

Eksamen i KJ133 våren 1998

Løsningsforslag for kvantemekanikkoppgaven

T. Helgaker

Henvisningene er til Atkins' *Physical Chemistry*, 6th edition

- a) Kravet om heltallig m følger fra den sykliske grensebetingelsen

$$\psi_{m_l}(\phi + 2\pi) = \psi_{m_l}(\phi) \Rightarrow e^{i2\pi m_l} = 1 \Rightarrow m_l \text{ heltall}$$

som igjen følger fra kravet at bølgefunksjonen må være entydig. Se avsnitt 12.6 i læreboka. Sannsynlighetstettheten for partikkelen er gitt ved

$$|\psi_{m_l}|^2 = \psi_{m_l}^* \psi_{m_l} = \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-im_l\phi}\right) \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im_l\phi}\right) = \frac{1}{2\pi}$$

Dette betyr at sannsynligheten for å finne partikkelen er den samme overalt på ringen. Bemerk: Integrasjon over hele sirkelen gir normeringen av tilstanden, ikke sannsynlighetstettheten i hvert punkt!

- b) Ved innsetting i Schrödinger-ligningen og derivasjon følger direkte:

$$H\psi_{m_l} = -\frac{\hbar^2}{8\pi^2I} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{d^2}{d\phi^2} e^{im_l\phi} = -\frac{\hbar^2}{8\pi^2I} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} (im_l)^2 e^{im_l\phi} = \frac{m_l^2 \hbar^2}{8\pi^2I} \psi_{m_l}$$

som gir energien

$$E_{m_l} = \frac{m_l^2 \hbar^2}{8\pi^2I}$$

Partikkelen har ingen potensiell energi, kun kinetisk. Dette gjenspeiles i Hamilton-operatoren, som kun inneholder en operator svarende til kinetisk energi.

- c) To eller flere bølgefunksjoner sies å være degenererte hvis de har samme energi (se side 321 i læreboka). For en partikkel på ring svarer grunntilstanden til $m_l = 0$ og de eksiterte tilstandene til $|m_l| > 0$. Det fins kun en tilstand med null energi og grunntilstanden er derfor ikke degenerert. Alle eksiterte tilstander er dobbeldegenererte da tilstandene Ψ_{m_l} og Ψ_{-m_l} har samme energi.
- d) Pauli-prinsippet er gitt på side 363 i læreboka: Når vi bytter om koordinatene til to identiske fermioner, vil bølgefunksjonen skifte fortegn; når vi bytter om koordinatene til to identiske bosoner, vil bølgefunksjonen ikke skifte fortegn. Fra Pauli-prinsippet følger Paulis eksklusjonsprinsipp, som sier at vi kan aldri ha mer enn to elektroner i samme orbital. To orbitaler i samme orbital må ha motsatt spinn.
- e) I grunntilstanden vil de seks elektronene okkupere de tre laveste orbitalene for partikkel på ring, dvs. vi har elektronkonfigurasjonen $\Psi_0 \Psi_{-1} \Psi_1$. I første eksiterte tilstand er ett elektron eksitert fra høyeste okkuperte til laveste uokkuperte nivå: $\Psi_0 \Psi_{-1} \Psi_1 \Psi_{-2}$. Energiforskjellen er gitt ved

$$\Delta E = E_{-2} - E_1 = \frac{4h^2}{8\pi^2 I} - \frac{1h^2}{8\pi^2 I} = \frac{3h^2}{8\pi^2 m r^2}$$

Ved innsetting, finner vi

$$\Delta E = \frac{3h^2}{8\pi^2 m r^2} = 9,48 \times 10^{-19} \text{ J}$$

for energiforskjellen mellom grunntilstanden og laveste eksiterte tilstand.

- f) Bohrs frekvensbetingelse er gitt på side 345:

$$\Delta E = h\nu$$

Frekvens og bølgelengde er relatert som $c = \nu\lambda$, og dette gir oss følgende uttrykk for bølgelengden:

$$\lambda = \frac{hc}{\Delta E} = 210 \text{ nm}$$

Denne verdien avviker med bare 2.4% fra den eksperimentelle verdien på 205 nm. Denne gode overensstemmelsen må imidlertid betraktes som en tilfeldighet.

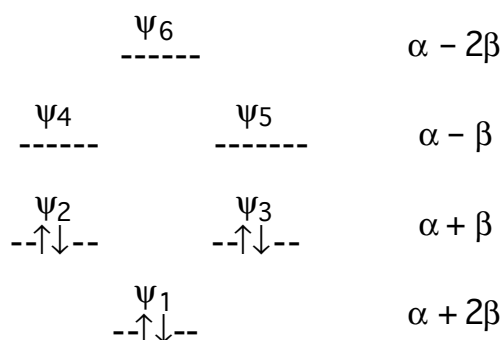
- g) Variasjonsprinsippet er behandlet på side 406 i læreboka: Hvis en vilkårlig bølgefunksjon benyttes til å beregne (grunntilstands)energien (som en forventningsverdi), så er den beregnede energien aldri lavere enn den eksakte energien.

Kommentar: I praksis tolkes variasjonsprinsippet slik at den beste tilnærmede bølgefunksjon (innen en bestemt modell) fås ved å minimere forventningsverdien av energien med hensyn på de parameter som inngår i bølgefunksjonen. Denne fremgangsmåten kalles variasjonsmetoden.

- h) I Hückel-teori gjøres følgende forenklinger (Hückel-approksimasjoner) i sekulardeterminanten (se avsnitt 14.9 i læreboka):

1. Alle overlappintegraler settes lik null.
2. Alle resonansintegraler mellom naboatomer settes lik β .
3. Alle andre resonansintegraler settes lik null.

- i) Se figur 14.44 i læreboka. I læreboka benyttes punktgruppesymboler til å beskrive orbitalene. Dette er ikke nødvendig og man kan eksempelvis gi følgende figur:



I tillegg skal besvarelsene inneholde enkle skisser av orbitalene, basert på ekspansjonskoeffisientene i tabellen. Det er viktig at nodene er tydelig merket av som i figur 14.44.

- j) Bindende og antibindende orbitaler er behandlet på side 396 – 398. Ifølge læreboka er en bindende orbital en orbital som bidrar til å senke energien i forhold til de separerte atomene. Omvendt vil en antibindende orbital heve energien i forhold til de separerte atomene. I benzen er Ψ_1 , Ψ_2 og Ψ_3 bindende orbitaler og de tre andre antibindende.
- k) Med HOMO menes den høyeste okkuperte molekylorbital (Highest Occupied Molecular Orbital) i systemet; med LUMO menes omvendt den lavest uokkuperte molekylorbital (Lowest Unfilled Molecular Orbital). På grunn av degenerasjon har benzenmolekylet to HOMOer (Ψ_2 og Ψ_3) og likeledes to LUMOer (Ψ_4 og Ψ_5).

