

# TIF101 Tillämpad kvantfysik

Datum: 12 april 2022  
Tid: 8.30 – 12.30  
Examinator: Anders Hellman, telefon: 031-7725611  
Hjälpmedel: Physics Handbook, Beta Mathematics Handbook, Chalmersgodkänd miniräknare.  
Betygsgränser : Betyg 3: 17 p, betyg 4: 25 p, betyg 5: 37 p (inkluderat poäng från inlämningsuppgifter).  
Tentamen maximalt 24 p.


## 1. Kvantgrindar (1 poäng)

Som nämdes i kursen kan alla kvantalgoritmer för  $n$  kvantbitar beskrivas av en unitär matris med dimensionen  $2^n \times 2^n$  som multiplicerar kolumnvektorn med koefficienterna för in-tillståndet och ger koefficienterna för ut-tillståndet. Som exempel kan den så kallade Hadamard-grinden  $H$  som verkar på en kvantbit skrivas som

$$H|0\rangle = (|0\rangle + |1\rangle)/\sqrt{2}, \quad H|1\rangle = (|0\rangle - |1\rangle)/\sqrt{2},$$

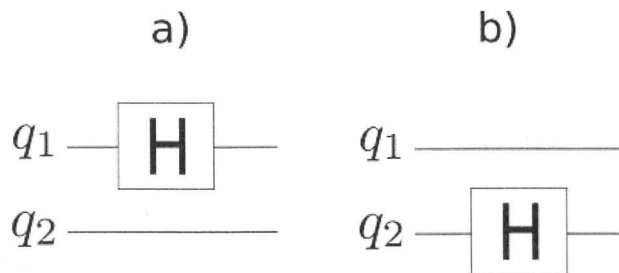
vilket på matrisform skrivs

$$\begin{pmatrix} c_0^{\text{ut}} \\ c_1^{\text{ut}} \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_0^{\text{in}} \\ c_1^{\text{in}} \end{pmatrix}.$$

Man kan också beskriva Hadamard-grinden grafiskt:  där den horisontella linjen representerar en kvantbit.

Se figur 1 för att besvara följande frågor:

- Vad är den unitära  $4 \times 4$  matrisen för kretsen a) i beräkningsbasen, dvs för kolumnvektorerna  $(c_{00}, c_{01}, c_{10}, c_{11})^T$ ?
- Vad är matrisen för kretsen b)?



Figur 1:  $H$  är Hadamard-operatoren. I a) så appliceras alltså  $H$  på kvantbit 1 medan kvantbit 2 lämnas orörd. I b) är rollerna för kvantbit 1 och 2 de omvända.

2. **Spin-1/2 i magnetfält (3 poäng)** En partikel med magnetiskt moment  $\vec{\mu} = \mu_0 \vec{s}$  och spin  $\vec{s} = \vec{\sigma}/2$  med egenvärden  $\pm 1/2$  ( $\hbar = 1$ ) placeras i ett konstant magnetfält  $\vec{B}$  som pekar i  $z$ -riktning. Vid tid  $t = 0$  så har partikeln  $s_y = +1/2$ . Hitta sannolikheterna att partikeln vid någon senare tid  $t > 0$  har

- a)  $s_x = +1/2$ ,  
b)  $s_y = -1/2$ .

3. **Sannolikheter och väntevärden (4 poäng)**

Antag att elektronen i en väteatom beskrivs av superpositionen

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{14}} [|\psi_{100}\rangle - 2|\psi_{211}\rangle + 3|\psi_{210}\rangle],$$

där egentillstånden betecknas  $|\psi_{n\ell m}\rangle$ . Beräkna

- a) Sannolikheten att mäta ett tillstånd med  $\ell = 1$ .  
b) Väntevärdet för  $\hat{L}_z$ . Behåll  $\hbar$  i svaret.  
c) Väntevärdet för  $\hat{L}^2$ . Behåll  $\hbar$  i svaret.

Joniseringsenergin för väte är  $E_n = -\frac{E_H}{2} \frac{1}{n^2}$  där  $E_H$  är Hartree-energin.

- d) Bestäm väntevärdet för den uppmätta energin i eV.

