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 $\beta$, og påvis at $\langle\, E \,\rangle_0$ har et minimum for en viss verdi $(\beta_0)$ av $\beta$. Finn $\beta_0$ 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, $\hat{H}\psi(x) = E\psi(x)$.

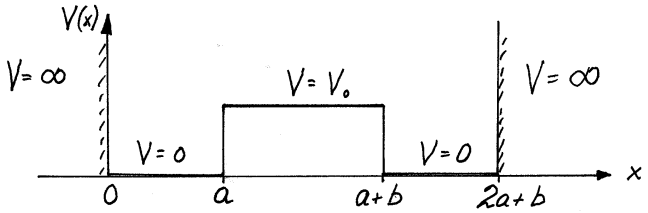
**a.** Redegjør [med utgangspunkt i ligningen $\hat{H}\psi(x) = E\psi(x)$] for hvordan $\psi(x)$ *krummer*

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

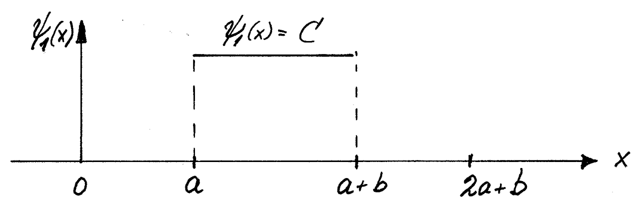
**b.** Anta at potensialet har formen

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

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

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

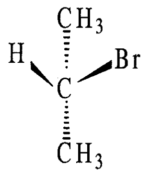
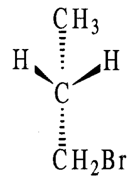
der radialfunksjonen $R_{n1}(r)$ er slik at $\psi$ er en energiegenfunksjon med energi $E_n = E_1/n^2$. Vis at vinkelfunksjonen $Y_{p_x}$ er en egenfunksjon til kvadratet av dreieimpulsoperatoren, $\hat{\mathbf{L}}^2$, og bestem den tilhørende egenverdien.

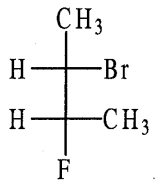
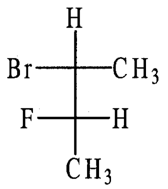
**d.** Anta at observabelen $L_z$ måles når systemet er preparert i tilstanden gitt i pkt. **c**. Hva er de mulige måleresultatene i dette tilfellet, og hva er sannsynlighetene for disse? [Hint: Skriv $Y_{p_x}$ som en lineærkombinasjon av sfæriske harmoniske; jf formelarket.]

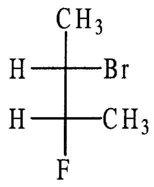
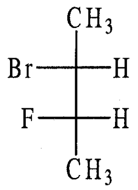
## Oppgave 4

**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.

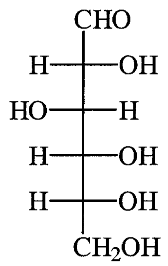
i)  og 

ii)  og 

iii)  og 

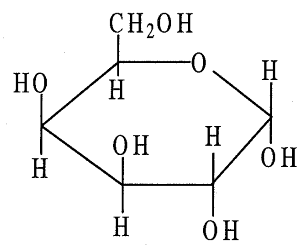
**c.** Hva skjer når et protein denatureres?

**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.



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

**Vedlegg**

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

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

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

$$Y_{00} = \sqrt{\frac{1}{4\pi}}, \quad Y_{10} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta\,, \quad Y_{1,\pm1} = \mp\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta\, e^{\pm i\phi}.$$

### Eulers formler

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