I Hückel-teori er den laveste eksitasjonsenergien gitt ved HOMO–LUMO-separasjonen, som i benzen er 2β . Vi finner da:

$$\Delta E = -2\beta \Rightarrow \beta = -\frac{1}{2}\Delta E = -4.7 \times 10^{-19} \text{ J}$$

- l) Delokaliseringsenergien er definert som forskjellen mellom den totale π -elektronenergien av molekylet og π -elektronenergien of det tilsvarende antall etenmolekyler (se side 415 i læreboka).

Vi bestemmer først π -elektronenergien ved å legge sammen energiene for alle π -elektronene i benzen.

$$E_{\pi} = 6\alpha + 8\beta$$

Deretter bestemmes delokaliseringsenergien ε ved å trekke π -elektronenergien for det tilsvarende antall etenmolekyler. I praksis gjøres dette ved å trekke fra $\alpha + \beta$ for hvert karbonatom i benzen:

$$\varepsilon = E_{\pi} - 6(\alpha + \beta) = 2\beta$$

Fasit for kvantemekanikkdelen av KJ133 høsten 1998

Oppgave II

- a) *Hva menes med begrepene grunntilstand og eksitert tilstand? Hva er et degenerert energinivå?*

Grunntilstanden er den tilstanden av et kvantemekanisk system som har den laveste energi. Alle andre tilstander kalles eksiterte. Hvis to eller flere tilstander har samme energi, kalles energinivået degenerert.

- b) *Tegn et orbitalenerginivådiagram for hydrogenatomet. Angi angulærmomentet og degenerasjonen av energinivåene. Hva mener vi med begrepene skall og underskall i hydrogenatomet?*

Orbitalenerginivådiagrammet for hydrogen er gjengitt i figur 13.8 på side 353 i læreboka. I hydrogenatomet sies alle orbital som har samme kvantetall n (dvs. samme energi) å tilhøre samme skall. Et underskall består av de orbitaler i et skall som har samme kvantetall l (dvs., samme angulærmoment).

- c) *Tilsvarende orbitaler benyttes ved beskrivelse av flerelektronatomer, men degenerasjonen er da lavere. Forklar.*

I *hydrogenatomet* tiltrekkes elektronet til kjernen av et Coulomb-potensial og energien er da kun bestemt av n . I et *flerelektronatom* vil elektronene skjerme for kjernens ladning slik at hvert elektron føler en redusert, effektiv kjerneladning. Denne skjermingen er ulik for orbitaler i forskjellige underskall, noe som medfører at orbitaler i samme skall ikke lenger vil være degenererte. Eksempelvis vil s-elektronene ha lavere energi enn p-orbitalene i samme skall fordi de har en større sannsynlighet enn p-elektronene for å være tett på kjernen (større penetrering), hvor de føler den fulle kjerneladningen, se side 364 i læreboka.

- d) Oppgi elektronkonfigurasjonene til C og N. Hva er Hunds regel? Benytt denne til å tegne orbitalenerginivådiagrammer for C og N.

Elektronkonfigurasjonen er $[\text{He}]2s^22p^2$ for C og $[\text{He}]2s^22p^3$ for N. Hunds regel sier elektronene vil ordne seg slik i grunntilstanden at det får det største antall uparrede elektroner, se side 366 i læreboka. (Mer avansert uttrykker vi det samme ved å si at i en elektronkonfigurasjon vil termen med høyst multiplisitet ha lavest energi.) Ifølge Hunds regel vil C ha to uparrede p-elektroner $[\text{He}]2s^22p_x^12p_y^1$ i grunntilstanden og N vil ha tre uparrede elektroner $[\text{He}]2s^22p_x^12p_y^1 p_z^1$.

- e) Energien for et enelektronatom er gitt ved

$$E_n = -\frac{Z^2 m_e e^4}{32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2}$$

Beregn den laveste eksitasjonsenergien og ionisasjonsenergien for grunntilstanden av hydrogenatomet. Benytt $m_e = 9.109 \cdot 10^{-31}$ kg for elektronets masse, $e = -1.602 \cdot 10^{-19}$ C for elektronets ladning, og $\epsilon_0 = 8.85419 \cdot 10^{-12}$ J⁻¹ C² m⁻¹ for tomromspermittiviteten.

Den laveste eksitasjonsenergien og ionisasjonsenergien er gitt ved

$$E_2 - E_1 = -\frac{Z^2 m_e e^4}{32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2} \left(\frac{1}{4} - \frac{1}{1} \right) = 1.634 \text{ eV}$$

$$E_\infty - E_1 = \frac{Z^2 m_e e^4}{32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2} = 2.179 \text{ eV}$$

hvor tallene fremkommer ved innsetning av konstantene.

- f) Hva er Bohrs frekvensbetingelse? Balmer-serien svarer til eksitasjoner mellom den laveste eksiterte tilstand ($n=2$) og høyereliggende eksiterte tilstander i hydrogenatomet. Beregn den laveste frekvensen i Balmer-serien (i Hz) og den tilsvarende bølgelengden (i nm).

Bohrs frekvensbetingelse (side 345) sier at når et atoms energi endres med ΔE , så vil denne energien sendes ut som et foton med frekvens ν relatert til energien som

$$\Delta E = h\nu$$

der h er Plancks konstant. Dette gir følgende frekvens

$$\nu = \frac{E_3 - E_2}{h} = -\left(\frac{1}{9} - \frac{1}{4}\right) \frac{2.179 \text{ aJ}}{h} = 4.56 \cdot 10^{14} \text{ Hz}$$

Den tilsvarende bølgelengden λ kan bestemmes fra relasjonen

$$\nu\lambda = c$$

hvor c er lysets hastighet i vakuum. Dette gir bølgelengden

$$\lambda = \frac{c}{4.56 \cdot 10^{14} \text{ Hz}} = 656 \text{ nm}$$

som ligger i det synlige området (dvs. i området 400 – 700 nm).

g) *1s-orbitalen i et enelektronatom kan skrives på formen*

$$\Psi = \sqrt{\frac{Z^3}{\pi a_0^3}} e^{-\frac{Z}{a_0} r}$$

hvor a_0 er Bohr-radien

$$a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{m_e e^2}$$

Skisser den radielle delen av bølgefunksjonen. I hvilket punkt i rommet er det størst sannsynlighet for å finne elektronet?

Den radielle delen av bølgefunksjonen er skissert i figur 13.5 på side 349. Det punkt i rommet hvor det er størst sannsynlighet for å finne elektronet er på kjernen (dvs. det punkt der den radielle bølgefunksjonen har størst verdi).

h) Den radielle fordelingsfunksjonen $P(r)$ er gitt ved

$$P(r) dr = 4\pi r^2 \psi^2 dr$$

Hva beskriver denne funksjonen? Vis at $P(r)$ har et maksimum ved avstanden

$$r^* = \frac{a_0}{Z}$$

og lag en skisse av $P(r)$.

