tentamensdatum
K E 0 3 3 G	T 1 0 0	2 0 1 8 - 1 1 - 0 1
Kursnamn	Kemi GR (C), Molekylär struktur	
Provnamn	Tentamen	
Ort	Sundsvall	
Termin	H18	
Ämne	Kemi	

# MITTUNIVERSITETET

Avdelningen för naturvetenskap

Christina Dahlström (072-5818813)

## TENTAMEN

2018-11-01

Studiekurs:	Molekylär struktur, Kemi Gr(C), KE033G, 6hp
Moment	Teori
Skrivtid	5 timmar
Hjälpmedel	Miniräknare, <i>Matematisk formelsamling</i> , bifogad formelsamling
Max poäng	59
Observera	För godkänd tentamen krävs att samtliga lärandemål är uppfyllda samt minst 50% av poängen.

Lämna in tydliga och utförliga beräkningar och motiveringar så att tankegången kan följas och skriv din kod på varje blad som lämnas in. Tänk på att redovisa enheter och att använda korrekt antal värdesiffror.

Skriv endast en uppgift per blad och skriv endast på en sida av varje blad.

Betyget för tentan beräknas på följande sätt:

$59 > p \geq 54$  ger betyget A

$54 > p \geq 48$  ger betyget B

$48 > p \geq 42$  ger betyget C

$42 > p \geq 36$  ger betyget D

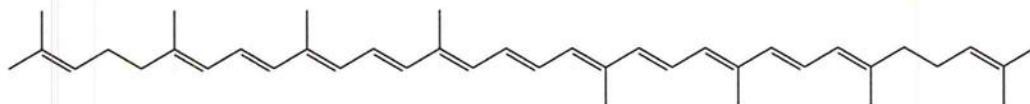
$36 > p \geq 30$  ger betyget E

### Uppgift 1 (max 11p)

- a.) Vad innebär Heisenbergs osäkerhetsprincip? (1p)
- b.) Beräkna energin för en partikel (elektron) i en två-dimensionell låda med sidan  $L_1=L_2=110$  nm för tillståndet då  $n_1=2$  och  $n_2=5$ . (2p)

Eftersom lådans två sidor har samma längd så kallas detta tillstånd för degenererat (*på engelska: degeneracy*). Vad betyder det? (1p)

- c.) Lykopen är en linjär molekyl. Vågfunktionen för en elektron i lykopen kan approximeras med partikel-i-lådan vågfunktioner. (tips: molekylens totala längd kan uppskattas genom att använda C-C bindningslängd är runt 140 pm.)



- i.) Beräkna vilken sannolikhet det är att hitta elektronen mellan  $x_1 = 0$  pm och  $x_2 = 500$  pm för kvanttalet 1. (2p)
- ii.) Beräkna vilken sannolikhet det är att hitta elektronen mellan  $x_1 = 0$  pm och  $x_2 = 500$  pm för kvanttalet 20. (2p)
- iii.) Beskriv kortfattat vad förändringen i sannolikheten mellan kvanttalet 1 och 20 betyder. (1p)
- iv.) Vad är den totala energin samt rörelsemängden för respektive kvanttal 1 och 20. (2p)

### Uppgift 2 (max 14p)

- a.) Vad innebär Hund's regel? (1p)
- b.) En vågfunktion definieras av tre olika kvanttal (bortse från spin). Vilka tre är det och vad innebär dessa kvanttal? (3p)
- c.) Beskriv utförligt i.) vad en atomorbital är och ii.) hur de olika kvanttalen relaterar till periodiska systemets uppbyggnad. (4p)
- d.) I valensbindningsteorin så beskrivs bland annat  $\sigma$ - och  $\pi$ -bindningar. Beskriv dessa bindningar. (2p)

- e.) Rita upp molekylorbitalens energinivådiagram för He<sub>2</sub> och N<sub>2</sub>. Räkna också ut bindningstalet för båda och resonera kring molekylens stabilitet. (4p)

### Uppgift 3 (max 5p)

- a.) Ge två exempel på olika symmetrielement och ange förslag på en molekyl som har just det symmetrielementet. Ange även korrekt benämning för symbolen för symmetrielementet hos dina föreslagna molekyler. (3p)
- b.) Vad kallas axeln med högst talighet? (1p)
- c.) Vad är ett inversionscentrum? (1p)