4. **Variationsprincipen (4 poäng)**

Uppskatta grundtillståndsenergin för en endimensionell harmonisk oscillator med Hamiltonian

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{m\omega^2}{2} x^2,$$

genom att använda variationsprincipen. Använd en gaussisk testvågfunktion  $A \exp(\alpha x^2)$  där  $A$  är normeringskonstant och  $\alpha$  en parameter. Hur nära den riktiga grundtillståndsenergin är svaret?

5. **Elektronstrukturen för atomer (4 poäng)**

Motivera och redovisa den korrekta Russell-Saunders ( $^2S+1L_J$ ) termen för grundtillståndet av följande atomer.

- (a) Be $[(1s)^2(2s)^2]$   
(b) O $[(1s)^2(2s)^2(2p)^4]$   
(c) Cl $[(1s)^2(2s)^2(2p)^6(3s)^2(3p)^5]$   
(d) As $[(1s)^2(2s)^2(2p)^6(3s)^2(3p)^6(4s)^2(3p)^3]$

6. **Molekylspektroskopi (4 poäng)**

Genom att belysa CO molekylen med en mikrovåg med våglängden  $\lambda = 2.6$  mm induceras en rotationsövergång mellan  $l = 0$  och  $l = 1$ . Beräkna bindningsavståndet mellan C och O.

7. **Hückelmetoden (4 poäng)**

Bestäm energin (i Hückel enheter) för en negativt laddad vätemolekyl  $H_2^-$  och visa tydligt med hjälp av Hückelmetoden hur molekylorbitalerna ser ut och hur dessa är ockuperade. Antag  $\alpha = 0$ ,  $\beta = -1$ , samt att endast 1s-orbitalerna av de båda enskilda väteatomerna är viktiga för skapandet av molekylorbitalerna.

# TIF101 Tillämpad kvantfysik

## LÖSNIGNAR

Datum: 12 april 2022  
Tid: 8.30 – 12.30  
Examinator: Anders Hellman, telefon: 031-7725611  
Hjälpmedel: Physics Handbook, Beta Mathematics Handbook, Chalmersgodkänd miniräknare.  
Betygsgränser : Betyg 3: 17 p, betyg 4: 25 p, betyg 5: 37 p (inkluderat poäng från inlämningsuppgifter).  
Tentamen maximalt 24 p.

---


### 1. Kvantgrindar (1 poäng)

Som nämndes i kursen kan alla kvantalgoritmer för  $n$  kvantbitar beskrivas av en unitär matris med dimensionen  $2^n \times 2^n$  som multiplicerar kolumnvektorn med koefficienterna för in-tillståndet och ger koefficienterna för ut-tillståndet. Som exempel kan den så kallade Hadamard-grinden  $H$  som verkar på en kvantbit skrivas som

$$H|0\rangle = (|0\rangle + |1\rangle)/\sqrt{2}, \quad H|1\rangle = (|0\rangle - |1\rangle)/\sqrt{2},$$

vilket på matrisform skrivs

$$\begin{pmatrix} c_0^{\text{ut}} \\ c_1^{\text{ut}} \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_0^{\text{in}} \\ c_1^{\text{in}} \end{pmatrix}.$$

Man kan också beskriva Hadamard-grinden grafiskt:  där den horisontella linjen representerar en kvantbit.

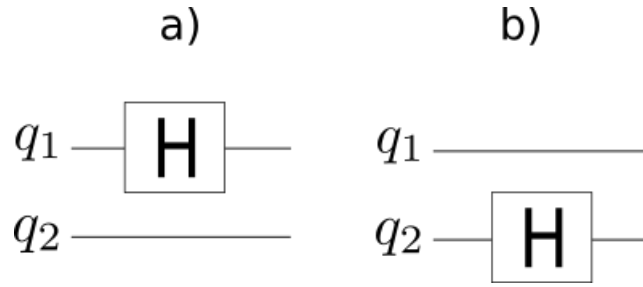
Se figur 1 för att besvara följande frågor:

- i) Vad är den unitära  $4 \times 4$  matrisen för kretsen a) i beräkningsbasen, dvs för kolumnvektorerna  $(c_{00}, c_{01}, c_{10}, c_{11})^\top$ ?  
[Använd kroneckerprodukten.](#)

$$H \otimes \mathbb{1} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

- ii) Vad är matrisen för kretsen b)?

$$\mathbb{1} \otimes H = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \otimes \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & -1 \end{pmatrix} \quad (1)$$



Figur 1:  $H$  är Hadamard-operatorn. I a) så appliceras alltså  $H$  på kvantbit 1 medan kvantbit 2 lämnas orörd. I b) är rollerna för kvantbit 1 och 2 de omvända.