Den radielle fordelingsfunksjonen $P(r)$ gir sannsynligheten for å finne elektronet i avstand r fra kjernen. Bemerk: $P(r)$ fås ved å multiplisere den kvadrerte bølgefunksjonen med $4\pi r^2$, som veier hver avstand r med det antall punkter som fins i denne avstanden fra kjernen. Se side 356 i læreboka og spesielt figur 13.15. For 1s-funksjonen er den radielle fordelingsfunksjonen gitt ved:

$$P(r) = 4\pi r^2 \psi^2 = \frac{4Z^3}{a_0^3} r^2 e^{-\frac{2Z}{a_0} r}$$

Vi deriverer nå denne funksjonen og setter resultatet lik null:

$$\frac{4Z^3}{a_0^3} \frac{d}{dr} \left(r^2 e^{-\frac{2Z}{a_0} r} \right) = 0$$

Vi får da følgende ligning

$$2r \left(1 - \frac{Z}{a_0} r \right) e^{-\frac{2Z}{a_0} r} = 0$$

som har løsningen a_0/Z (i tillegg til løsningen $r = 0$)

Våren 2000 Oppgave II

(Delspørsmål a) har vekt 1, mens b) og c) har vekt 2)

a) Svar kort på følgende spørsmål:

i) Hva er Borns interpretasjon av bølgefunksjonen?

Borns interpretasjon av bølgefunksjonen er at sannsynligheten for å finne en partikkel mellom x og $x + dx$ er proporsjonal med $\psi^*(x)\psi(x)dx$ (evt. at sannsynligheten for å finne en partikkel i punktet x er proporsjonal med $\psi^*(x)\psi(x)$). Med andre ord betraktes kvadratet av bølgefunksjonen som en sannsynlighetstetthet.

ii) Hva vil det si at en bølgefunksjon er normert?

At en bølgefunksjon er normert vil si at $\psi^*(x)\psi(x)$ integrert over hele rommet blir lik 1:

$$\int \psi^* \psi d\tau = 1$$

Innebærer at sannsynligheten ikke bare blir proporsjonal med, men lik $\psi^*(x)\psi(x)dx$.

iii) Forklar hva som menes med en forventningsverdi.

Forventningsverdien til en operator svarer til gjennomsnittet av et stort (uendelig) antall målinger av den korresponderende fysiske størrelsen. Matematisk er forventningsverdien gitt ved (forutsetter normert bølgefunksjon):

$$\Omega = \int \psi^* \hat{\Omega} \psi d\tau$$

b) Hamilton-operatoren for en partikkel i boks med lengde L er gitt ved

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x); \quad V(x) = \begin{cases} \infty & \text{for } x < 0 \\ 0 & \text{for } 0 \leq x \leq L \\ \infty & \text{for } x > L \end{cases}$$

Bølgefunksjonen for systemet kan skrives

$$\psi(x) = \begin{cases} 0 & \text{for } x < 0 \\ \frac{2}{L} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) & \text{for } 0 \leq x \leq L \\ 0 & \text{for } x > L \end{cases}$$

Vis at energien til en slik partikkel er gitt ved uttrykket

$$E_n = \frac{n^2 \hbar^2}{8mL^2}$$

Hvilke verdier kan n ha? Skisser bølgefunksjonene for grunntilstanden og første eksiterte tilstand

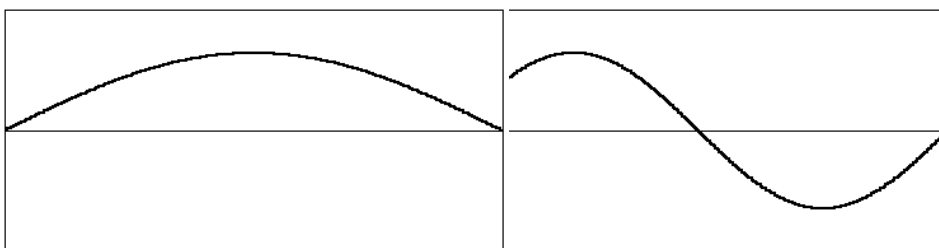
Siden bølgefunksjonen er null utenfor boksen, er det tilstrekkelig å betrakte området fra $x = 0$ til $x = L$. Vi lar Hamilton-operatoren virke på bølgefunksjonen:

$$\hat{H}\psi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \left[\frac{2}{L} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \right] = -\frac{2}{L} \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{n\pi}{L}\right) \frac{d}{dx} \cos\left(\frac{n\pi x}{L}\right) =$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{n\pi}{L}\right)^2 \frac{2}{L} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) = \frac{n^2 \hbar^2}{8mL^2} \psi(x) = E\psi(x)$$

Følgelig er $E_n = n^2 \hbar^2 / 8mL^2$. n må være heltallig for at randbetingelsene skal være oppfylt ($\sin(0)=0$ og $\sin(n\pi)=0$). Løsningene $-n$ og n er identiske, mens $n = 0$ ikke gir noen partikkel. Følgelig er $n = 1, 2, 3, \dots$ [Tilstrekkelig å forklare de tillatte verdiene til n med ord.]

Skisse av grunntilstanden og første eksiterte tilstand:



Grunntilstand ($n = 1$)

Første eksiterte tilstand ($n = 2$)

- c) Butadien har strukturen $\text{CH}_2=\text{CH}-\text{CH}=\text{CH}_2$. Vi antar at de fire π -elektronene kan bevege seg fritt langs hele molekylet og at deres orbitaler er tilnærmet lik bølgefunksjonene for en partikkel i en-dimensjonal boks med lengde $L = 7,00 \cdot 10^{-10}$ m (basert på bindingslengdene i molekylet). Elektronets masse er $m = 9,11 \cdot 10^{-31}$ kg. Okkupasjon av energinivåene følger Paulis eksklusjonsprinsipp.

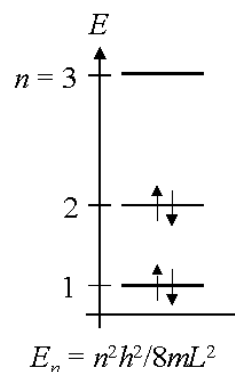
Skisser energinivådiagrammet for dette systemet og tegn inn elektronokkupasjonen. Beregn laveste eksitasjonsenergi for butadien (differansen mellom HOMO og LUMO). Bestem dessuten frekvensen og bølgelengden for den strålingen som sendes ut når molekylet faller tilbake til grunntilstanden.

Benytter energiuttrykket fra forrige oppgave som beskriver en generell partikkel i boks. Energinivådiagrammet er vist til venstre, og det er altså kun de to nederste energinivåene som er okkupert.

