

Tentamen TC1 18 januari 2008, 9-12uur, zaal C1 (Gorlaeus).**1. Basisinzichten**

Geef van de onderstaande beweringen aan of ze waar of niet waar zijn (er hoeven geen argumenten gegeven te worden; het mag wel, maar doe dit pas op het moment dat je klaar bent met de rest van de tentamen):

- (a) Het is onmogelijk om het golfkarakter van electronen waar te nemen met behulp van één-spleet diffractie-experimenten. Dit kan alleen door tweespleet diffractie-experimenten uit te voeren.
- (b) Volgens Planck en Einstein zijn er geen aanwijzingen te vinden dat electromagnetische golven zich quantummechanisch gedragen. Alle aspecten van electromagnetische golven kunnen volledig uitgelegd worden op basis van de klassieke theorie van Maxwell.
- (c) Omdat het volgens de wetten van de quantummechanica in het algemeen alleen mogelijk is de *waarschijnlijkheid* waarmee een bepaald meetresultaat gevonden wordt te voorspellen, kunnen wij met zekerheid stellen dat een quantummechanisch systeem *niet altijd volledig* beschreven kan worden door een complex kwadratisch integreerbare functie (de golf functie).
- (d) Er zijn een aantal bekende voorbeelden waar bij een meting aan een quantummechanisch systeem er een eindige kans bestaat dat er een individuele meetwaarde gevonden wordt die niet een eigenwaarde is van de desbetreffende hermitische operator.
- (e) Wordt bij meting van een observabele A de eigenwaarde a_i gevonden, dan bevindt het systeem zich onmiddellijk na de meting in de bijbehorende eigentoestand ψ_i . In het algemeen betekent dit dat het volgens de quantummechanica onmogelijk is om bij een meting het systeem niet te verstoren.
- (f) Omdat het volgens de wetten van de quantummechanica in het algemeen alleen mogelijk is de *waarschijnlijkheid* waarmee een bepaald meetresultaat gevonden wordt te voorspellen, kunnen wij met zekerheid stellen dat het gedrag van de golf functie in de tijd niet te voorspellen is.

- (g) Er zijn voorbeelden te bedenken waar de energie in een quantummechanisch systeem niet gequantiseerd is.
- (h) De waarschijnlijkheid van tunnelen door een barrière is alleen afhankelijk van de breedte en de hoogte van de barrière.
- (i) De energie van het electron in het waterstofatoom is hetzelfde voor de 4s en 3d eigenfuncties.
- (j) Eén van de redenen waarom de Born-Oppenheimer benadering vaak goed werkt is het grote verschil in de snelheid waarmee de kernen en electronen bewegen.
- (k) Er zijn geen quantummechanische modelsystemen te bedenken waar de zogenaamde orbitaalbenadering exacte oplossingen kan verschaffen.
- (l) Door de regels van de MO-LCAO methode toe te passen kan men laten zien dat de HOMO van een heteronucleair twee-atomig molecuul altijd bindend moet zijn.
- (m) Door de regels van de MO-LCAO methode toe te passen kan men laten zien dat de gevonden MO's *altijd of* bindend *of* antibindend moeten zijn.
- (n) In een lineaire expansie van atomaire (of fragment) orbitalen zullen alleen combinaties waar of alle expansiecoëfficiënten positief zijn of alle expansiecoëfficiënten negatief zijn tot bindende moleculaire orbitalen leiden.
- (o) De wetten van de quantummechanica zijn speciaal ontworpen voor gevallen waar de typische De Broglie golflengte van de samenstellende deeltjes in een systeem van dezelfde grootte is als de systeemgrootte. Ze gelden dus niet voor macroscopische verschijnselen want daarop is de klassieke mechanica van toepassing.

Totaal vraag 1: 20 punten, 2.5 punt aftrek per niet juist antwoord.

2. Operatoren en eigenfuncties

Gegeven de twee operatoren $\hat{A} = \left(z^2 + \frac{d}{dz} \right)$ en $\hat{B} = \frac{d}{dz}$, en de

functie $f(z) = 6 + z + z^2$.

- Bereken (a) $(\hat{A} + \hat{B})f(z)$ (3 punten)
- (b) $\hat{A}\hat{B}f(z)$ (4 punten)
- (c) $\hat{B}\hat{A}f(z)$ (4 punten)

Beantwoord de vraag

- (d) Kan je functies vinden die eigenfuncties van zowel \hat{A} als \hat{B} zijn? Waarom wel/niet? (4 punten)

Totaal vraag 2: 15 punten.

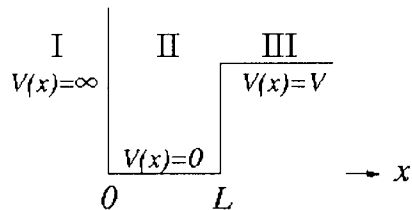
3. **De Hamiltoniaan en de Born-Oppenheimer benadering**

- (a) Geef de *volledige* Hamiltoniaan voor een waterstofmolecuul (geef expliciete uitdrukkingen voor de kinetische en potentiële energie termen). Maak een duidelijke schets van het systeem. (5 punten)
- (b) Welke termen worden weggelaten uit de volledige Hamiltoniaan als we de elektronische Schrödinger vergelijking binnen de Born-Oppenheimer benadering beschouwen? En welk term is een constante? (5 punten)

Totaal vraag 3: 10 punten.