2. **Spin-1/2 i magnetfält (3 poäng)** En partikel med magnetiskt moment  $\vec{\mu} = \mu_0 \vec{s}$  och spin  $\vec{s} = \vec{\sigma}/2$  med egenvärden  $\pm 1/2$  ( $\hbar = 1$ ) placeras i ett konstant magnetfält  $\vec{B}$  som pekar i  $z$ -riktning. Vid tid  $t = 0$  så har partikeln  $s_y = +1/2$ . Hitta sannolikheterna att partikeln vid någon senare tid  $t > 0$  har

a)  $s_x = +1/2$ ,

b)  $s_y = -1/2$ .

$$H = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} = -\frac{\mu_0 B}{2} \sigma_z \quad (2)$$

$$U(t) = e^{-iHt} = e^{i\frac{\mu_0 B}{2} t \sigma_z} = \begin{pmatrix} e^{i\frac{\mu_0 B}{2} t} & 0 \\ 0 & e^{-i\frac{\mu_0 B}{2} t} \end{pmatrix} \quad (3)$$

$$|\psi_0\rangle = (1, i)^\top / \sqrt{2} \quad \text{i } z\text{-basen.} \quad (4)$$

$$|\psi(t)\rangle = U(t) |\psi_0\rangle = \begin{pmatrix} e^{i\frac{\mu_0 B}{2} t} & 0 \\ 0 & e^{-i\frac{\mu_0 B}{2} t} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ i/\sqrt{2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{i\frac{\mu_0 B}{2} t} / \sqrt{2} \\ i e^{-i\frac{\mu_0 B}{2} t} / \sqrt{2} \end{pmatrix} \quad (5)$$

a)  $|\psi\rangle = (1, 1)^\top / \sqrt{2}$  i  $z$ -basen. Sannolikheten är  $|\langle \psi | \psi(t) \rangle|^2$

$$\langle \psi | \psi(t) \rangle = \frac{1}{2} \left( e^{i\frac{\mu_0 B}{2} t} + i e^{-i\frac{\mu_0 B}{2} t} \right) \quad (6)$$

Sannolikheten är då

$$\frac{1}{2} \left[ 1 + 2 \cos\left(\frac{\mu_0 B}{2} t\right) \sin\left(\frac{\mu_0 B}{2} t\right) \right] = \frac{1}{2} [1 + \sin(\mu_0 B t)]. \quad (7)$$

Alternativt uttryck

$$\sin^2(\mu_0 B t / 2 + \pi/4). \quad (8)$$

Alt.

$$\cos^2(\mu_0 B t / 2 - \pi/4).$$

b)  $|\psi\rangle = (1, -i)^T/\sqrt{2}$  i z-basen. Sannolikheten är

$$\cos^2\left(\frac{\mu_0 B}{2}t\right).$$

Alternativ lösning med tidsberoende Schrödingerekvationen på nästa sida.

$$H = -\frac{\mu_0 B}{2} \sigma_z = -\frac{\mu_0 B}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$\text{TDSE } (\hbar=1): i \frac{d}{dt} \psi(t) = H \psi(t)$$

$$\psi(t) = \begin{pmatrix} c_0(t) \\ c_1(t) \end{pmatrix} \text{ (i } z\text{-basen)}$$

$$\text{TDSE} \rightarrow i \begin{pmatrix} \dot{c}_0 \\ \dot{c}_1 \end{pmatrix} = -\frac{\mu_0 B}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_0 \\ c_1 \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow \begin{pmatrix} \dot{c}_0 \\ \dot{c}_1 \end{pmatrix} = i \frac{\mu_0 B}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_0 \\ c_1 \end{pmatrix} \quad \text{konstant}$$

