

NORGES TEKNISK-NATURVITENSKAPELIGE UNIVERSITET
Institutt for fysikk

Faglig kontakt under eksamen:
Margareth Nupen, tel. 73 55 96 42
Ingjald Øverbø, tel. 73 59 18 67

EKSAMEN I SIF4048
KJEMISK FYSIKK OG KVANTEMEKANIKK

Onsdag 28. mai 2003
kl. 09.00 - 15.00

Tillatte hjelpemidler: Godkjent kalkulator
Rottmann: Matematisk formelsamling
Øgrim & Lian: Størrelser og enheter i fysikk og teknikk
Aylward & Findlay: SI Chemical Data

Et ark med uttrykk og formler er vedlagt.

Sensuren faller 20. juni 2003.

Oppgave 1

En partikkel med masse m beveger seg i det éndimensjonale potensialet $V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$. Ved $t = 0$ prepareres dette systemet i (den normerte) begynnelsestilstanden

$$\Psi(x, 0) = \psi_\beta(x) \equiv (2\beta/\pi)^{1/4} e^{-\beta x^2} \quad (\beta > 0).$$

a. Forklar uten regning hvorfor forventningsverdien av posisjonen ved $t = 0$ er $\langle x \rangle_0 = 0$. Angi den hermiteske operatoren $\hat{p}_x$ som svarer til observabelen p_x , og beregn forventningsverdien $\langle p_x \rangle_0$ ved $t = 0$.

b. Beregn også forventningsverdiene $\langle x^2 \rangle_0$ og $\langle p_x^2 \rangle_0$ og usikkerhetene $(\Delta x)_0$ og $(\Delta p_x)_0$, og vis at produktet $(\Delta x)_0(\Delta p_x)_0$ er lik $\frac{1}{2}\hbar$.

c. Se på forventningsverdien av energien i begynnelsestilstanden,

$$\langle E \rangle_0 = \langle p_x^2/2m + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \rangle_0,$$

som funksjon av β , og påvis at $\langle E \rangle_0$ har et minimum for en viss verdi (β_0) av β . Finn β_0 og denne minimumsverdien.

d. Påvis at $\psi_{\beta_0}(x)$ er en egenfunksjon til Hamilton-operatoren $\hat{H}$ for dette systemet, og bestem egenverdien, E_0 .

e. Hva blir bølgefunksjonen $\Psi(x, t)$ for dette systemet for $t > 0$ dersom vi velger begynnelsestilstanden $\Psi(x, 0) = \psi_{\beta_0}(x)$? Hva kan du si om forventningsverdiene $\langle x \rangle_t$, $\langle p_x \rangle_t$, $\langle x^2 \rangle_t$ og $\langle p_x^2 \rangle_t$ for $t > 0$ for denne tilstanden $\Psi(x, t)$?

Oppgave 2

En partikkel med masse m beveger seg i et éndimensjonalt potensial $V(x)$. Anta at $\psi(x)$ er en energieigenfunksjon med energi E , dvs en løsning av den tidsuavhengige Schrödingerligningen for dette systemet, $\hat{H}\psi(x) = E\psi(x)$.

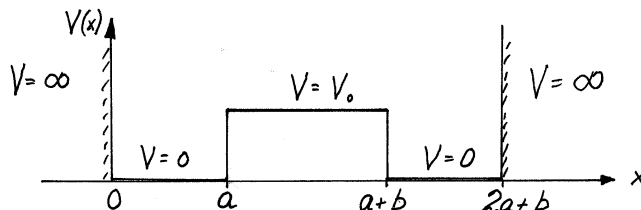
a. Redegjør [med utgangspunkt i ligningen $\hat{H}\psi(x) = E\psi(x)$] for hvordan $\psi(x)$ *krummer*

- (i) i klassisk tillatte områder, hvor $V(x) < E$,
- (ii) i klassisk forbudte områder, hvor $V(x) > E$,
- (iii) i punkter (eller områder) hvor $V(x) = E$.

