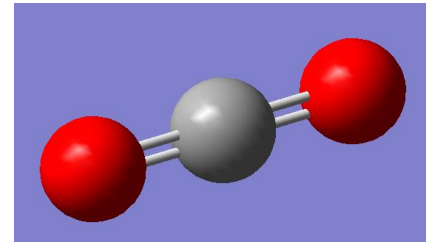
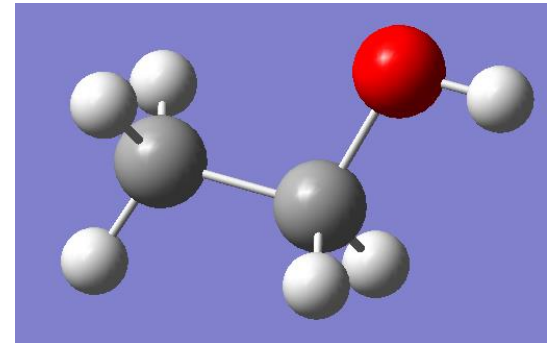
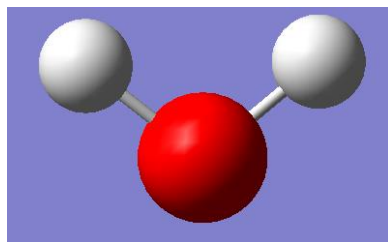


## Molekyler – noen eksempler på bruk av kvantefysikk i kjemien

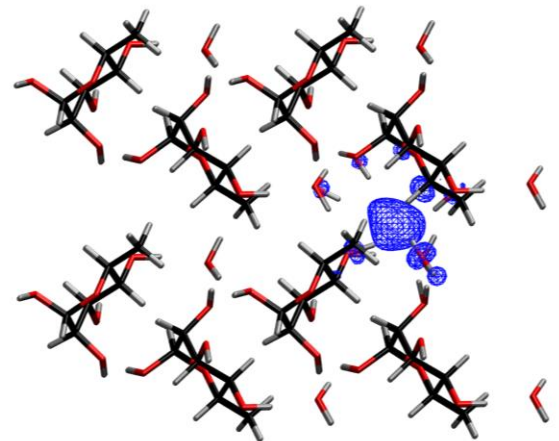
Kommer til å bruke en del av første time på å vise dere noen praktiske anvendelser av den kvantefysikken dere har lært hittil. Resten av tida bruker vi på oppgaver og diskusjon.



*Molekylvibrasjoner* – og hvordan man kan beregne vibrasjonsenergien ved å betrakte det som en harmonisk oscillator. Hva kan vibrasjonsenergien si oss? (drivhuseffekt, kontrast i MR-bilder, ...)



*Andre eksempler* på hva molekylberegninger brukes til: Hydrogenatomkjerner som «vandrer» langs molekylkjeder og elektroner som blir fanget inni sukkerkrystaller.



Vi gjør oppgave **4.2 i Griffiths** som har vært gitt på oblig tidligere år og handler om 3D partikkel i boks, og vi må forstå noen «enkle» men *viktige konsepter* for å få den til!

Bruker siste timen på denne, så dere rekker å se på oppgaven først.

**Oppgave 1** Bruk separasjon av variable teknikken i *kartesiske* koordinater til å løse det kubiske uendelig brønn/boks potensialet:

$$V(x, y, z) = \begin{cases} 0, & 0 < x, y, z < a \\ \infty, & \text{ellers.} \end{cases} \quad (1)$$

- Finne de stasjonære tilstandene og de korresponderende energiene.
- Kalle de distinkte energiene  $E_1, E_2, E_3, \dots$ , ordnet etter stigende energi. Finn  $E_1, E_2, E_3, E_4, E_5$  og  $E_6$ . Bestem degenerasjonsgraden til de ulike energiene (altså, antall tilstander med samme energi). *Kommentar:* I endimensjonale problemer opptrer ikke degenererte bundne tilstander (se Oppgave 2.45 i Griffiths), men i tre dimensjoner er de vanlige.
- Hva er degenerasjonsgraden til  $E_{14}$ , og hvorfor er dette tilfellet interessant?