Komponentvis:

$$\dot{c}_0 = i \frac{\mu_0 B}{2} c_0 \Rightarrow c_0(t) = A_0 e^{i \frac{\mu_0 B}{2} t}$$

$$\dot{c}_1 = -i \frac{\mu_0 B}{2} c_1 \Rightarrow c_1(t) = A_1 e^{-i \frac{\mu_0 B}{2} t}$$

$$\text{Initialvillkor} \Rightarrow \psi(0) = \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} / \sqrt{2}$$

$$\Rightarrow c_0(0) = \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad c_1(0) = \frac{i}{\sqrt{2}}$$

$$\Rightarrow \psi(t) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{i \frac{\mu_0 B}{2} t} \\ i e^{-i \frac{\mu_0 B}{2} t} \end{pmatrix}$$

Tillväg 4/10

$$a) S_x \tilde{\psi} = \frac{1}{2} \tilde{\psi} \Rightarrow \tilde{\psi} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} / \sqrt{2}$$

Sannolikheten att vara i  $\tilde{\psi}$  vid tid  $t$  är

$$|\langle \tilde{\psi} | \psi(t) \rangle|^2$$

$$\langle \tilde{\psi} | \psi(t) \rangle = \frac{1}{2} (1 \ 1) \begin{pmatrix} e^{i \frac{\mu_0 B}{2} t} \\ i e^{-i \frac{\mu_0 B}{2} t} \end{pmatrix} =$$

$$= \frac{1}{2} \left[ e^{i \frac{\mu_0 B}{2} t} + i e^{-i \frac{\mu_0 B}{2} t} \right]$$

ta absolutbeloppet i kvadrat ...

$$\Rightarrow |\langle \tilde{\psi} | \psi(t) \rangle|^2 = \frac{1}{2} [1 + \sin(\mu_0 B t)] //$$

b) räkna samma men med

$$\tilde{\psi} = \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix} / \sqrt{2}$$

$$|\langle \tilde{\psi} | \psi(t) \rangle|^2 = \left| \frac{1}{2} (1, -i) \begin{pmatrix} e^{i \frac{\mu_0 B}{2} t} \\ i e^{-i \frac{\mu_0 B}{2} t} \end{pmatrix} \right|^2 =$$

$$= \left| \frac{1}{2} \left[ e^{i \frac{\mu_0 B}{2} t} + e^{-i \frac{\mu_0 B}{2} t} \right] \right|^2 = \cos^2 \left( \frac{\mu_0 B}{2} t \right) //$$

Figur 3: Uppgift 2 a) och b).

### 3. Sannolikheter och väntevärden (4 poäng)

Antag att elektronen i en väteatom beskrivs av superpositionen

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{14}} [|\psi_{100}\rangle - 2|\psi_{211}\rangle + 3|\psi_{210}\rangle],$$

där egentillstånden betecknas  $|\psi_{n\ell m}\rangle$ . Beräkna

- a) Sannolikheten att mäta ett tillstånd med  $\ell = 1$ .

$$\frac{1}{14}(2^2 + 3^2) = \frac{13}{14}$$

- b) Väntevärdet för  $\hat{L}_z$ . Behåll  $\hbar$  i svaret.

$$\begin{aligned} \text{Väntevärdet} &= \sum \text{egenvärden för } \hat{L}_z \times (\text{sannolikheten att mäta egenvärdet}) = \sum_m m\hbar \times \\ \text{prob}(\ell) &= \frac{1}{14} (0 \times 1 + \hbar \times 2^2 + 0 \times 2^2) = \frac{4}{14}\hbar = \frac{2}{7}\hbar. \end{aligned}$$

- c) Väntevärdet för  $\hat{L}^2$ . Behåll  $\hbar$  i svaret.

$$\begin{aligned} \text{Väntevärdet} &= \sum \text{egenvärden för } \hat{L}^2 \times (\text{sannolikheten att mäta egenvärdet}) = \sum_\ell m\hbar \times \\ \text{prob}(m) &= \frac{1}{14} (0 \times 1 + \hbar^2 1(1+1) [2^2 + 3^2]) = \frac{26}{14}\hbar^2 = \frac{13}{7}\hbar^2. \end{aligned}$$

Joniseringsenergin för väte är  $E_n = -\frac{E_H}{2} \frac{1}{n^2}$  där  $E_H$  är Hartree-energin.