Laveste eksitasjonsenergi blir:

$$\Delta E = E_3 - E_2 = (3^2 - 2^2) \left(\frac{\hbar^2}{8mL^2} \right) =$$

$$5 \cdot \left(\frac{(6.626 \cdot 10^{-34} \text{ Js})^2}{8 \cdot 9.11 \cdot 10^{-31} \text{ kg} \cdot (7.00 \cdot 10^{-10} \text{ m})^2} \right) = 6.15 \cdot 10^{-19} \text{ J}$$



Frekvensen og bølgelengde for lyset som sendes ut blir hhv.:

$$\nu = \frac{\Delta E}{h} = \frac{6.15 \cdot 10^{-19} \text{ J}}{6.626 \cdot 10^{-34} \text{ Js}} = \underline{9.28 \cdot 10^{14} \text{ s}^{-1}} \text{ og}$$
$$\lambda = \frac{c}{\nu} = \frac{2.998 \cdot 10^8 \text{ ms}^{-1}}{9.28 \cdot 10^{14} \text{ s}^{-1}} = \underline{3.23 \cdot 10^{-7} \text{ m} = 323 \text{ nm}}$$

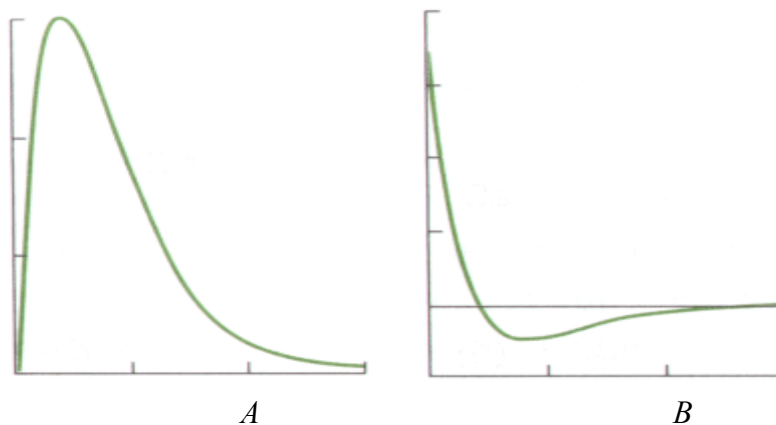
Våren 2000 Oppgave III

(Delspørsmålene a) og d) har vekt 1, mens b), c) og e) har vekt 2)

- a) Hva menes med at et energinivå er degenerert? Illustrer degenerasjon med et konkret eksempel.

At et energinivå er degenerert vil si at ulike tilstander (ulike sett kvantetall) har nøyaktig samme energi. Antall tilstander med samme energi kalles degenerasjonsgraden. En rekke slike systemer inngår i pensum (referanser Atkins 6th ed.): Partikkel i to-dimensjonal boks (s. 321), partikkel på ring (s. 330), partikkel på kuleskall (s. 335), hydrogenatomet (s. 353) m.fl. [Beskrivelse av ett slikt eksempel er tilstrekkelig.]

- b) Bølgefunksjonene for hydrogenatomets tilstander kan skrives på den separerte formen $\psi(r, \theta, \phi) = R(r) Y(\theta, \phi)$, dvs. som et produkt av en radiell og en angulær del.



Hvilken av de to kurvene over viser den radielle delen til en 2s-orbital og hvilken hører til en 2p-orbital? Svaret skal begrunnes. Hva er en node, og hvor mange radielle noder har hver av disse radielle funksjonene? Hvor mange angulære noder har henholdsvis s- og p-orbitaler?

Den radielle delen av 2s-orbitalen er gitt i kurve B, mens kurve A viser tilsvarende for 2p-orbitalen. Det er kun s-orbitaler som har sannsynlighet på kjernen ($r = 0$). En node er et område i rommet (punkt, eller flate) der bølgefunksjonen skifter fortegn. 2s har én radielle node, mens 2p ikke har noen (man teller normalt ikke med eventuelle noder ved $r = 0$ og $r = \infty$). Videre har s-orbitaler ingen angulære noder (kulesymmetriske), mens p-orbitaler har én angulær node (nodeplan gjennom kjernen)

- c) Den angulære delen av orbitalene til hydrogenatomet, Y , er de såkalte kuleharmoniske funksjonene. For 2s-orbitalen til hydrogen er den angulære delen gitt ved:

$$Y_{2s} = \sqrt{\frac{1}{4\pi}}$$

Videre har de tre ulike 2p-orbitalene følgende angulære deler:

$$Y_{2p_1} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos\theta$$

$$Y_{2p_2} = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin\theta e^{i\phi}$$

$$Y_{2p_3} = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin\theta e^{-i\phi}$$

Alle disse fire funksjonene er egenfunksjoner av operatoren for totalt angulærmoment, såvel som operatoren for angulærmoment rundt z-aksen:

$$\hat{J}_z = -i\hbar \frac{d}{d\phi}.$$

For denne operatoren gjelder egenverdiligningen:

$$\hat{J}_z Y_{l,m_l}(\theta, \phi) = m_l \hbar Y_{l,m_l}(\theta, \phi)$$

Beregn størrelsen på angulærmomentet rundt z-aksen for alle de fire kuleharmoniske funksjonene over, og angi dessuten verdien av kvantetallet m_l for disse egenfunksjonene. Oppgi hvilken verdi kvantetallet l har for henholdsvis 2s- og 2p-orbitalene, og forklar meget kort hva slags rotasjoner de fire tilstandene svarer til (basert på kvantetallene l og m_l).

For å bestemme angulærmomentene rundt z-aksen, lar vi operatoren \hat{J}_z virke på de fire kuleharmoniske funksjonene. De funksjonene som ikke avhenger av koordinaten ϕ gir opplagt null angulærmoment:

$$\hat{J}_z Y_{2s} = 0; \hat{J}_z Y_{2p_1} = 0$$

De to andre kuleharmoniske gir:

$$\hat{J}_z Y_{2p_2} = -i\hbar \frac{d}{d\phi} \left(-\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin\theta e^{i\phi} \right) = -i\hbar \cdot i \cdot \left(-\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin\theta e^{i\phi} \right) = \hbar Y_{2p_2}$$

$$\hat{J}_z Y_{2p_3} = -i\hbar \frac{d}{d\phi} \left(\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin\theta e^{-i\phi} \right) = -i\hbar \cdot -i \cdot \left(\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin\theta e^{-i\phi} \right) = -\hbar Y_{2p_3}$$

Angulærmomentet rundt z-aksen blir således henholdsvis \hbar og $-\hbar$ for disse to funksjonene. Samholder vi dette med egenverdiuttrykket, er det klart at for Y_{2s} og Y_{2p_1} så er $m_l = 0$, for Y_{2p_2} er $m_l = 1$, mens for Y_{2p_3} er $m_l = -1$.

