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 utrykk 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

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

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,

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

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 energiegenfunksjon med energi E, dvs en løsning av den tidsuavhengige Schrödingerligningen for dette systemet, $\hat{H}\psi(x)=E\psi(x)$.

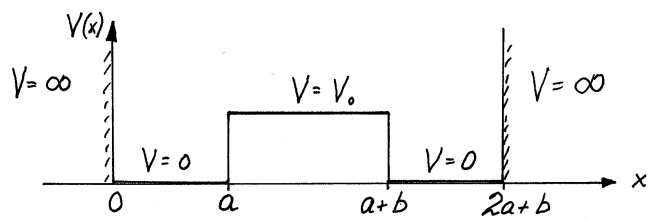
a. Redegjør [med utgangspunkt i ligningen $\hat{H}\psi(x)=E\psi(x)$] for hvordan $\psi(x)$ *krummer*

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

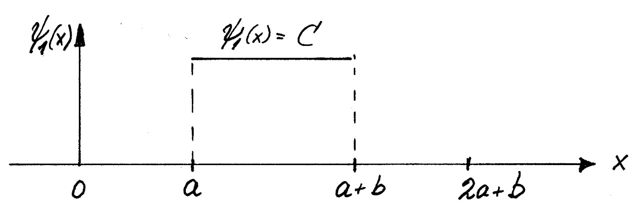
b. Anta at potensialet har formen

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

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



Anta videre at parametrene velges slik at energiegenfunksjonen $\psi_1(x)$ 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 energiegenverdiligningen 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 $b \to 0$.]

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

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

a. Det oppgis at (den normerte) energiegenfunksjonen 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 energiegenverdien, 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

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

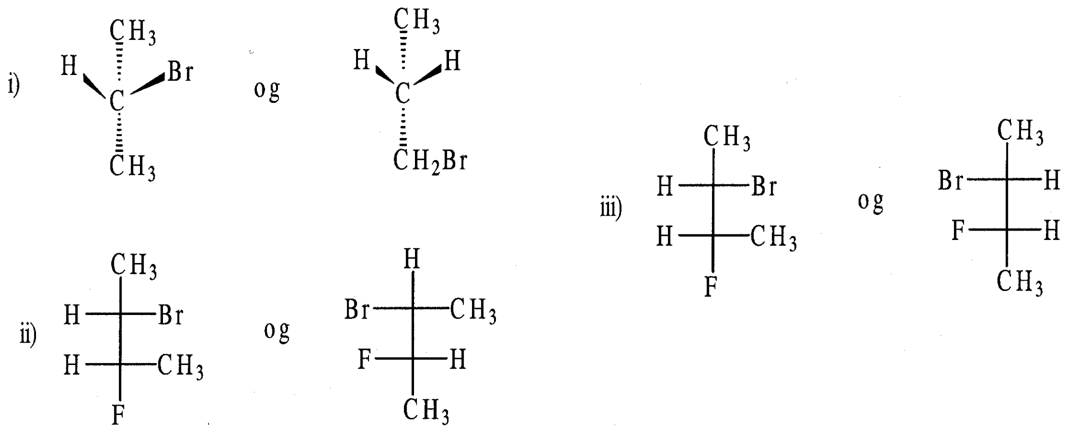
der radialfunksjonen $R_{n1}(r)$ er slik at ψ er en energiegenfunksjon med energi $E_n = E_1/n^2$. Vis at vinkelfunksjonen Y_{p_x} er en egenfunksjon til kvadratet av dreieimpulsoperatoren, $\hat{\mathbf{L}}^2$, og bestem den tilhørende egenverdien.

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

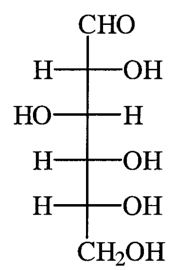
a. Sett opp konstitusjonsisomere av ikke-sykliske etere med bruttoformel C_4H_8O.

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.



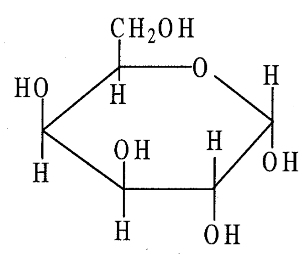
c. Hva skjer når et protein denatureres?

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



Fischerprojeksjonen av D-glukose

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



Formler og uttrykk

Noe av dette kan du få bruk for.

Noen integraler

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

Laplace-operatoren i kulekoordinater

$$
\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} - \frac{\hat{\mathbf{L}}^2}{\hbar^2 r^2},
$$

$$
\hat{\mathbf{L}}^2 = -\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \cot\theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right).
$$

Sfæriske harmoniske

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

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

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

Eulers formler

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