- d) Bestäm väntevärdet för den uppmätta energin i eV.

$$\text{Physics handbook: } E_H = 4.359 \times 10^{-18} \text{ J och } 1 \text{ eV} = 1.6021765 \times 10^{-19} \text{ J} \implies E_H = \frac{4.359 \times 10^{-18}}{1.6021765 \times 10^{-19}} = 27.211 \text{ eV}.$$

Alternativt från samma tabell:  $1 \text{ Ry} = 13.605692 \text{ eV}$  och  $E_H = 2 \text{ Ry} = 27.211 \text{ eV}$ .

$$\begin{aligned} \langle E \rangle &= \frac{1}{14} E_1 + \frac{2^2}{14} E_2 + \frac{3^2}{14} E_2 = \frac{1}{14} (E_1 + 13E_2) = \frac{1}{14} \frac{-E_H}{2} \left( \frac{1}{1^2} + \frac{13}{2^2} \right) = -\frac{17}{112} E_H = \\ &= -\frac{17}{112} 27.211 \text{ eV} = -4.13 \text{ eV}. \end{aligned}$$

Rimlighetskontroll: Om vi bara hade  $n = 1$  så hade vi haft  $E_1 = -27.211 \text{ eV}/2 = -13.6 \text{ eV}$ , ok. Om vi bara hade  $n = 2$ :  $E_2 = -27.211 \text{ eV}/8 = -3.4 \text{ eV}$ . Vi har övervägande detta tillstånd men en liten andel  $n = 1$ , så det känns rimligt att  $\langle E \rangle$  är nära  $E_2$  men lite lägre.

### 4. Variationsprincipen (4 poäng)

Uppskatta grundtillståndsenenergin för en endimensionell harmonisk oscillator med Hamiltonian

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{m\omega^2}{2} x^2,$$

genom att använda variationsprincipen. Använd en gaussisk testvågfunktion  $A \exp(\alpha x^2)$  där  $A$  är normeringskonstant och  $\alpha$  en parameter. Hur nära den riktiga grundtillståndsenenergin är svaret?

$$\alpha = (\pm) \frac{m\omega}{2\hbar} \implies E_0 = \hbar\omega/2 \text{ vilket är den exakta energin, pga ansatsen var korrekt.}$$



5. **Elektronstrukturen för atomer (4 poäng)**

Motivera och redovisa den korrekta Russell-Saunders ( $^{2S+1}L_J$ ) termen för grundtillståndet av följande atomer.

- (a) Be $[(1s)^2(2s)^2]$
- (b) O $[(1s)^2(2s)^2(2p)^4]$
- (c) Cl $[(1s)^2(2s)^2(2p)^6(3s)^2(3p)^5]$
- (d) As $[(1s)^2(2s)^2(2p)^6(3s)^2(3p)^6(4s)^2(4p)^3]$

5. Vad är Russell-Saunders ( $^{2S+1}L_J$ ) termen för grundtillståndet för följande atomer?

a)  $\text{Be} [(1s)^2(2s)^2]$ : Eftersom skalet är fullt är termen  $\underline{\underline{^1S_0}}$   
 Alt.  $L=0$   $S=0 \Rightarrow$

b)  $\text{O} [(1s)^2(2s)^2(2p)^4]$   $2p \uparrow \uparrow \uparrow \downarrow \Rightarrow S = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} = 1$

$m_L \begin{array}{|c|c|c|} \hline +1 & 0 & -1 \\ \hline m_S +\frac{1}{2} & \begin{array}{|c|c|c|} \hline x & x & x \\ \hline \end{array} & \\ \hline \frac{1}{2} & \begin{array}{|c|c|c|} \hline x & & \\ \hline \end{array} & \\ \hline \end{array} \Rightarrow L=1$

Hunds 3:e Mer än halvfullt skal  $\Rightarrow$  maximalt  $J. \Rightarrow J = L + S = 2$

$\Rightarrow \underline{\underline{^3P_2}}$

c)  $\text{Cl} [(1s)^2(2s)^2(2p)^6(3s)^2(3p)^5]$   $3p \uparrow \uparrow \uparrow \downarrow S = \frac{1}{2}$

$m_L \begin{array}{|c|c|c|} \hline & & \\ \hline m_S & \begin{array}{|c|c|c|} \hline x & x & x \\ \hline \end{array} & \\ \hline & \begin{array}{|c|c|c|} \hline x & x & \\ \hline \end{array} & \\ \hline \end{array} \Rightarrow L=1$