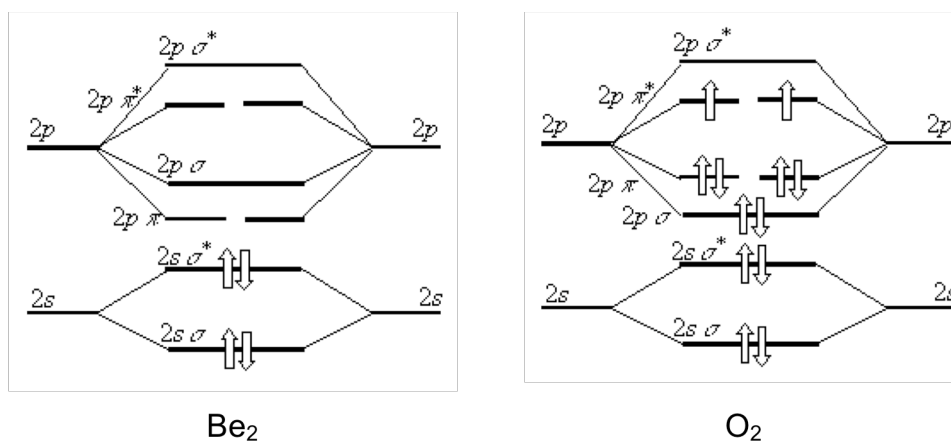
Kvantetallet l er relatert til det totale angulærmomentet. For 2s-orbitalen er $l = 0$ (generelt for alle s-orbitaler), mens for 2p er $l = 1$ (også generelt). En 2s-orbital har således ikke noe angulærmoment (ingen rotasjon), mens 2p-orbitalene har et visst angulærmoment. Dette kan være orientert på tre ulike måter, representert ved kvantetallet m_l som gir z-komponenten av det totale angulærmomentet.

d) Forklar kort hvorfor energirekkefølgen til underskallene i fler-elektronatomer alltid er gitt ved $s < p < d \dots$

De sentrale begrepene er skjerming, penetrasjon og effektiv kjerneladning, gjerne med henvisning til figurene i oppgave b). Se lærebok s. 364.

- e) Tegn energinivådiagram for de to molekylene Be_2 og O_2 og vis med piler for elektronene hvilke nivåer som er okkupert. Det er tilstrekkelig å tegne valensorbitalene. Bestem bindingsorden og vurder om molekylene er stabile. Har noen av dem uparrede elektroner? Forklar i tilfelle hvorfor.

Hint: Beryllium er atom nummer fire og oksygen atom nummer åtte i periodesystemet.



Energinivådiagrammene for valensorbitalene er vist over. Beregner vi bindingsorden for de to molekylene finner vi $b(\text{Be}_2) = \frac{1}{2}(2 - 2) = 0$ og $b(\text{O}_2) = \frac{1}{2}(8 - 4) = 2$. Vi må derfor anta at berylliummolekylet ikke er stabilt, mens oksygenmolekylet er stabilt (dobbelbinding). Ser videre at oksygenmolekylet har to uparrede elektroner. Dette skyldes de to degenererte $2p\pi^*$ -molekylorbitalene som skal okkuperes i henhold til Hunds regel (størst antall enkeltokkuperte degenererte orbital er gir lavest energi).

Løsningsforslag våren 2001

Oppgave 1

Svar kort på følgende spørsmål:

a) *Hva mener vi med at et system er kvantisert?*

Med kvantisering av et system mener vi at kun visse energinivåer er tillatt. Kommentar: Som forklart på side 299 i læreboka, skyldes kvantisering at bølgefunksjonen kun er fysisk akseptabel (i henhold til Borns interpretasjon) for visse energi-nivåer.

b) *Hva menes med elektronspinn? Hvor mange spinntilstander har et elektron?*

Spinn er et angulærmoment som skyldes en indre frihetsgrad av elektronet, i motsetning til orbital-angulærmomentet, som skyldes dets bevegelse i rommet, see 12.8 i læreboka. Forenklet kan vi tenke oss at elektronspinn skyldes elektronets rotasjon om egen akse. Elektronet har to spinntilstander, begge med totalspinnkvantetall $s = 1/2$. For den ene tilstanden er projeksjonen langs z-aksen $m_s = 1/2$ (spinn opp eller α -spinn), for den andre er projeksjonen $m_s = -1/2$ (spinn ned eller β -spinn).

c) *Hva er forskjellen på fermioner og bosoner? Gi eksempler på slik partikler.*

Fermioner er partikler med halvtallig spinn; bosoner har heltallig spinn. Elektron er fermioner (spinn $1/2$), fotoner er bosoner (spinn 1).

d) *Hva menes med degenerasjon av energinivåer?*

Et energinivå sies å være degenerert hvis flere tilstander har samme energi.

e) *Hva er degenerasjonen av energinivåene i hydrogenatomet?*

Degenerasjonen av hydrogenatomets energinivåer er n^2 , hvor n er hovedkvantetallet. Se side 353 i læreboka.

f) *Forklar begrepene skjerming og penetrering. Hvilken betydning har disse for degenerasjonen av orbitaler i flerelektronatomer?*

I et flerelektronatom vil et elektron tiltrekkes av kjernen og frastøtes fra de andre elektronene. For ett gitt elektron i dette atomet kan den totale veksevirkningen beskrives ved å neglisjere de andre elektronene samtidig som man benytter en *effektiv kjerneladning*

$$Z_{\text{eff}} = Z - \sigma$$

hvor Z er den sanne kjerneladningen og σ er den positive *skjermingskonstanten*—se side 364 i læreboka.

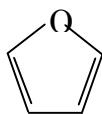
Skjermingskonstanten σ er ikke den samme for alle elektroner. Eksempelvis vil et $2s$ -elektron i oftere befinne seg nær kjernen enn et $2p$ -elektron. Vi sier gjerne at s -elektronet *penetrerer* det K -skallet bedre enn det tilsvarende p -elektronet, noe som gir opphav til en lavere skjermingskonstant (og dermed større effektiv kjerneladning) for s -elektronet enn for p -elektronet—se Figur 13.22 i læreboka.

Den større effektive kjerneladningen for $2s$ -elektronet fører til at det får en lavere energi enn $2p$ -elektronet, noe som igjen betyr at degenerasjonen mellom orbitalene er lavere i et flerelektronatom enn i hydrogenatomet.

g) Hva menes med et lukket elektronskall i et atom?

Et lukket skall er et elektronskall hvor alle orbitalene er dobbeltokkupert.

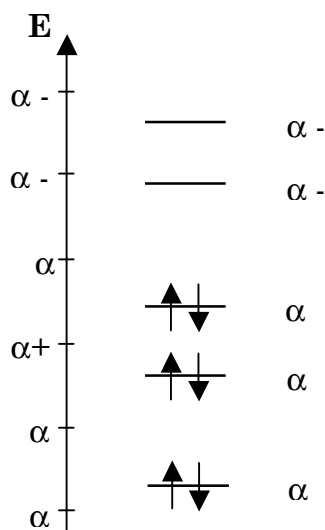
Oppgave 2



fur

Furan er en fem-ring med ett oksygenatom i ringen; strukturformelen er som følger:

Molekylet har et konjugert π -elektronsystem bestående av seks elektroner. Ved



hjelp av enkel Hückel-teori finner man at systemet har følgende elektronenerginivåer:

- a) Beregn π -elektronenergien, E_{π} , til dette systemet. Beregn også delokaliseringsenergien til systemet. Er dette molekylet stabilisert av det konjugerte π -elektronsystemet?