4. **Deeltje in potentiaal put**

Voor een potentiaal (zie ook figuur) geldt $V(x) = V$ voor $x > L$ (gebied III), $V(x) = 0$ voor $0 \leq x \leq L$ (gebied II), en $V(x) = \infty$ voor $x < 0$ (gebied I).



- (a) Stel de Schrödinger vergelijking op voor een deeltje met massa m onder invloed van deze potentiaal. Doe dit apart voor gebied II en III. (5 punten)

De oplossing van de Schrödinger vergelijking is voor de energie $0 < E < V$ in gebied II en III steeds een lineaire combinatie van exponentiële functies met positieve en negatieve exponent. Het deeltje kan zich niet in gebied I bevinden:

$$\psi^I(x) = 0$$

$$\psi^{II}(x) = A^I e^{-ikx} + B^I e^{ikx}$$

$$\psi^{III}(x) = A'' e^{-\kappa x} + B'' e^{\kappa x}$$

- (b) Laat door substitutie in de Schrödinger vergelijking zien wat de relatie tussen k en de energie E en de massa m van het deeltje is. En wat is de relatie tussen κ en de energie E en de massa m ? (5 punten)
- (c) Voor het gegeven energie interval is de constante B'' nul. Waarom? (5 punten)

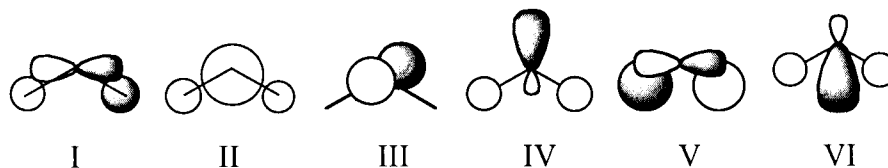
Toepassen van de voorwaarden van continuïteit van de eigenfunctie ter plekke van $x = 0$, en van continuïteit van de eigenfunctie en zijn eerste afgeleide ter plekke van $x = L$ levert drie vergelijkingen op.

- (d) Geef deze drie vergelijkingen. (5 punten)
- (e) Geef een schets van de (genormaliseerde) golffunctie met de laagste energie. Verklaar kort. (5 punten)
- (f) Schets ook de (genormaliseerde) golffunctie met de laagste energie in het geval dat $V(x) = \infty$ voor $x < 0$ en $x > L$ (gebieden I en III) en $V(x) = 0$ voor $0 \leq x \leq L$ (gebied II). Is de laagste energie voor een deeltje in de potentiaal, die hierboven gegeven is [$V(x) = V$ voor $x > L$ (gebied III), $V(x) = 0$ voor $0 \leq x \leq L$ (gebied II), en $V(x) = \infty$ voor $x < 0$ (gebied I)] groter, gelijk of kleiner dan voor een deeltje in een potentiaal met oneindige diepte [$V(x) = \infty$ voor $x < 0$ en $x > L$ (gebieden I en III) en $V(x) = 0$ voor $0 \leq x \leq L$ (gebied II)]? Verklaar kort. (5 punten)

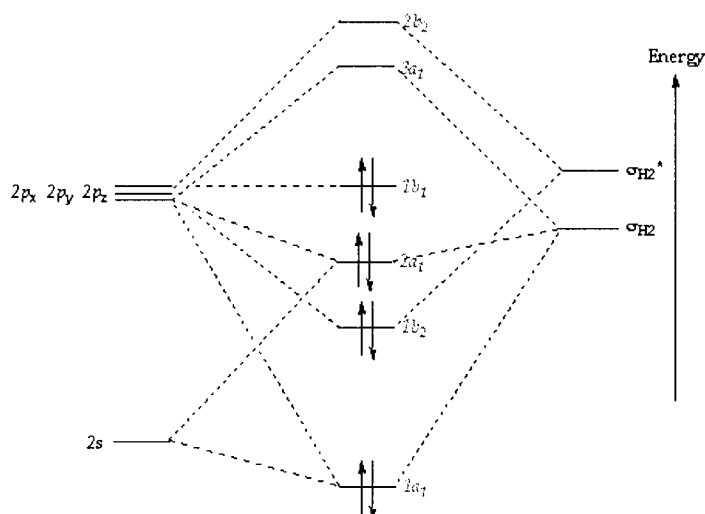
Totaal vraag 4: 30 punten.

5. **MO-LCAO theorie: Het water molecuul**

Op basis van kwalitatief moleculaire orbitaal theorie kunnen de volgende moleculaire orbitalen voor het watermolecuul gemaakt worden:



Neem aan dat het onderstaande moleculaire orbitaal diagram een goede beschrijving van het watermolecuul geeft:



Beantwoord de volgende vragen en geef duidelijk je argumenten aan:

- Plaats de zes moleculaire orbitalen I-VI in het moleculaire orbitaal diagram. (5 punten)
- Welke van de orbitalen I-VI zijn bindend (bonding), niet-bindend (non-bonding), en antibindend (antibonding)? (5 punten)
- Op basis van het bovenstaande moleculaire orbitaal diagram, wat zal er gebeuren met de O-H afstand(en) als je een electron toevoegt? En wat gebeurt er als je een electron weghaalt? (5 punten)
- Welke van de bezette orbitalen dragen bij tot het ontstaan van een gebogen vorm van water? En welke van de bezette orbitalen “proberen” er een lineair molecuul van te maken? (5 punten)
- Wat gebeurt er met de vorm van water als je een electron exciteert van de HOMO naar de LUMO? (5 punten)

Totaal vraag 5: 25 punten.

Totaal tentamen: 100 punten. (55 punten minimaal nodig voor voldoende).