

25

Kvanttikemian loppukoe 28.8.2020

9:00 - 13:00
B409

1. Hyväksyttävällä Schrödingerin yhtälön aaltofunktiolla on tiettyjä ominaisuuksia. Mitä ne ovat ja miksi ne ovat, mitä ne ovat?

Mitkä seuraavista funktioista eivät voi olla hyväksyttäviä aaltofunktioita? Perustele vastaukset huolellisesti.

- a) $\psi = x$, $x \geq 0$ ja $\psi = 0$ muualla
- b) $\psi = x^2$
- c) $\psi = e^{-|x|}$
- d) $\psi = e^{-x}$
- e) $\psi = \cos x$
- f) $\psi = \sin|x|$
- g) $\psi = e^{-x^2}$
- h) $\psi = 1-x^2$, $-1 \leq x \leq 1$, ja $\psi = 0$ muualla.

2. a) Käsittele lyhyesti ajan käsitettä kvanttimekaniikassa.

b) Kaksiatomisen molekyylin pyörimistä tasomaisella pinnalla voidaan mallintaa jäykkänä tasomaisena pyörijänä, jonka sidospituus on r . Ajanhetkellä $t = 0$ systeemiä kuvaava aaltofunktion

on $\Psi(\phi, t = 0) = \sqrt{\frac{4}{3\pi}} \cos^2 \phi$. Osoita, että aaltofunktio normittuu. Mitä arvoja ja millä

todennäköisyydellä kulmaimpulssimomentti saa? Mikä on kulmaimpulssimomentin odotusarvo? Ovatko edellä mainitut todennäköisyydet ajasta riippumattomia, kun aaltofunktio muuttuu muodosta $\Psi(\phi, t = 0)$ muotoon $\Psi(\phi, t)$? Perustele vastaukset. (Vihje: hyödynnä tehtäväpaperin lopussa olevaa Eulerin kaavaa).

3. a) Spinnimatriisit ovat $S_x = \frac{1}{2}\hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$, $S_y = \frac{1}{2}\hbar \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$, $S_z = \frac{1}{2}\hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$. Osoita, että $S_+^2 = 0$ ja $S_-^2 = 0$. Selitä tulos.

b) Osoita, että kaksielektonisysteemin spinfunktiot $\frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha_1\beta_2 + \beta_1\alpha_2)$ ja $\frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha_1\beta_2 - \beta_1\alpha_2)$ ovat ortogonaalisia. Onko kyseisellä systeemillä muita mahdollisia spinfunktioita? Jos vastaus on positiivinen, niin mitä ne ovat?

c) Tarkastellaan d -elektronia tilassa, jossa $j = 5/2$ ja $m_j = 3/2$. Esitä kytkeytynyt esitys kytkeytymättömän esityksen avulla.

4. a) Käsittele lyhyesti ensimmäisen kertaluvun ajasta riippumatonta häiriöteoriaa.

b) Jäykkä molekyyli, jonka hitausmomentti on I ja dipolimomentti μ , pyörii tasossa siten, että pyörimisakseli kulkee painopisteen kautta. Vaikuttakoon systeemiin lisäksi tasainen sähkökenttä F , joka häiritsee pyörijää siten, että Hamiltonin operaattoriin pitää lisätä häiriötermi $-\mu F \cos \varphi$, missä φ on pyörijään liittyvä kulmamuuttuja. Mikä on pyörijän energian lauseke häiritsemättömälle ja häiritylle systeemille, kun käytetään hyväksi ensimmäisen kertaluvun häiriöteoriaa.

5. Tarkastellaan molekyyli-ioneja H_2^+ ja H_2^- sekä molekyyliä H_2 . Mitkä ovat niiden

elektronikonfiguraatiot? Mitä ovat perustilojen termsymbolit ja sidosluvut? Mitä voit sanoa

yhdisteiden pysyvyydestä? Mitkä ovat avoin- ja mitkä suljettukuorisia systeemejä? Jos ajatellaan kvanttikemiallisia elektroniverholaskuja, niin miten avoin- ja suljettukuoristen systeemien käsittely saattaisi erota toisistaan?

$$e^{\pm i\alpha} = \cos \alpha \pm i \sin \alpha$$

$$\hat{l}_{\pm} |l, m_l\rangle = \hbar [l(l+1) - m_l(m_l \pm 1)]^{\frac{1}{2}} |l, m_l \pm 1\rangle$$