

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 TFY4215 KJEMISK FYSIKK OG KVANTEMEKANIKK

Tirsdag 1. juni 2004
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

En side med uttrykk og formler er vedlagt, samt et skjema med nomenklatur for organiske forbindelser.

Sensuren faller 22. juni 2004.

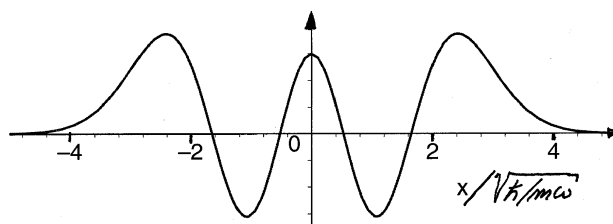
Oppgave 1

En partikkel med masse m beveger seg i et éndimensjonalt symmetrisk potensial, $V(x) = V(-x)$. Vi ser i denne oppgaven på bundne tilstander i et slikt potensial.

a. Angi degenerasjonsgraden til de bundne energinivåene, og gjør rede for symmetriegenskaper og antall nullpunkter for (energieigenfunksjonene for) grunntilstanden, første eksiterte tilstand osv. (Bevis kreves ikke.)

b. Anta i resten av oppgaven at potensialet er harmonisk, $V(x) = \frac{1}{2}kx^2 \equiv \frac{1}{2}m\omega^2x^2$, og la $\psi_n(x)$ være en av energieigenfunksjonene for dette potensialet, med energi E_n . Hva mener vi med *de klassiske vendepunktene*, *klassisk tillatt* og *klassisk forbudte områder* for denne tilstanden? Drøft krumningsegenskapene til $\psi_n(x)$ i disse områdene, med utgangspunkt i den tidsuavhengige Schrödingerligningen.

c.



Figuren viser én av energieigenfunksjonene, $\psi_k(x)$. Angi energien E_k og kvantetallet k for denne tilstanden. (Jf den vedlagte formelsiden.) Hvorfor må alle nullpunktene for en slik oscillator-tilstand ligge mellom de klassiske vendepunktene for vedkommende tilstand? (Hint: Jf krumningsegenskapene.)

d. Anslå hvor de klassiske vendepunktene ligger for den aktuelle tilstanden $\psi_k(x)$, basert på figuren og krumningen til kurven. Beregn hvor disse vendepunktene ligger, ut fra energieigenverdien E_k som ble bestemt i pkt. **c**.

e. La $\psi_n(x)$ være en vilkårlig energiegentilstand for oscillatoren, med energien $E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})$ (der $n = 0, 1, 2, \dots$). Hva er forventningsverdien $\langle x \rangle_n$ av posisjonen x i denne tilstanden? Beregn usikkerheten $(\Delta x)_n$ for denne posisjonen, når det oppgis at forventningsverdien av den potensielle energien er halvparten av energieigenverdien, for alle oscillatortilstandene $\psi_n(x)$: $\langle V \rangle_n = \frac{1}{2}E_n$.

f. Finn forventningsverdien $\langle K \rangle_n$ av den kinetiske energien i tilstanden ψ_n . Beregn usikkerhetsproduktet $(\Delta x)_n(\Delta p_x)_n$ for tilstanden ψ_n , når det oppgis at $\langle p_x \rangle = 0$ for alle bundne energiegentilstander. Hvordan harmonerer resultatet med uskarphetsrelasjonen?

Oppgave 2

En partikkel med masse m beveger seg i et tredimensjonalt harmonisk oscillator-potensial, $V(r) = \frac{1}{2}m\omega^2 r^2$.