### Uppgift 4 (max 7p)

- a.) Ett materials elektriska ledningsförmåga beror tex av temperaturen. Beskriv hur en halvledares konduktivitet beror av temperaturen utifrån bandteorin. (3p)
- b.) Beskriv vad en supraledare och Cooperpar är. (2p)
- c.) En halvledare kan dopas för att höja konduktiviteten. Beskriv vad en n-dopad och p-dopad halvledare är? (2p)

### Uppgift 5 (max 6p)

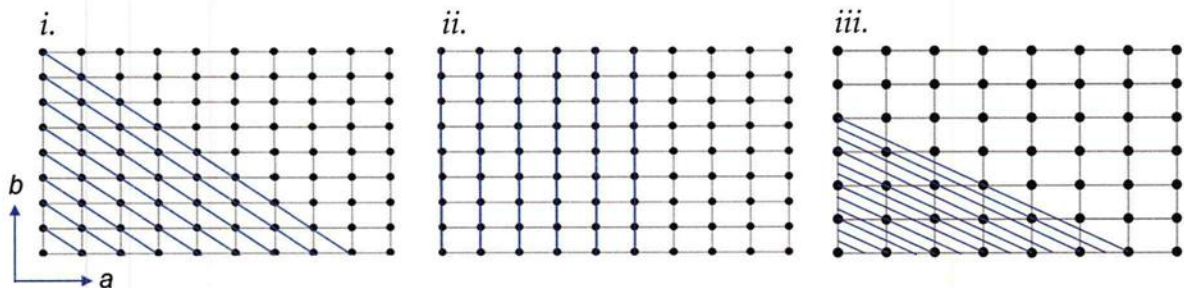
- a.) Molekylen <sup>12</sup>C<sup>35</sup>Cl<sub>4</sub> är en sfärisk rotor. Beräkna bindningslängden för C-Cl bindningen. Använd  $\tilde{B} = 5,77 \text{ m}^{-1}$  och massan för <sup>35</sup>Cl är 34,97m<sub>u</sub>. (2p)
- b.) Vilka urvalsregler gäller för rotationsspektroskopi. (1p)
- c.) Avståndet mellan topparna i ett rotationsspektrum för <sup>12</sup>C<sup>16</sup>O är 3,862 cm<sup>-1</sup>. Beräkna tröghetsmomentet för molekylen. (2p)
- d.) Vissa vibrationer är IR-inaktiva, vad beror det på? (1p)

### Uppgift 6 (max 9p)

- a.) Beskriv utförligt vad fluorescence och fosforescens är utifrån hur övergångar sker mellan olika tillstånd. (3p)
- b.) Det finns ett antal effekter som bidrar till bredden av spektroskopiska linjer. Beskriv två av dessa bidrag och om man det finns något sätt att minimera dessa. (2p)
- c.) Beskriv principen för hur en laser fungerar utifrån stimulerad emission, övergångar mellan tillstånd och population. (3p)
- d.) Nämn tre viktiga egenskaper hos laserstrålningen? (1p)

### Uppgift 7 (max 7p)

- a.) Ange Millerindex för följande 3 olika gitterplan *i*, *ii* och *iii*. (3p)



- b.) Beräkna separationen mellan planen  $\{112\}$  och  $\{123\}$  i en kristall där den kubiska enhetscellen har sidan 687 pm. (2p)
- c.) Beräkna röntgenstrålningens våglängd där vinkeln för Braggs reflektion från ett set av kristallplan separerade med 107.3 pm är  $22.3^\circ$ . (2p)