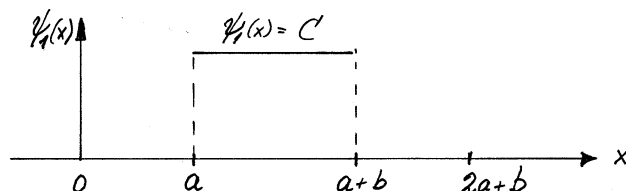
b. Anta at potensialet har formen

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{for } 0 < x \leq a \text{ og for } a+b \leq x < 2a+b, \\ V_0 & \text{for } a < x < a+b, \\ \infty & \text{for } x \leq 0 \text{ og for } x \geq 2a+b, \end{cases}$$

der $a > 0$ og $b \geq 0$:



Anta videre at parametrene velges slik at energieigenfunksjonen $\psi_1(x)$ for grunntilstanden i dette potensialet blir lik en konstant (C) i området $a < x < a+b$:



Hva kan du da si om energien E_1 for denne tilstanden (sammenlignet med V_0)? [Hint: Jf med pkt. **a**, eller bruk energieigenverdligningen på formen $E = (\hat{H}\psi)/\psi$.]

c. For at grunntilstanden skal ha egenskapen angitt i pkt. **b** må parametrene a , V_0 og m oppfylle en bestemt relasjon. Finn denne sammenhengen mellom V_0 , a og m ved å løse den tidsuavhengige Schrödingerligningen for området $0 < x < a$. Skissér løsningen $\psi_1(x)$ for alle x . [Hint: Det kan kanskje være nyttig å kontrollere at resultatene ser fornuftige ut i grensen $b \rightarrow 0$.]

Oppgave 3

En partikkel med ladning $-e$ og masse m (som kan være forskjellig fra elektronmassen m_e) beveger seg i feltet fra en ladning Ze plassert i origo. Dette svarer til et Coulomb-potensial

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} = -\frac{Z\hbar^2}{m_e a_0 r} \quad (\text{der } a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{m_e e^2} \text{ er Bohr-radien}).$$

a. Det oppgis at (den normerte) energieigenfunksjonen for grunntilstanden har formen

$$\psi = (\pi a^3)^{-1/2} e^{-r/a},$$

der parameteren a har dimensjon lengde.

Hva kan du si om dreieimpulsen for grunntilstanden? Bestem lengden a og energieigenverdien, E_1 , ved innsetting i den tidsuavhengige Schrödingerligningen for systemet.

b. Beregn $\langle 1/r \rangle$ for grunntilstanden. Bruk den inverse av denne forventningsverdien som et mål for “radien” for denne tilstanden, og drøft hvordan denne radien, samt energien E_1 , avhenger av massen m og ladningstallet Z .

c. Anta at det samme systemet prepareres i (den normerte) tilstanden

$$\psi \equiv R_{n1}(r)Y_{p_x}(\theta, \phi) \equiv R_{n1}(r)\sqrt{\frac{3}{4\pi}} \sin \theta \cos \phi,$$

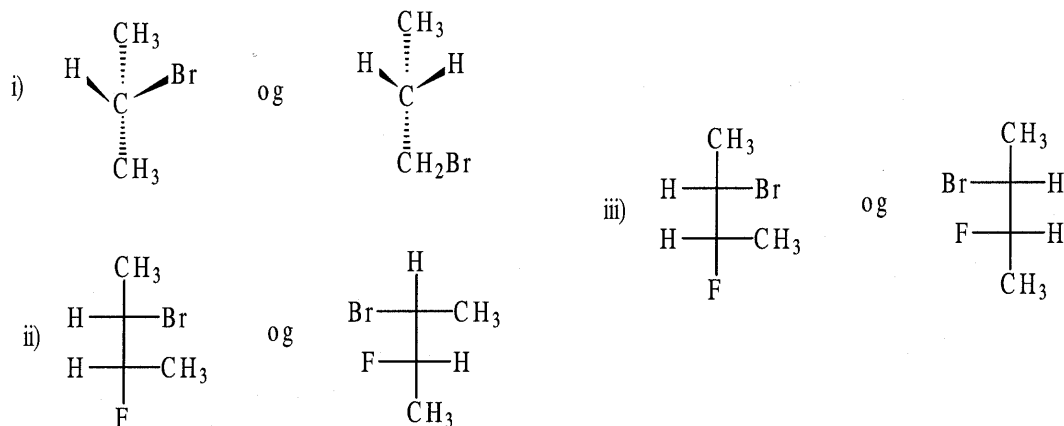
der radialfunksjonen $R_{n1}(r)$ er slik at ψ er en energieigenfunksjon med energi $E_n = E_1/n^2$. Vis at vinkelfunksjonen Y_{p_x} er en egenfunksjon til kvadratet av dreieimpulsoperatoren, $\hat{\mathbf{L}}^2$, og bestem den tilhørende egenverdien.