a. Vis at Hamilton-operatoren for dette systemet kan skrives som en sum av tre kommuterende operatører,

$$\hat{H} = \hat{H}^{(x)}(x, \hat{p}_x) + \hat{H}^{(y)}(y, \hat{p}_y) + \hat{H}^{(z)}(z, \hat{p}_z),$$

der $\hat{H}^{(x)} = \hat{p}_x^2/2m + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$, osv. De simultane egenfunksjonene til de fire operatorene \hat{H} , $\hat{H}^{(x)}$, $\hat{H}^{(y)}$ og $\hat{H}^{(z)}$ er produkter av ordinære éndimensjonale oscillator-egenfunksjoner:

$$\left\{ \begin{array}{c} \hat{H} \\ \hat{H}^{(x)} \\ \hat{H}^{(y)} \\ \hat{H}^{(z)} \end{array} \right\} \psi_{n_x, n_y, n_z} = \left\{ \begin{array}{c} E \\ E^{(x)} \\ E^{(y)} \\ E^{(z)} \end{array} \right\} \psi_{n_x, n_y, n_z};$$

$$\psi_{n_x, n_y, n_z}(x, y, z) \equiv \psi_{n_x}(x) \psi_{n_y}(y) \psi_{n_z}(z).$$

$\psi_{n_x}(x)$ osv finner du vha den vedlagte formelsiden. Skriv ned egenverdiene $E^{(x)}$, $E^{(y)}$, $E^{(z)}$ og energien E for disse tredimensjonale oscillatortilstandene ψ_{n_x, n_y, n_z} uttrykt ved kvantetallene n_x , n_y og n_z . Hvorfor er alle disse funksjonene ψ_{n_x, n_y, n_z} ortogonale?

b. Angi energien E for grunntilstanden, og skriv ned den tilhørende egenfunksjonen. Finn også energien til første eksiterte nivå og degenerasjonsgraden for dette nivået, og skriv ned det tilhørende settet med egenfunksjoner. Hva er degenerasjonsgraden for 2. eksiterte nivå?

c. Siden potensialet $V(r)$ er kulesymmetrisk, kommuterer Hamilton-operatoren \hat{H} som kjent også med kvadratet $\hat{\mathbf{L}}^2$ av dreieimpulsoperatoren (og med hver av komponentene av $\hat{\mathbf{L}}$). Først et generelt spørsmål om dreieimpuls: Hvor mange lineært uavhengige egenfunksjoner har operatoren $\hat{\mathbf{L}}^2$ for et gitt dreieimpulskvantetall l ?

Så til den tredimensjonale oscillatoren: Hva er dreieimpulsen til grunntilstanden? Vis at energieigenfunksjonene for første eksiterte energinivå alle er egenfunksjoner til $\hat{\mathbf{L}}^2$ med én og samme egenverdi og bestem l -kvantetallet som svarer til denne egenverdien. [Hint: Skriv disse energieigenfunksjonene som produkter av en radialfunksjon og et standard-sett av vinkelfunksjoner; jf formelsiden.]

d. Anta at partikkeltypen i denne oppgaven er et fermion med spinn $\frac{1}{2}$, og at vi har flere slike (identiske) fermioner, som alle beveger seg i det samme potensialet $V(r) = \frac{1}{2}m\omega^2 r^2$ (dvs at fermionene ikke vekselvirker med *hverandre*). Hvor mange slike fermioner blir det "plass til" i de to laveste energinivåene for denne tredimensjonale oscillatoren? Forklar hvordan sannsynlighetstetthetene for de aktuelle tilstandene resulterer i en total partikkel-tetthet som er kulesymmetrisk.

Oppgave 3

a. Elektronkonfigurasjonene til (de nøytrale) magnesium- og fluor-atomene angis som henholdsvis $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2$ og $1s^2 2s^2 2p^5$. Forklar kort hva dette betyr. Angi tilsvarende elektronkonfigurasjonene for ionene Mg^{++} og F^- .

b. Forklar hvorfor elektrontetthetene for ionene Mg^{++} og F^- begge er kulesymmetriske. Molekylet MgF_2 kan betraktes som et Mg^{++} -ion bundet til to F^- -ioner. Hva blir ut fra dette strukturen til dette molekylet (dvs hvordan ligger de tre kjernenes likevektsposisjoner i forhold til hverandre)?

c. De bundne energieigenfunksjonene for et elektron i Coulomb-potensialet

$$V(r) = -e^2/(4\pi\epsilon_0 r) = -\hbar^2/(m_e a_0 r)$$

har som kjent energiene

$$E_n = -\frac{\hbar^2}{2m_e a_0^2} \frac{1}{n^2} \quad (n = 1, 2, \dots).$$

For en energieigenfunksjon $\psi_{nlm} = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta, \phi)$ er det imidlertid en nedre grense på n for et gitt dreieimpulskvantetall l . Vis at n ikke kan være mindre enn eller lik l .