## Formelsamling Molekylär struktur, KE0031G

### Fundamental constants

Constant	Symbol	Value	unit
Elementary charge	$e$	$1.6022 \cdot 10^{-19}$	C
Planck's constant	$h$	$6.6261 \cdot 10^{-34}$	J s
	$\hbar = h/2\pi$	$1.0546 \cdot 10^{-34}$	J s
Boltzmann's constant	$k$	$1.3806 \cdot 10^{-23}$	J K <sup>-1</sup>
Avogadro's constant	$N_A$	$6.0221 \cdot 10^{23}$	mol <sup>-1</sup>
Gas constant	$R = N_A k$	8.3145	J K <sup>-1</sup> mol <sup>-1</sup>
Faraday's constant	$F = N_A e$	$9.6485 \cdot 10^4$	C mol <sup>-1</sup>
Speed of light	$c$	$2.9979 \cdot 10^8$	m s <sup>-1</sup>
Mass electron	$m_e$	$9.109 \cdot 10^{-31}$	kg
Mass atomic mass constant	$m_u$	$1.661 \cdot 10^{-27}$	kg

### Selected units

1 N	1 kg m s <sup>-2</sup>
1 Pa	1 kg m <sup>-1</sup> s <sup>-2</sup>
1 V	1 J C <sup>-1</sup>
1 eV	$1.6022 \cdot 10^{-19}$ J

1 J	1 kg m <sup>2</sup> s <sup>-2</sup>
1 W	1 J s <sup>-1</sup>
1 P	$10^{-1}$ kg m <sup>-1</sup> s <sup>-1</sup>

### Conversion factor

1 atm	$1.0133 \cdot 10^5$ Pa	760 Torr
$\theta/^{\circ}\text{C} = \text{T/K} - 273,15$		

### Mathematical relation

$\pi$	3.141592...
-------	-------------

$$\tilde{\nu} = \frac{\nu}{c} = \frac{1}{\lambda}$$

Property	Equation	Comment
Planck distribution	$\rho(\lambda, T) = 8\pi hc / \{\lambda^5 (e^{hc/\lambda kT} - 1)\}$	
Heat capacity	$C_{V,m}(T) = 3Rf(T)$	$f = f_E$ or $f_D$
Einstein formula	$f_E(T)$ $= (\theta_E/T)^2 \{e^{\theta_E/2T} / (e^{\theta_E/T} - 1)\}^2$	Einstein temperature: $\theta_E = h\nu/k$
Debye formula	$f_D(T)$ $= 3(T/\theta_D)^3 \int_0^{\theta_D/T} x^4 e^x / (e^x - 1)^2 dx$	Debye temperature: $\theta_D = h\nu_D/k$
Bohr frequency condition	$\Delta E = h\nu$	Conservation of energy
Photoelectric effect	$E_k = \frac{1}{2}m_e v^2 = h\nu - \Phi$	$\Phi$ is the work function
de Broglie relation	$\lambda = h/p$	$\lambda$ is the wavelength of a particle of linear momentum $p$
Linear momentum	$p = mv$	

Property	Equation	Comment
The time-independent Schrödinger equation	$-(\hbar^2/2m)(d^2\psi/dx^2) + V(x)\psi = E\psi$ , or $\hat{H}\psi = E\psi$	One-dimensional system
Normalization integral	$\int \psi^* \psi d\tau = 1$	Integration over all space
Probability of locating a particle	$P = \int_{x_1}^{x_2}  \psi(x) ^2 dx$	One-dimensional region

Property	Equation	Comment
Hermiticity	$\int \psi_i^* \hat{\Omega} \psi_j d\tau$ $= \left\{ \int \psi_j^* \hat{\Omega} \psi_i d\tau \right\}^*$	Real eigenvalues, orthogonal eigenfunctions
Orthogonality	$\int \psi_i^* \psi_j d\tau = 0$ for $i \neq j$	Integration over all space
Expectation value	$\langle \Omega \rangle = \int \psi^* \hat{\Omega} \psi d\tau$	Definition
Commutator of two operators	$[\hat{\Omega}_1, \hat{\Omega}_2] = \hat{\Omega}_1 \hat{\Omega}_2 - \hat{\Omega}_2 \hat{\Omega}_1$ Special case: $[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar$	The observables are complementary if $[\hat{\Omega}_1, \hat{\Omega}_2] \neq 0$
Heisenberg uncertainty principle	$\Delta\Omega_1 \Delta\Omega_2 \geq \frac{1}{2}  \langle [\hat{\Omega}_1, \hat{\Omega}_2] \rangle $ Special case: $\Delta p \Delta q \geq \frac{1}{2} \hbar$	