π -lektronenergien er gitt ved (se side 415 i læreboka):

$$E_{\pi} = 2(\alpha + 2,63\beta) + 2(\alpha + 1,31\beta) + 2(\alpha + 0,62\beta) = 6\alpha + 9,12\beta$$

Lokaliseringsenergien fås ved å trekke fra π -elektronenergien for tre etenmolekyler:

$$E_{\text{delok}} = 6\alpha + 9,12\beta - 3(2\alpha + 2\beta) = 3,12\beta$$

Molekylet er således stabilisert med $3,12\beta$ (husk at $\beta < 0$) på grunn av konjugasjon.

- b) Molekylorbitalene bestemmes ved hjelp av variasjonsprinsippet. Gi en kort beskrivelse av hva dette prinsippet innebærer.

Hvis en vilkårlig bølgefunksjon er bruk til å beregne energien (som en forventningsverdi av Hamilton-operatoren), så er energien aldri lavere enn den sanne (eksakte) energien—se side 406 i læreboka. Hvis

vi har to ulike prøvebølgefunksjoner, så er det naturlig å anta at den som gir lavest energi, er den beste. Dette gir opphavet til en nyttig metode til å bestemme tilnærmede bølgefunksjoner og energier: Vi minimerer forventningsverdien av energien med hensyn på parametre i bølgefunksjonen.

- c) *Forklar kort hva som menes med bindende, ikke-bindende og anti-bindende molekylorbitaler. Klassifiser alle molekylorbitalene i figuren over som hhv. bindende, ikke-bindende eller anti-bindende. Bindende molekylorbitaler er molekylorbitaler med lavere energi enn de atomorbitaler som den er dannet fra. Motsatt vil antibindende molekylorbitaler ha høyere energi enn de tilsvarende atomorbitaler, mens ikke-bindende molekylorbitaler har samme energi som atomorbitalene. I figuren over har vi tre bindende molekylorbitaler og to antibindende molekylorbitaler.*

- d) *Lag en enkel skisse av molekylorbitalen med lavest energi. Hvor mange noder har denne molekylorbitalen? Kan du si noe om antall noder for de andre molekylorbitalene?*

Den laveste molekylorbitalen har ingen noder. For et gitt system øker generelt antall noder med energien. For furan har den nest-laveste molekylorbitalen en node, den neste to noder osv.

- e) *Hva mener vi med at elektronene i molekylorbitalmodellene er delokaliserte?*

Med delokalisering mener vi at elektronene befinner seg i molekylorbitaler som er lokalisert til store deler av molekylet, i motsetning til elektroner som er lokalisert til ett atom (slik som 1s-elektronene).

- f) *Gi en kort forklaring på hva størrelsene α og β representerer.*

Størrelsen α er Coulomb-integralet og β resonans-integralet—se side 407 I læreboka. For orbitalene A og B er disse integralene gitt ved

$$\alpha = \langle A|H|A \rangle = \langle B|H|B \rangle$$

$$\beta = \langle A|H|B \rangle$$

Coulomb-integralet gir energien av et elektron når det okkuperer A orbitalen eller B orbitalen (vi antar her at disse energiene er like); resonans-integralet gir vekselvirkningen mellom de to orbitalene.

- g) *Beregn HOMO-LUMO gapet for furan. Hvilken frekvens og hvilken bølgelengde (i nm) må lyset ha dersom man ønsker å eksitere molekylet fra grunntilstanden til den første eksiterte tilstanden? Anta at β har verdien $-4,342 \cdot 10^{-19}$ J.*

HOMO–LUMO-gapet er energiforskjellen mellom LUMO og HOMO, som for furan er gitt ved

$$\begin{aligned} E &= E_{\text{LUMO}} - E_{\text{HOMO}} = (\alpha - 0,95\beta) - (\alpha + 0,62\beta) \\ &= -1,57\beta = (-1,57)(-4,342 \cdot 10^{-19})\text{J} = 6,82\text{J} \end{aligned}$$

Den tilsvarende bølgelengden fås ved å benytte Bohrs frekvensbetingelse:

$$\lambda = \frac{c}{\nu} = \frac{hc}{E} = \frac{6,626 \cdot 10^{-34}\text{Js} \times 2,998 \cdot 10^8\text{ms}^{-1}}{6,82 \cdot 10^{-19}\text{J}} = 291\text{nm}$$

Oppgave 3

Vi skal i denne oppgaven betrakte en fri partikkel med masse m . Det generelle uttrykket for bølgefunksjonen er gitt ved

$$\psi = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$$

hvor A og B er konstanter og $k > 0$. Operatoren for bevegelsesmengde langs x -aksen er gitt ved

$$p_x = -i\hbar \frac{d}{dx}$$

og Hamilton-operatoren ved

$$H = \frac{p_x^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2}$$

a) I hvilke av følgende fire tilstandene er bølgefunksjonen en egentilstand til p_x ?

$$\begin{aligned}\psi_I &= e^{ikx} \\ \psi_{II} &= e^{-ikx} \\ \psi_{III} &= \frac{e^{ikx} + e^{-ikx}}{2} = \cos(kx) \\ \psi_{IV} &= \frac{e^{ikx} - e^{-ikx}}{2i} = \sin(kx)\end{aligned}$$

Svar: Ved å la p_x virke på de fire tilstandene får vi:

$$\begin{aligned}p_x \psi_I &= \hbar k \psi_I \\ p_x \psi_{II} &= -\hbar k \psi_{II} \\ p_x \psi_{III} &= i\hbar k \psi_{IV} \\ p_x \psi_{IV} &= -i\hbar k \psi_{III}\end{aligned}$$

som viser at de to første tilstandene er egenfunksjoner til p_x , men ikke de to siste.

b) I hvilke av tilstandene har partikkelen en veldefinert bevegelsesmengde langs x -aksen?

Partikkelen har en veldefinert bevegelsesmengde i tilstandene ψ_I og ψ_{II} .

c) Beregn bevegelsesmengden til partikkelen når den er tilstandene ψ_I og ψ_{II} .

Da disse tilstandene er egentilstander til p_x , så er bevegelsesmengden lik egenverdien. Bevegelsesmengden er derfor $\hbar k$ i tilstand ψ_I og $-\hbar k$ i tilstand ψ_{II} .

d) Hva er forventningsverdien av bevegelsesmengden i tilstandene ψ_{III} og ψ_{IV} ? Det er ikke nødvendig å beregne forventningsverdien, men svaret må begrunnes.

I begge tilstandene er forventningsverdien av bevegelsesmengden null. Begge tilstandene kan tenkes satt sammen av de to tilstandene ψ_I og ψ_{II} , med samme vekt på hver tilstand. Ved måling av bevegelsesmengden vil man derfor like ofte måle $\hbar k$ som $-\hbar k$, og forventningsverdien må da være null.

