

**TFY4215 Innføring i kvantefysikk. Institutt for fysikk, NTNU.**  
**Løsningsforslag til Test 9.**

**Oppgave 1**

Vi gjenkjenner  $E(x)$  som en dempet svingning, med laveste minimum for  $kx \simeq \pi$  og nest laveste minimum for  $kx \simeq 3\pi$ , og med et lokalt maksimum i mellom, for  $kx \simeq 2\pi$ . Og som dermed er reaksjonens transisjons-tilstand (TS), ved  $x \simeq 2\pi/k = 2\pi/2.0 \text{ \AA} \simeq 3.1 \text{ \AA}$ .

Riktig svar: C.

**Oppgave 2**

Frigjort energi pr reaksjon er  $\Delta E \simeq E(3\pi/k) - E(\pi/k) = E_0 \cdot \exp(-\pi/10) - E_0 \cdot \exp(-3\pi/10) = 0.34 \text{ eV}$ .

Riktig svar: A.

**Oppgave 3**

Aktiveringsenergien er  $E_a \simeq E(2\pi/k) - E(3\pi/k) = E_0 \cdot \exp(-2\pi/10) + E_0 \cdot \exp(-3\pi/10) = 0.92 \text{ eV}$ .

Riktig svar: E.

**Oppgave 4**

Grunntilstandsenergien i hydrogenatomet er  $-13.6 \text{ eV}$ , så  $1 \text{ Ha} = 27.2 \text{ eV}$ .

Riktig svar: C.

**Oppgave 5**

$1 \text{ cal} = 4.184 \text{ J}$  og  $1 \text{ mol} = 6.022 \cdot 10^{23}$  partikler. Dermed er  $1 \text{ kcal/mol}$  det samme som  $4184 \text{ J}$  pr  $N_A = 6.022 \cdot 10^{23}$  partikler, dvs  $6.948 \cdot 10^{-21} \text{ J}$  (pr partikkel). Dette tilsvarer ca  $43.37 \text{ meV}$ , slik at  $1 \text{ Ha} = 627.5 \text{ kcal/mol}$ .

Riktig svar: E.

**Oppgave 6**

$T = E/k_B = 27.2 \cdot 1.6 \cdot 10^{-19} / 1.38 \cdot 10^{-23} \simeq 3.15 \cdot 10^5 \text{ K}$ .

Riktig svar: D.

**Oppgave 7**

$\partial E/\partial x = 4x^3 - 6xy^2 - 4x$  og  $\partial E/\partial y = -6x^2y + 2y$ .

Riktig svar: B.

**Oppgave 8**

$H_{11} = \partial^2 E/\partial x^2 = 12x^2 - 6y^2 - 4$  slik at D må være riktig svar. (Sjekk de andre selv.)

Riktig svar: D.

**Oppgave 9**

I et stasjonært punkt er  $\nabla E = 0$ . Her er  $\partial E/\partial y = 0$  for  $y = 0$  og  $-3x^2 + 1 = 0$ , dvs  $x = \pm 1/\sqrt{3}$ . Videre er  $\partial E/\partial x = 0$  for  $x = 0$  og  $3y^2 = 2(x^2 - 1)$ . Det skulle gi i alt de tre punktene  $(0, 0)$  og  $(\pm 1, 0)$ .

Riktig svar: A.

**Oppgave 10**

I  $(1, 0)$  er  $H_{11} = 8$ ,  $H_{12} = H_{21} = 0$  og  $H_{22} = -4$ . Dermed et sadelpunkt.

Riktig svar: A.