

Projekt – Molekylorbitaler med Hückelmetoden

Analys och Linjär Algebra, del C, K1/Kf1/Bt1

1 Inledning

Ekvationen för väteatomens orbitaler kan man (med en hel del arbete) lösa analytiskt (exakt). För mer komplicerade atomer eller molekyler måste man använda beräkningsmetoder som ger numeriska (approximativa) lösningar. Sådana metoder leder till att vi behöver lösa egenvärdesproblem för matriser

$$\mathbf{H}u = \lambda u$$

där \mathbf{H} är en symmetrisk matris som approximerar Hamilton-operatoren.

Hückelmetoden är en enkel sådan beräkningsmetod. Metoden är inte så noggrann och har sina begränsningar. En fördelen är dock att matriserna blir mycket små, mer noggranna metoder leder till mycket stora matriser och kräver därför mycket datorkraft.

Kort introduktion till Hückelprojektet kommer ges av kemilärare på en studioövning eller på en matematikföreläsning. När och var meddelas senare.

2 Uppgift

Formuleringen av projektuppgiften ”Hückelmetoden”¹ finner du på studiohemsidan. Där står allt du behöver för att klara projektet.

3 Redovisning

Hückelmetoden redovisas enbart för kemilärare i laborationsjournalen.

¹Atkins och Jones uppl 4 sid 17= uppl 5 sid 18, uppl 4 sid 119= uppl 5 sid 116, uppl 4 sid 122= uppl 5 sid 120, uppl 4 sid 126= uppl 5 sid 124