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, eller 97012355

EKSAMEN I TFY4215
KJEMISK FYSIKK OG KVANTEMEKANIKK

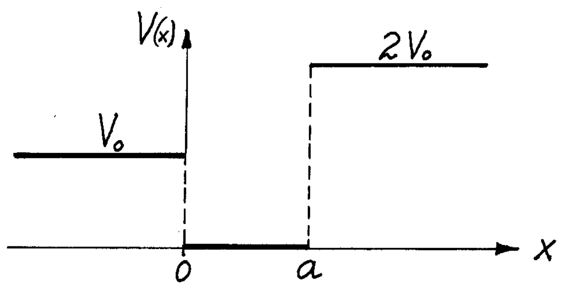
Mandag 23. mai 2005
kl. 09.00 - 13.00

Tillatte hjelpemidler: Godkjent kalkulator
Rottmann: Matematisk formelsamling;
Øgrim & Lian: Størrelser og enheter i fysikk og teknikk, eller
Lian og Angell: Fysiske størrelser og enheter;
Aylward & Findlay: SI Chemical Data.

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

Sensuren faller 13. juni 2005.

Oppgave 1



En partikkel med masse m befinner seg i et éndimensjonalt potensial

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & \text{for} \quad -\infty < x < 0, \qquad (V_0 > 0) \\ 0 & \text{for} \quad 0 < x < a, \qquad (a > 0) \\ 2V_0 & \text{for} \quad a < x < \infty. \end{cases}$$

For visse verdier av "brønn-vidden" a har dette systemet en energiegenfunksjon $\psi_E(x)$ som for $x < 0$ har formen $\psi_E(x) = C =$ konstant. I denne oppgaven antar vi at a har én av disse verdiene.

a. Vis ved hjelp av den tidsuavhengige Schrödingerligningen at energiegenverdien for tilstanden $\psi_E(x)$ er $E = V_0$. Angi hvordan denne energiegenfunksjonen vil krumme i forhold til x-aksen i områdene $0 < x < a$ og $a < x < \infty$. Den generelle løsningen av den tidsuavhengige Schrödingerligningen for området $-\infty < x < 0$, hvor $E = V$, er egentlig $Bx + C$. Hvorfor må vi ha $B = 0$ for energiegenfunksjonen $\psi_E(x)$?

b. Angi kontinuitetsbetingelsene som en energiegenfunksjon må oppfylle (generelt) for et endelig éndimensjonalt potensial $V(x)$. Bruk (bl.a) disse betingelsene for $x = 0$ til å vise at $\psi_E(x)$ må ha formen $C \cos kx$ for $0 < x < a$. Her skal k uttrykkes ved de oppgitte størrelsene.

c. Vis videre at $\psi_E(x)$ må ha formen De^{-kx} for $a < x < \infty$, der k har samme verdi som i pkt. **b**. Vis også at a-verdiene nevnt innledningsvis er bestemt av betingelsen

$$\tan ka = 1.$$

d. Bestem den minste a-verdien, a_1, som oppfyller betingelsen $\tan ka = 1$, og skissér kvalitativt $\psi_E(x)$ for dette tilfellet. Argumentér for at denne energiegenfunksjonen $\psi_E(x)$ beskriver en ubundet tilstand. Finn tallverdien av a_1 for tilfellet $V_0 = 0.1$ Rydberg$=$ $0.1\,\hbar^2/(2m_e a_0^2)$ og $m = 10\,m_e$.

e. Anta at a er 17 ganger så stor som den minste a-verdien som oppfyller betingelsen $\tan ka = 1$ (dvs $a = 17\,a_1$). Hvor mange bundne energiegentilstander har en da for potensialet $V(x)$? Begrunn svaret.

Oppgave 2

En partikkel med ladning $-e$ og masse m_1 beveger seg i feltet fra en kjerne med ladning Ze og masse M. Det oppgis at grunntilstanden beskrives av en energiegenfunksjon på formen $\psi = Ce^{-r/a}$.

a. Bruk den tidsuavhengige Schrödingerligningen til å vise at $a = a_0(m_e/m)(1/Z)$, der a_0 er Bohr-radien, m_e er elektronmassen og m er den reduserte massen for dette to-partikkel-systemet. Finn samtidig energien E for grunntilstanden, uttrykt bl.a ved Rydberg-energien $\hbar^2/(2m_e a_0^2)$.

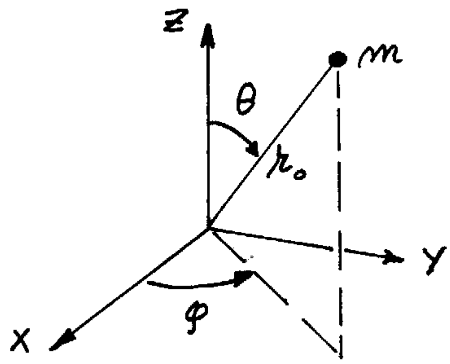
b. Hvor stor blir a

(i) når kjernen nevnt innledningsvis er et proton (med masse $m_p \approx 1836\,m_e$) og partikkelen med ladning $-e$ er et antiproton (med masse m_p),

(ii) når kjernen er en ${}^7_3$Li-kjerne (med 3 protoner og 4 nøytroner og masse $M \approx 7\,m_p$) og partikkelen med ladning $-e$ er et π^--meson med masse $m_\pi \approx 273\,m_e$.

Anta at det nevnte π-mesonet får selskap av to elektroner, slik at det resulterende "atomet" blir nøytralt. Om vi ser bort fra den endelige levetiden til π-mesonet ($\sim 10^{-8}$ s), vil dette atomet kjemisk oppføre seg veldig likt et heliumatom. Forklar hvorfor.

