

Faglig kontakt under eksamen:
Professor Arnljot Elgsæter
Telefon: 73940078

EKSAMEN I FAG DIF4997 POLYMERFYSIKK

Torsdag 21. desember 2000 kl. 0900 - 1500

Tillatte hjelpemidler:

Øgrim og Lian: Størrelser og enheter i fysikk og teknologi.

Barnett and Cronin: Mathematical Formulae.

Rottmann: Matematische Formelsammlung (tysk eller norsk utgave).

B2-Typegodkjent kalkulator med tomt minne og i henhold til liste utarbeidd av NTNU.

Under sensuren tillegges alle oppgaver og delspørsmål i utgangspunktet lik vekt.

OPPGAVE 1

A. Generaliserte koordinater er et sentralt begrep innen klassisk mekanikk. Gjør kort rede for hva som menes med dette begrepet.

Angi to ulike valg av generaliserte koordinater for henholdsvis kule-fjær (bead-spring), nål-fjær (needle-spring) og nålekjede (needle chain) polymermodellene. For et av de to valgene av generaliserte koordinater skal man for hver modell la komponentene til den kartesiske vektoren som gir polymerkjedens massefellespunkt i det kartesiske laboratoriekoordinatsystemet, inngå som et subset av de generaliserte koordinatene.

Det Euclidske vektorrom $V^{(q)}$ utspent av de generaliserte koordinatene for ei gitt nålekjede er et subrom av vektorrommet V^* utspent av de generaliserte koordinatene for samme polymerkjede når de rigide føringene i denne polymermodellen erstattes med fjærer. Gjør rede for hvordan det man i det siste tilfellet kan benytte føringsbetingelsene for nålekjedemodellen til å definere komponentene i det duale/komplimentære vektorrom $V^{(g)}$ til vektorrom $V^{(q)}$. Gi uttrykkene for basevektorene og de resiproke basevektorene for dette systemet.

B. Definer de generaliserte hastigheter og krefter, og den tilhørende mobilitetstensor $\vec{\mu}$ og friksjonstensor $\vec{\zeta}$ for hvert av vektorrommene V^* , $V^{(q)}$ og $V^{(g)}$.

Vis hvordan man kan beregne mobilitetstensoren in vektorrom $V^{(q)}$ når mobilitetstensoren i vektorrom V^* er kjent. Angi hvordan projeksjonsoperatoren \vec{P} er definert og utlede et uttrykk for denne. Vis videre at

$$\vec{\mu}^{\Rightarrow*(q)} = \vec{P}^{\Rightarrow*} \cdot \vec{\mu}^{\Rightarrow*} \cdot \vec{P}^{\Rightarrow*T}.$$

OPPGAVE 2

A. Den kinetiske energien til ei polymer kjede kan skrives

$$\mathcal{K} = \frac{1}{2} \sum_{st=1}^d m_{st}^{(q)} \dot{q}_s \dot{q}_t,$$

hvor d er antall frihetsgrader for polymermodellen, $m_{st}^{(q)}$ er komponentene til den generaliserte massematrisa og \dot{q}_s er de generaliserte hastighetene.

Utleid det analytiske uttrykket for $m_{st}^{(q)}$ når man studerer ei nål-fjær polymerkjede.

B. Sett opp det generelle uttrykket for sannsynlighetstettheten i faserommet for et ensemble av identiske polymerkjeder som befinner seg i termodynamisk likevekt med et omgivende fluid.

Utleid det generelle uttrykket for sannsynlighetstettheten i konfigurasjonsrommet. Følgende integral er nyttig i dette arbeidet:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \exp \left\{ - \sum_{st=1}^d \alpha_{st} x_s x_t \right\} d\vec{x} = \frac{\pi^{d/2}}{\sqrt{|\alpha_{st}|}}.$$

Bruk resultatet fra punkt A til å sette opp sette opp sannsynlighetstettheten i konfigurasjonsrommet for nål-fjær polymerkjeder.

OPPGAVE 3

Sett opp konserveringslikninga i faserommet for et ensemble av polymerkjeder i termodynamisk likevekt med et omgivende fluid. Vis hvordan man ved kontraksjon av denne likninga kan utlede et uttrykk for konserveringslikninga i polymerenes konformasjonsrom.

Vis at når det antas at den generaliserte Brownske krafta er gitt ved uttrykket

$$\mathcal{F}_t^{(B)} := -k_B T \frac{\partial}{\partial q_t} \left(\ln \left[\frac{p(\vec{q}, t)}{\sqrt{|\vec{m}^{(q)}(\vec{q})|}} \right] \right),$$

et Boltzmanns sannsynlighetstetthet en stasjonær løsning av konserveringslikninga i konfigurasjonsrommet.

Ved bruk av konserveringslikninga i konfigurasjonsrommet og det gitt uttrykket for den generaliserte Brownske krafta utled diffusionslikninga (Fokker-Planck likninga) i konfigurasjonsrommet og skriv den på en slik måte at den metriske krafta inngår som et eksplisitt uttrykk.