

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

Oppgave 1

En kjemisk reaksjon kan modelleres med energifunksjonen

$$E(x) = E_0 \cos(kx) \exp(-kx/10).$$

Her er $E_0 = 1.0$ eV, $k = 2.0$ pr Å, og x er en reaksjonskoordinat, med $0 < x < 6$ Å. Anta at reaksjonen starter i et lokalt energiminimum og går via en transisjonstilstand (dvs et lokalt energimaksimum) til et globalt energiminimum. Oppgavene 1 - 3 dreier seg om denne modellreaksjonen.

Hva er omtrentlig verdien av x i reaksjonens transisjonstilstand?

- A 2.1 Å
- B 2.6 Å
- C 3.1 Å
- D 3.6 Å
- E 4.1 Å

Oppgave 2

Omtrent hvor mye energi frigjøres (som varme) i reaksjonen?

- A 0.34 eV
- B 0.44 eV
- C 0.54 eV
- D 0.64 eV
- E 0.74 eV

Oppgave 3

Hva er omtrent reaksjonens aktiveringsenergi?

- A 0.52 eV
- B 0.62 eV
- C 0.72 eV
- D 0.82 eV
- E 0.92 eV

Oppgave 4

Energienheten hartree (Ha) tilsvarer (ca) to ganger absoluttverdien av elektronets grunntilstandsenergi i hydrogenatomet. Hvor mye er 1 Ha omregnet til enheten eV?

- A 19.2
- B 23.2
- C 27.2
- D 31.2
- E 34.2

Oppgave 5

Hvor mye er 1 Ha omregnet til enheten kcal/mol?

- A 267.5
- B 357.5
- C 447.5
- D 537.5
- E 627.5

Oppgave 6

Hva er (omtrent) absolutt temperatur T når termisk energi $k_B T$ tilsvarer 1 Ha?

- A 316 K
- B 3160 K
- C 31600 K
- D 316000 K
- E 3160000 K

Oppgave 7

Oppgave 7 – 10:

Anta at du har et system der energien E avhenger av to dimensjonsløse koordinater x og y slik:

$$E(x, y) = x^4 - 3x^2y^2 - 2x^2 + y^2.$$

Hva er ∇E ?

- A $(4x^2 + 4x - 2y)$
- B $(4x^3 - 6y^2x - 4x - 6x^2y + 2y)$
- C $(3x^4 + y^2x - 2xy + y)$
- D $(x - 2y - xy)$
- E $(4y^3 + 2yx + 4 - 2x^2y^2)$

Oppgave 8

Hva er hessianmatrisens matriseelementer?

- A $H_{11} = 8x^2 + 4, H_{12} = H_{21} = -xy, H_{22} = 2y^2 + 2$
- B $H_{11} = 2y + 3, H_{12} = H_{21} = 4y, H_{22} = -2x$
- C $H_{11} = 4x - y + 1, H_{12} = H_{21} = x, H_{22} = 2$
- D $H_{11} = 12x^2 - 6y^2 - 4, H_{12} = H_{21} = -12xy, H_{22} = -6x^2 + 2$
- E $H_{11} = 6x^2 - 4y^2 + 2, H_{12} = H_{21} = 2xy, H_{22} = 2x$

Oppgave 9

Hvilket alternativ angir riktige stasjonære punkter?

- A $(-1, 0), (0, 0), (1, 0)$
- B $(-1, -1), (0, 0), (1, 1)$
- C $(0, 0), (1, 1), (2, 2)$
- D $(-1, 1), (1, -1)$
- E $(0, 0), (1, 2)$

Oppgave 10

Hva er punktet $(1, 0)$?

- A Et sadelpunkt
- B Et globalt minimum
- C Et globalt maksimum
- D Et punkt med stor positiv gradient
- E Et punkt med stor negativ gradient