Hunds 3:e  $\rightarrow J = L + S = 3/2$

$\Rightarrow \underline{\underline{^2P_{3/2}}}$

5d)  $\text{As} [(1s)^2(2s)^2(2p)^6(3s)^2(3p)^4(4s)^2(4p)^3]$

$4p \uparrow \uparrow \uparrow \downarrow S = \frac{3}{2}$

$m_L \begin{array}{|c|c|c|} \hline & & \\ \hline m_S & \begin{array}{|c|c|c|} \hline x & x & x \\ \hline \end{array} & \\ \hline & \begin{array}{|c|c|c|} \hline & & \\ \hline \end{array} & \\ \hline \end{array} \Rightarrow L=0$

Hunds 3:e mindre än halvfullt  $J = |L - S| = 3/2$

$\Rightarrow \underline{\underline{^4S_{3/2}}}$

Figur 4: Uppgift 5

### 6. Molekylspektroskopi (4 poäng)

Genom att belysa CO molekylen med en mikrovåg med våglängden  $\lambda=2.6$  mm induceras en rotationsövergång mellan  $l=0$  och  $l=1$ . Beräkna bindningsavståndet mellan C och O.

Tröghetsmomentet ges av  $I = \mu r_0^2$  ← bindningsavståndet.

Rotationsenergin mellan  $l=1$  och  $l=0$  ges av

$$E = \frac{\hbar^2}{2I} ((l+1)(l+2) - l(l+1)) = (l+1)\frac{\hbar^2}{I} = \{l=0\} = \frac{\hbar^2}{I}$$

Energien för strålningen

$$E = \frac{hc}{\lambda} = \frac{4.1357 \cdot 10^{-15} \cdot 2.998 \cdot 10^9}{2.6 \cdot 10^{-3}} \text{ [eV]} \approx 4.77 \cdot 10^{-4} \text{ eV}$$

COs reducerade massa ges av

$$\mu = \frac{m_c m_o}{m_c + m_o} = \frac{12 \cdot 16}{12 + 16} \approx 6.86 \text{ u}$$

$\Rightarrow r_0 = \sqrt{\frac{I}{\mu}} = \sqrt{\frac{\hbar^2}{E \mu}} = \frac{\hbar}{\sqrt{E \mu}} = \frac{1.055 \cdot 10^{-34}}{\sqrt{(4.77 \cdot 10^{-4} \cdot 1.60 \cdot 10^{-19} \cdot 6.86 \cdot 1.66 \cdot 10^{-27})^{1/2}}}$

$\approx 0.113 \text{ nm} = 1.13 \text{ \AA}$

Figur 5: Uppgift 6

7. Hückelmetoden (4 poäng)

Bestäm energin (i Hückel enheter) för en negativt laddad vätemolekyl  $H_2^-$  och visa tydligt med hjälp av Hückelmetoden hur molekylorbitalerna ser ut och hur dessa är ockuperade. Antag  $\alpha = 0$ ,  $\beta = -1$ , samt att endast 1s-orbitalerna av de båda enskilda väteatomerna är viktiga för skapandet av molekylorbitalerna.

$H_2^-$

$\begin{matrix} \textcircled{1s} & \cdot & \textcircled{1s} \\ \psi_{1s} & & \psi_{1s'} \end{matrix}$

Mha hückel ( $\alpha=0, \beta=-1$ ) fås

$$\begin{vmatrix} \epsilon & -1 \\ -1 & \epsilon \end{vmatrix} = \epsilon^2 - 1 = 0 \Rightarrow \epsilon = \pm 1$$

Molekylorbitalerna fås från

$$\begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} +1 & -1 \\ -1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_{1s} \\ \psi_{1s'} \end{pmatrix}$$

$\Rightarrow \psi_1 = \psi_{1s} - \psi_{1s'}$

$\psi_2 = -\psi_{1s} - \psi_{1s'} = -(\psi_{1s} + \psi_{1s'})$

Notera att fäsen inte är viktig i sammanhanget.

$\Rightarrow$

$\Rightarrow E_{\text{Tot}}(H_2^-) = -1 \text{ hü}$

↑  
utseendet av MO.

Figur 6: Uppgift 7