d. Anta at observabelen L_z måles når systemet er preparert i tilstanden gitt i pkt. **c**. Hva er de mulige måleresultatene i dette tilfellet, og hva er sannsynlighetene for disse? [Hint: Skriv Y_{p_x} som en lineærkombinasjon av sfæriske harmoniske; jf formelarket.]

Oppgave 4

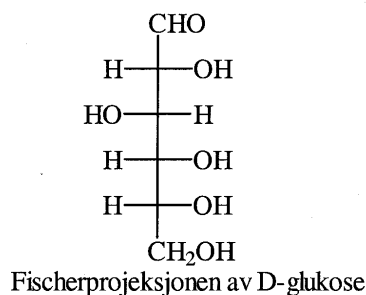
a. Sett opp konstitusjonsisomere av ikke-sykliske etere med bruttoformel C_4H_8O .

b. Figurene nedenfor viser tre strukturpar. Forklar slektskapet mellom medlemmene i hvert par ved å beskrive dem som enantiomere, diastereomere, konstitusjonsisomere eller identiske. Vis resonnement.

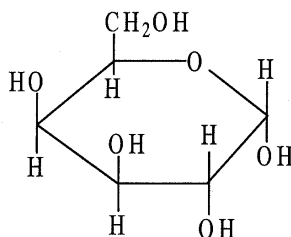


c. Hva skjer når et protein denatureres?

d. Glykogen er satt sammen med $\alpha(1 \rightarrow 4)$ -bindinger og en $\alpha(1 \rightarrow 6)$ -binding (forgreningspunkt). Tegn en del av et glykogenmolekyl med en forgrening i Haworth-projeksjon.



e. Strukturen gitt nedenfor dreier planpolarisert lys, men dens reduserende produkt dreier ikke planpolarisert lys. Hvorfor? (Skal tegnes som Fischer-projeksjon.)



Noe av dette kan du få bruk for.

Noen integraler

$$\begin{aligned} I_0(\alpha) &\equiv \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha x^2} dx = \sqrt{\pi/\alpha}, \\ I_2(\alpha) &\equiv \int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-\alpha x^2} dx = -\frac{d}{d\alpha} I_0(\alpha) = \frac{1}{2} \sqrt{\pi} \alpha^{-3/2}, \\ J_n(\alpha) &\equiv \int_0^{\infty} x^n e^{-\alpha x} dx = \frac{n!}{\alpha^{n+1}}. \end{aligned}$$

Laplace-operatoren i kulekoordinater

$$\begin{aligned} \nabla^2 &= \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\hat{\mathbf{L}}^2}{\hbar^2 r^2}, \\ \hat{\mathbf{L}}^2 &= -\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \cot \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right). \end{aligned}$$

Sfæriske harmoniske

$$\left\{ \begin{array}{c} \hat{\mathbf{L}}^2 \\ \hat{L}_z \end{array} \right\} Y_{lm} = \left\{ \begin{array}{c} \hbar^2 l(l+1) \\ \hbar m \end{array} \right\} Y_{lm}, \quad l = 0, 1, 2, \dots, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l;$$

$$\int Y_{l'm'}^* Y_{lm} d\Omega = \delta_{l'l} \delta_{m'm};$$

$$Y_{00} = \sqrt{\frac{1}{4\pi}}, \quad Y_{10} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta, \quad Y_{1,\pm 1} = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{\pm i\phi}.$$

Eulers formler

$$\sin a = (e^{ia} - e^{-ia})/2i, \quad \cos a = (e^{ia} + e^{-ia})/2.$$