Oppgave 3



I denne oppgaven betraktes en fri rotator, der en partikkel med masse m beveger seg fritt på en kuleflate med radius r_0.

a. Ifølge klassisk mekanikk er partikkelens energi $E = \mathbf{L}^2/(2mr_0^2)$, der $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$ er partikkelens banedreieimpuls. Hva er da Hamilton-operatoren for denne partikkelen? Angi energinivåene. Angi også degenerasjonsgraden (antall energiegentilstander) for de enkelte energinivåene.

b. Ifølge målepostulatet vil en måling av en observabel gi en av de mulige egenverdiene og etterlate systemet i den egentilstanden som svarer til den målte egenverdien. Anta at en måling av observablene $\mathbf{L}^2$ og L_x etterlater rotatoren i en tilstand beskrevet ved vinkelfunksjonen

$$X(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \sin\theta \cos\phi.$$

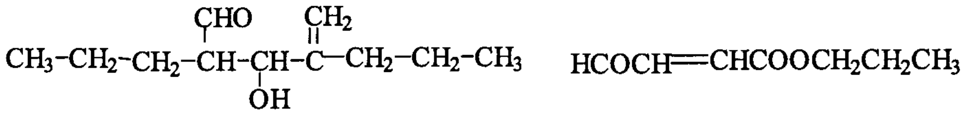
Hva er måleresultatene for $\mathbf{L}^2$ og L_x ved denne målingen? (Begrunn svarene ved regning.)

c. Forklar *bakgrunnen* for at $\mathbf{L}^2$ kan ha en skarp verdi samtidig med L_x (eventuelt samtidig med en annen komponent av $\mathbf{L}$). Forklar også hvorfor observabelen L_z ikke kan ha en skarp verdi når systemet er preparert i tilstanden $X(\theta, \phi)$. Det er selvsagt ingen ting i veien for å *måle* L_z når systemet er preparert i tilstanden $X(\theta, \phi)$. Beregn forventningsverdien av L_z for denne tilstanden.

d. Vis at tilstanden $X(\theta, \phi)$ er ortogonal på tilstanden Y_{10} (se formelarket). Hva er da de mulige måleresultatene for L_z (når systemet er preparert i tilstanden $X(\theta, \phi)$)? Bruk dette samt verdien av $\langle L_z \rangle$ til å bestemme sannsynlighetene for disse måleresultatene.

Oppgave 4

a. Sett opp IUPAC-navn for de to forbindelsene:

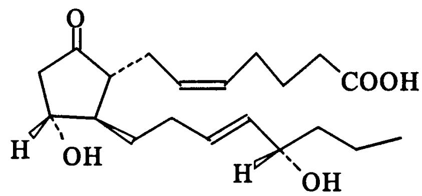


b. Sett opp konstitusjonsformlene for: m-klorbensosyre, N-metylbutanamid og trans-1-etyl-4-isopropylsykloheksan.

c. Vis med et struktureksempel hva som menes med glykosidisk binding.

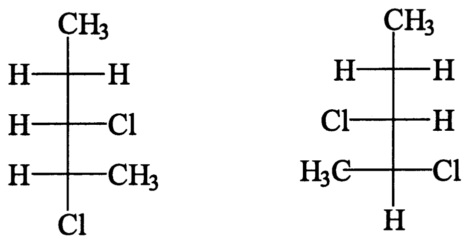
d. Beskriv de kjemiske forskjellene mellom DNA og RNA.

e. Gitt følgende forbindelse:



Merk de kirale (stereogene) C-atomene med * .
Benevn hvert kiralt senter med R eller S.
Angi for hver av dobbeltbindingene om de er cis eller trans.

f. Hvilken stereokjemisk sammenheng er det mellom følgende strukturpar:



Begrunn svaret.

Formler og uttrykk **(Noe av dette kan du få bruk for.)** **Vedlegg 1**

Litt elektrostatikk

$$V = \frac{q_1 q_2}{4\pi\epsilon_0 r} \qquad \text{(Coulomb-potensialet);}$$

$$\mathcal{E}(r) = \frac{Q(r)}{4\pi\epsilon_0 r^2} \qquad (Q(r) \text{ ladn. innenfor radien } r\text{, for kulesymmetrisk ladn.-tetthet).}$$

Noen konstanter

$$a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{m_e e^2} \approx 0.529 \cdot 10^{-10}\ \text{m} \qquad \text{(Bohr-radien);}$$

$$\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar c} \approx \frac{1}{137.0360} \qquad \text{(finstrukturkonstanten);}$$

$$\tfrac{1}{2}\alpha^2 m_e c^2 = \frac{\hbar^2}{2m_e a_0^2} \approx 13.6\ \text{eV} \qquad \text{(Rydberg-energien).}$$

Relativbevegelse for to-partikkel-system

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\mathbf{r})\right]\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}), \qquad m = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \quad \text{(redusert masse).}$$

Laplace-operatoren og dreieimpulsoperatorer i kulekoordinater

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

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

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

$$[\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{L}_z] = 0, \qquad [\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar\hat{L}_z, \quad \text{osv.}$$

Vinkelfunksjoner

$$\left\{\begin{array}{c}\hat{\mathbf{L}}^2 \\ \hat{L}_z\end{array}\right\} Y_{lm} = \left\{\begin{array}{l}\hbar^2 l(l+1) \\ \hbar m\end{array}\right\} Y_{lm}\,, \quad l = 0, 1, 2, \ldots; \qquad \int_0^{2\pi} d\phi \int_{-1}^{1} d(\cos\theta) Y^*_{l'm'} Y_{lm} = \delta_{l'l}\delta_{m'm};$$

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

Eulers formler

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