- e) Ved måling av bevegelsesmengden i x -retningen hvor stor er sannsynligheten for at den er positiv når partikkelen befinner seg til tilstand ψ_I og i tilstand ψ_{III} ?

I tilstand ψ_I er sannsynligheten 100%; i tilstand ψ_{III} er den 50%.

- f) Beregn energien i disse tilstandene og vis at den er i samsvar med formelen

$$E = \frac{p_x^2}{2m}$$

Ved å operere på disse tilstandene med Hamilton-operatoren finner vi:

$$\begin{aligned} p_x \psi_I &= \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \psi_I \\ p_x \psi_{II} &= \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \psi_{II} \\ p_x \psi_{III} &= \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \psi_{III} \\ p_x \psi_{IV} &= \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \psi_{IV} \end{aligned}$$

Alle tilstander er derfor egentilstander til Hamilton-operatoren med samme energi

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{(\hbar k)^2}{2m} = \frac{p_x^2}{2m}$$

- g) Vis at bølgelengden til partikkelen er gitt ved $\lambda = 2\pi/k$ og vis at dette er i samsvar med de Broglies relasjon

$$p_x = \frac{h}{\lambda}$$

For tilstand ψ_{III} har vi at

$$\psi_{III} \left(x + \frac{2\pi}{k} \right) = \cos \left[k \left(x + \frac{2\pi}{k} \right) \right] = \cos(kx + 2\pi) = \cos(kx) = \psi_{III}(x)$$

som viser at bølgelengden er gitt ved $\lambda = 2\pi/k$, dvs. $k = 2\pi/\lambda$. Vi har tidligere funnet at bevegelsesmengden er gitt ved $p_x = \hbar k = hk/2\pi$. Substitusjon av k gir de Broglies relasjon.

Våren 2002 Oppgave 5

Svar kort på følgende spørsmål:

- a) Hva innebærer Borns interpretasjon av bølgefunksjonen?

Hvis bølgefunksjonen for en partikkel i et punkt x er gitt ved $\Psi(x)$, så er sannsynligheten for å finne partikkelen i et infinitesimalt område dx rundt x proporsjonal med $\Psi(x)^* \Psi(x) dx$.

- b) Schrödinger-ligningen sammen med Borns interpretasjon stiller en rekke krav til en funksjon for at den skal kunne være en akseptabel bølgefunksjon. Hvilke krav må bølgefunksjonen oppfylle?

Bølgefunksjonen må være kontinuerlig, ha en kontinuerlig førstederiverte, være entydig, og være endelig.

- c) Hva er en node?

En node er punkt i rommet der bølgefunksjonen skifter fortegn.

- d) Hva er degenerasjon? Gi et konkret eksempel på et system som oppviser degenerasjon.

Degenerasjon betyr at to eller flere tilstander har samme energi. Et eksempel på degenererte tilstander er $2s$ - og $2p$ -tilstandene i hydrogenatomet, som har firedobbelt degenerasjon. I fravær av et ytre magnetisk felt er degenerasjonen åtte (pga. spinn).

- e) Grunntilstanden ($n = 1$) for en partikkel i en en-dimensjonal boks med lengde

L kan skrives $\psi = N \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right)$. Vis at normeringskonstanten N må være lik

$\sqrt{\frac{2}{L}}$ for at denne bølgefunksjonen skal være normert.

Hint 1: Bølgefunksjonen er definert i intervallet $0 \leq x \leq L$.

Hint 2: Utnytt det generelle integralet $\int \sin^2 ax \, dx = \frac{1}{2}x - \frac{1}{4a} \sin 2ax$

Vi skal normere tilstanden slik at

$$\int_0^L \psi^*(x) \psi(x) dx = 1$$

Ved innsetning av ψ og integrasjon kan vi skrive venstresiden på formen

$$\begin{aligned} \int_0^L \psi^*(x)\psi(x)dx &= \int_0^L N^2 \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right)^2 dx = N^2 \int_0^L \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right)^2 dx \\ &= N^2 \left[\frac{x}{2} - \frac{L}{4\pi} \sin\left(\frac{2\pi x}{L}\right) \right]_0^L = \frac{N^2 L}{2} \end{aligned}$$

Vi kan nå bestemme normeringskonstanten:

$$\frac{N^2 L}{2} = 1 \Rightarrow N = \sqrt{\frac{2}{L}}$$

Våren 2002 Oppgave 6

Den enkleste kvantemekaniske modellen for vibrasjonsbevegelse er den en-dimensjonale harmoniske oscillatoren. Hamilton-operatoren for et slikt system er

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} kx^2$$

der m er partikkelens masse og k er kraftkonstanten. Bølgefunksjonen for grunntilstanden ($v = 0$) til den harmoniske oscillatoren (ser bort fra normering) er

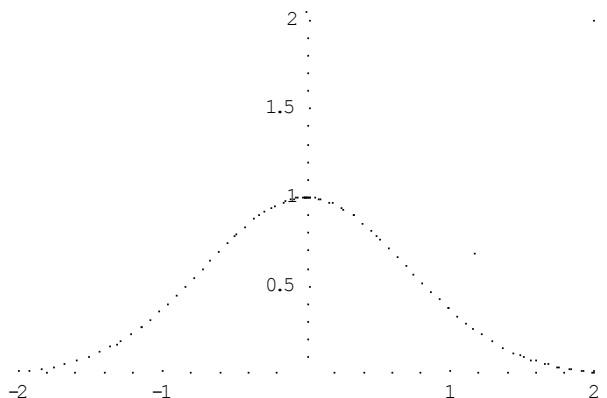
$$\psi = e^{-ax^2}$$

Det generelle uttrykket for energien til systemet er

$$E_v = (v + \frac{1}{2})\hbar\omega, \quad \omega = \sqrt{\frac{k}{m}}, \quad v = 0, 1, 2, \dots$$

Skisser potensialet og skisser bølgefunksjonen til grunntilstanden. Forklar kort hvorfor a må være et positivt tall.

Vi har her skissert potensialet (hel linje) og bølgefunksjonen (stiplet linje). Vi har antatt $k=1$ og $a=1$.



Eksponenten a må være positiv for at bølgefunksjonen skal gå mot null for uendelige argumenter.

La Hamilton-operatoren angitt ovenfor virke på grunntilstanden. Vis at vi må kreve at $a = \frac{\sqrt{km}}{2\hbar}$ for at grunntilstandsbølgefunksjonen skal være en egentilstand (egenfunksjon) av Hamilton-operatoren.