[Hint: Energieigenverdiene bestemmes av en éndimensjonal Schrödingerligning for funksjonen $rR_{nl}(r)$, med et effektivt potensial

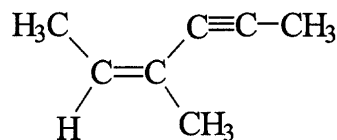
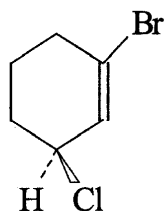
$$V_{\text{eff}}^l(r) = A/r^2 - B/r,$$

der $A = \hbar^2 l(l+1)/2m_e$ og $B = \hbar^2/(m_e a_0)$. Beregn minimalverdien av dette potensialet.]

Oppgave 4

a. Tegn tre konstitusjonsisomere (strukturisomere) former av alkoholen $C_4H_{10}O$. Den ene skal være primær, den andre sekundær og den tredje tertiær. Hva dannes ved oksidasjon av den sekundære alkoholen?

b. Skriv IUPAC-navn for følgende forbindelser (husk å angi stereokjemien):



c. Gi en redegjørelse for hva som menes med:

- (i) Enantiomere (Identifiser med egnede struktureksempler)
- (ii) Diastereomere (Identifiser med egnede struktureksempler)

d. Redegjør for primær-, sekundær- og tertiærstrukturen til et protein.

e. Hvor mange enantiomere par finnes for en ketopentose? Tegn disse. Er D-glukose og L-glukose epimere? Forklar.

f. Sett opp strukturen til polynukleotidet '5-GAT-3'. (Kjemisk formel for basene er ikke nødvendig.)

Formler og uttrykk

Vedlegg 1

Noe av dette kan du få bruk for.

Éndimensjonal harmonisk oscillator

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2\right) \psi_n(x) = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)\psi_n(x); \quad (\psi_n, \psi_k) = \delta_{nk};$$

$$\psi_0(x) = C_0 e^{-m\omega x^2/2\hbar}, \quad C_0 = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4};$$

$$\psi_1(x) = C_0 \sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}} x e^{-m\omega x^2/2\hbar}, \quad \psi_2(x) = \frac{C_0}{2} \left(\frac{2m\omega}{\hbar} x^2 - 1\right) e^{-m\omega x^2/2\hbar}, \dots$$

Laplace-operatoren og dreieimpulsoperatører i kulekoordinater

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

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

$$\hat{L}_x = \frac{\hbar}{i} \left(-\sin \phi \frac{\partial}{\partial \theta} - \cot \theta \cos \phi \frac{\partial}{\partial \phi} \right), \quad \hat{L}_y = \frac{\hbar}{i} \left(\cos \phi \frac{\partial}{\partial \theta} - \cot \theta \sin \phi \frac{\partial}{\partial \phi} \right).$$

Vinkelfunksjoner

$$\left\{ \begin{array}{l} \hat{\mathbf{L}}^2 \\ \hat{L}_z \end{array} \right\} Y_{lm} = \left\{ \begin{array}{l} \hbar^2 l(l+1) \\ \hbar m \end{array} \right\} Y_{lm}, \quad l = 0, 1, 2, \dots; \quad \int Y_{l'm'}^* Y_{lm} d\Omega = \delta_{l'l} \delta_{m'm};$$

$$Y_{00} = \sqrt{\frac{1}{4\pi}}, \quad Y_{10} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \frac{z}{r} \equiv Y_{pz};$$

$$Y_{px} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \frac{x}{r} = \frac{1}{\sqrt{2}}(Y_{1,-1} - Y_{11}), \quad Y_{py} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \frac{y}{r} = \frac{i}{\sqrt{2}}(Y_{11} + Y_{1,-1}).$$

Eulers formler

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

Usikkerhet

$$\Delta A = \sqrt{\langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle}.$$