

Kemirelaterade uppgifter i matematik

1. Täthetsfunktionen som beskriver sannolikheten att hitta en elektron i väteatomens 1s-orbital på ett visst avstånd r från kärnan ges av ekvationen

$$P(r) = 4 \left(\frac{1}{a_0} \right)^3 e^{-2r/a_0} r^2$$

där a_0 är den så kallade Bohr-radien (lika med 52,9 pm). För vilket avstånd, r , har denna fördelningsfunktion ett maximum?

Visa också att fördelningsfunktionen är normerad, dvs.

$$\int_0^\infty P(r) dr = 1$$

vilket betyder att sannolikheten att hitta elektronen *någonstans* utanför kärnan är ett.

2. Vibrationsenergin för en tvåatomig molekyl kan approximeras med Morsefunktionen

$$U(r) = A \left(1 - e^{-B(r-r_0)} \right)^2$$

där A , B , och r_0 är konstanter. Beräkna det interatomära avstånd för vilket U har ett minimum.

3. Fördelningsfunktionen som beskriver sannolikhetstätheten att hitta en elektron i grundtillståndet på ett avstånd x från ena kanten i en ”en-dimensionell låda med $0 \leq x \leq a$ ges av

$$\psi(x) = \sqrt{\left(\frac{2}{a}\right)} \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right)$$

Detta är en modell som bl.a. kan användas för elektroner i molekyler med alternerande enkel- och dubbelbindningar (konjugerade system). Beräkna det värde på x för vilket $\psi(x)$ har ett maximum, dvs. det avstånd där det är störst sannolikhet att hitta elektronen.

4. Orsaken till att gaser kan kondensera är att molekyler och atomer växelverkar. En modell som ofta används för att beskriva växelverkningsenergin mellan två molekyler på ett avstånd r från varandra är den potentialenergifunktion som kallas Lennard-Jones potentialen

$$U(r) = 4\varepsilon \left[\left(\frac{d}{r} \right)^{12} - \left(\frac{d}{r} \right)^6 \right]$$

där d är storleken på molekylen och ε är ett mått på växelverkningsenergin. Avgör om denna funktion har ett maximum, ett minimum eller både och. Tolka resultatet fysikaliskt. Beräkna även värdet på funktionen i eventuella extrempunkter.

5. Vid beräkning av en lösningens osmotiska tryck, (Π), t.ex. för salt eller socker i vatten, får man följande ekvation

$$\Pi = -\frac{RT}{V} \ln(1 - x)$$

där R är gaskonstanten, T är temperaturen, V är volymen och x är molbråket (koncentrationen) av den lösta substansen. Bestäm Maclaurin-utvecklingen av $\ln(1 - x)$. Det erhållna uttrycket kan användas för att beräkna det osmotiska trycket i lösningar med låg koncentration.

6. Bryggan mellan atomer och molekyler å ena sidan och tryck, reaktionsvärmen och jämviktskonstanter å andra sidan är en del av kemin och fysiken som kallas statistisk mekanik. De mest typiska beräkningarna som man först stöter på i en sådan kurs är derivator med avseende på temperaturen av följande typ av funktioner

$$q(T) = \sum_i e^{-E_i/kT}$$

och

$$\ln q(T) = \ln \sum_i e^{-E_i/kT}$$

Vad blir resultatet efter utförda deriveringar?

7. Einstein föreslog 1905 en modell för att beräkna värmekapaciteten för en kristall (d.v.s. hur mycket energi i form av värme som behövs för att höja kristallens temperatur). Han tänkte sig kristallen som en mängd atomer som vibrerar kring sina jämviktslägen. För en kristall som består av N atomer kan man definiera en funktion $Q(T)$ - tillståndssumman, ur vilken värmekapaciteten kan beräknas.

$$Q = e^{-U_0/kT} \left(\frac{e^{-h\nu_0/2kT}}{1 - e^{-h\nu_0/kT}} \right)^{3N}$$

Om man håller kristallens volym konstant kan värmekapaciteten, C_V , beräknas med följande samband

$$C_V = \frac{dU(T)}{dT}$$

där

$$U(T) = kT^2 \left(\frac{d \ln Q(T)}{dT} \right)$$

Konstanten U_0 är den energi som behövs för att överföra kristallen till gasfas vid noll kelvin, $k = 1,38066 \cdot 10^{-23}$ J/mol (Boltzmanns konstant) och $h = 6,626 \cdot 10^{-34}$ J s (Plancks konstant). Beräkna värmekapaciteten för diamant vid 298 K om $\nu_0 = 2,75 \cdot 10^{13}$ Hz är atomernas vibrationsfrekvens i kristallen.

8. Tryck-volymarbetet då en gas expanderar eller komprimeras ges av

$$w = - \int_{V_1}^{V_2} P(V) dV$$

För många gaser kan man som en bra approximation för $P(V)$ använda van der Waals' "tillståndsekvation".

$$P = \frac{nRT}{V - nb} - \frac{an^2}{V^2}$$

där n är antalet mol av gasen, T är temperaturen, gaskonstanten $R = 8.314 \text{ J/(K mol)}$ och a och b är konstanter vilkas värden beror på gasen ifråga.

Beräkna arbetet då en mol ($n = 1$) SO_2 vid 300 K komprimeras från $V_1 = 180 \cdot 10^{-3} \text{ m}^3$ till $V_2 = 60 \cdot 10^{-3} \text{ m}^3$. För svaveldioxid är $a = 0,1381$ och $b = 3,219 \cdot 10^{-5}$ i SI-enheter.

9. Man kan bestämma när en kemisk reaktion, vid konstant tryck, har nått jämvikt genom att betrakta ändringen i Gibbs fria energi (ΔG). För att kunna förutsäga hur utbytet av en kemisk reaktion varierar med temperaturen kan man t.ex. använda följande form av Gibbs-Helmholtz ekvation

$$\frac{d(\Delta G/T)}{dT} = -\frac{a + bT + cT^2}{T^2}$$

Härled ett uttryck för ΔG som funktion av T , om $\Delta G = \Delta G_1$ vid temperaturen T_1 .

10. (a) För många kemiska reaktioner finner man experimentellt att reaktionshastigheten är proportionell mot koncentrationen av reaktant, $[A]$, vid varje tid, t , under reaktionen (en första ordningens reaktion).

$$\frac{d[A]}{dt} = -k[A]$$

Minustecknet kommer av att koncentrationen reaktant minskar med tiden. Om initialkoncentrationen av $[A]$ betecknas $[A]_0$, finn ett uttryck för hur $[A]$ varierar som funktion av tiden.

- (b) Givet följande data för sönderfallet av N_2O_5 i flytande brom, bestäm hastighetskonstanten, k , genom att plotta data så att man får en rät linje.

$t/(\text{s})$	0	200	400	600	1000
$[\text{N}_2\text{O}_5]/\text{M}$	0.110	0.073	0.048	0.032	0.014