Ved innsetting i Schrödinger-ligningen finner vi at

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} e^{-ax^2} + \frac{1}{2} kx^2 e^{-ax^2} = E e^{-ax^2}$$

og derivasjon gir

$$\frac{d^2}{dx^2} e^{-ax^2} = \frac{d}{dx} (-2axe^{-ax^2}) = (4a^2x^2 - 2a)e^{-ax^2}$$

Innsatt over gir dette

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} (4a^2 - 2a)e^{-ax^2} + \frac{1}{2} kx^2 e^{-ax^2} &= E e^{-ax^2} \Rightarrow \\ -\frac{\hbar^2}{2m} (4a^2x^2 - 2a) + \frac{1}{2} kx^2 &= E \Rightarrow \\ \left(-\frac{2\hbar^2 a^2}{m} + \frac{1}{2} k \right) x^2 + \frac{\hbar^2 a}{m} &= E \end{aligned}$$

Da ligningen skal gjelde for alle x , må koeffisienten foran x^2 forsvinne:

$$-\frac{2\hbar^2 a^2}{m} + \frac{1}{2} k = 0 \Rightarrow a = \frac{\sqrt{km}}{2\hbar}$$

Vi skal så benytte den harmoniske oscillatoren som modell for de laveste vibrasjonsnivåene til molekylet N_2^+ . Kraftkonstanten for $(^{14}N^{14}N)^+$ er $k = 1960 \text{ N m}^{-1}$, og atommassen til nitrogen-14 er $m_N = 2.326 \cdot 10^{-26} \text{ kg}$. Husk å benytte molekylets reduserte masse definert ved

$$\frac{1}{m} = \frac{1}{m_N} + \frac{1}{m_N} = \frac{2}{m_N}$$

Beregn energien til de tre laveste vibrasjonsnivåene for N_2^+ og skisser energinivådiagrammet for systemet.

Energinivåene er gitt ved

$$E_v = (v + \frac{1}{2})\hbar\sqrt{\frac{k}{m}} = (v + \frac{1}{2})\frac{h}{2\pi}\sqrt{\frac{2k}{m_N}}$$

$$= (v + \frac{1}{2})\frac{6,626 \cdot 10^{-34}}{2\pi}\sqrt{\frac{2 \cdot 1960}{2,326 \cdot 10^{-26}}}\text{J} = (v + \frac{1}{2})4,33 \cdot 10^{-20}\text{J}$$

som gir oss følgende energier for de tre laveste vibrasjonstilstandene: $2,16 \cdot 10^{-20}\text{J}$, $6,49 \cdot 10^{-20}\text{J}$ og $1,08 \cdot 10^{-19}\text{J}$.

Hvorfor har den vibrasjonelle grunntilstanden en energi $E_0 > 0$?

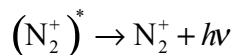
Hvis partikkelen skulle ha $E_0 = 0$, så måtte den ligge i ro i bunnen av potensialet. Vi ville da kjenne både posisjon ($x = 0$) og bevegelsesmengden ($p = 0$) eksakt, noe som strider mot Heisenbergs usikkerhetsrelasjon.

Våren 2002 Oppgave 7

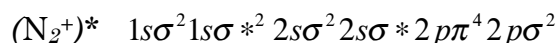
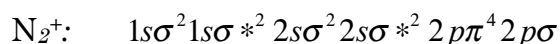
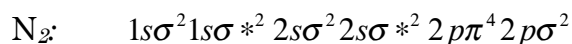
Nitrogen i atmosfæren gir opphav til fiolett og blått nordlys. Første trinn i prosessen er at et nitrogenmolekyl ioniseres når det treffes av et energirikt elektron/ion fra solvinden:



Stjernen (*) indikerer at ionet som produseres i denne kollisjonen er elektronisk eksitert. Det eksiterte ionet faller hurtig tilbake til den elektroniske grunntilstanden gjennom utsendelse av et foton med en karakteristisk frekvens ν :



Orbitalkonfigurasjonene for N_2 , N_2^+ og $(N_2^+)^*$ er gitt ved



- a) Tegn molekylorbitalenerginivådiagrammer for disse molekylene og beregn deres bindingsordener.

Bindingsorden er definert som

$$b = \frac{1}{2}(n - n^*)$$

der n er antall elektroner i bindende orbitaler og n^* er antall elektroner i antibindende orbitaler. Vi finner da at $b=3$ for N_2 , $5/2$ for N_2^+ og $7/2$ for $(N_2^+)^*$.

- b) Hvilke molekyler har den korteste og den lengste bindingsavstanden?

Basert på bindingsordenene, finner at $(N_2^+)^*$ har den sterkeste og korteste bindingen (107.5pm), mens N_2^+ har den svakeste og lengste bindingen (111.6pm). Til sammenligning har N_2 en midlere bindingslengde på 109.4 pm.

- c) Et molekyls totalenergi kan med god tilnærming skrives som summen av den elektroniske energien og vibrasjonsenergien:

$$E_{\text{tot}} = E_{\text{el}} + (v + \frac{1}{2})\hbar\omega, \quad v = 0, 1, 2, \dots$$

Fra enkle kvantekjemiske beregninger har vi bestemt E_{el} og $\hbar\omega$ for de tre molekylene—se tabellen, hvor vi vilkårlig har satt den elektroniske energien av N_2 til null. Beregn totalenergien for de tre laveste vibrasjonelle tilstandene av N_2^+ .

Vi finner energien ved å addere den elektroniske og vibrasjonelle energien. Dette gir oss energiene $2,306 \cdot 10^{-18} \text{ J}$, $2,349 \cdot 10^{-18} \text{ J}$ og $2,392 \cdot 10^{-18} \text{ J}$.

	N_2	N_2^+	$(N_2^+)^*$
E_{el}	0 J	$2.284 \cdot 10^{-18} \text{ J}$	$2.794 \cdot 10^{-18} \text{ J}$
$\hbar\omega$	$0.047 \cdot 10^{-18} \text{ J}$	$0.043 \cdot 10^{-18} \text{ J}$	$0.047 \cdot 10^{-18} \text{ J}$

- d) Nordlys oppstår når det eksiterte $(N_2^+)^*$ -ionet faller ned til sin elektroniske grunntilstand (N_2^+). Overgangen foregår fra den vibrasjonelle grunntilstanden ($v=0$) av $(N_2^+)^*$ til en av de tre laveste vibrasjonstilstandene ($v=0, 1, 2$) av N_2^+ . Beregn bølgelengden i nanometer av det lyset som sendes ut ved disse tre overgangene.

Energiene av slutt-tilstandene er bestemt i forrige oppgave. Energien av begynnelsestilstanden er gitt ved $2,818 \cdot 10^{-18} \text{ J}$. Energien av det fotonet som sendes ut ved de tre overgangene er da gitt ved $5,12 \cdot 10^{-19} \text{ J}$, $4,69 \cdot 10^{-19} \text{ J}$ og $4,26 \cdot 10^{-19} \text{ J}$. For å bestemme tilsvarende bølgelengder benytter vi formelen

$$\Delta E = h\nu = \frac{hc}{\lambda} \Rightarrow \lambda = \frac{hc}{\Delta E} = \frac{1,986 \cdot 10^{-25} \text{ Jm}}{\Delta E}$$

Dette gir oss følgende bølgelengder: 388 nm, 423 nm og 466 nm. De tilsvarende observerte bølgelengder er 391 nm (UV), 428 nm (fiolett) og 471 nm (blått).