

**Tentamen TC1 10 januari 2013, 9.00-12.00 uur, zaal C2 (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 het tentamen):

- (a) In een twee-spleten diffractie experiment met electronen is de totale waarschijnlijkheid  $P_{12}(x)$  dat een electron op plaats  $x$  komt gegeven door  $P_{12}(x) = P_1(x) + P_2(x)$ , waar  $P_1(x)$  de waarschijnlijkheid is met alleen spleet 1 open en  $P_2(x)$  de waarschijnlijkheid is met alleen spleet 2 open.
- (b) In het foto-electrisch effect neemt de kinetische energie van het ontsnappend electron toe als de intensiteit van het licht toeneemt.
- (c) Wanneer de werking van een operator op een bepaalde functie alleen leidt tot vermenigvuldiging van die functie met een constante, noemen we zo'n functie een *eigenfunctie*.
- (d) Individuele metingen aan quantummechanisch systemen leveren *altijd* eigenwaarden van de desbetreffende hermitische operator op.
- (e) De eigenfuncties van een hermitische operator vormen een volledig stelsel.
- (f) Een vrij deeltje in een dimensie heeft een discreet spectrum van eigenwaarden van de impuls operator.
- (g) Het H atoom is een centraal veld probleem omdat de potentiaal gegeven wordt door de Coulomb potentiaal.
- (h) De energie van het electron in het waterstof atoom is alleen afhankelijk van het hoofdquantumgetal  $n$ .
- (i) Het Stern-Gerlach experiment liet zien dat waterstofatomen in de electronengrondtoestand niet worden afgebogen door een magneetveld, omdat de projectie van het angulair moment van het electron op de richting van het magneetveld, gegeven door  $m_l$ , 0 is in de grondtoestand.
- (j) Een 2s-electron en een 2p-electron behoren tot dezelfde subschil.
- (k) In het Hartree-Fock model toegepast op de grondtoestand van  $H_2$  voldoet de electronengolffunctie aan de eis dat de golffunctie antisymmetrisch moet zijn t.o.v. de verwisseling van electronen.

- (l) Het feit dat  $O_2$  paramagnetisch is laat zien dat de antibindende  $1\pi_g$  MO's een lagere energie hebben dan de antibindende  $3\sigma_u$  orbital.
- (m) Volgens het variatieprincipe is de electronenenergie die wordt berekend op basis van een "trial wave function" altijd lager dan de werkelijke waarde.
- (n) De electronenenergie van het zuurstofmolecuul is gelijk aan de som van de MO-energieën van de electronen.
- (o) Om de vibratie-energieën van het  $H_2$  molecuul te berekenen kunnen we eerst de electronische grondtoestandsenergie  $V(r)$  uitrekenen, en deze daarna gebruiken in een tweede stap waarin de oplossing van de Schrödingervergelijking voor de beweging van de kernen wordt gevonden. Deze aanpak is consistent met het gebruik van de Born-Oppenheimer benadering.

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

## 2. Operatoren en eigenfuncties.

### 2.1 Gemiddelde waarde en spreiding

Gegeven de operator  $\hat{A}$  met eigenfuncties  $\psi_n$  en eigenwaarden  $a_n$ , in de speciale situatie dat het systeem als golffunctie de eigenfunctie  $\psi_k$  heeft. Laat zien dat:

de gemiddelde waarde is  $\langle \hat{A} \rangle = a_k$ , (6 punten) en

de spreiding is  $(\Delta \hat{A})^2 = \langle \hat{A}^2 \rangle - \langle \hat{A} \rangle^2 = 0$  (6 punten).

### 2.2 Commutator

a. Evalueer de commutator  $[\hat{A}, \hat{B}] \equiv \left[ \frac{d}{dr}, \frac{1}{r} \right]$  door hem toe te passen op  $f(r)$

(4 punten)

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

Totaal vraag 2: 20 punten.

### 3. Het waterstof atoom

De  $\psi_{310}(r, \theta, \phi)$  totale energie-eigenfunctie van het waterstof atoom is:

$$\psi_{310}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{81} \left( \frac{2}{\pi} \right)^{1/2} \left( \frac{1}{a_0} \right)^{3/2} \left( 6 \frac{r}{a_0} - \frac{r^2}{a_0^2} \right) e^{-\frac{r}{3a_0}} \cos \theta$$

a. Voor welke waarde(n) van  $r$  heeft deze golffunctie nulpunten? (5 punten)

b. Voor welke waarde(n) van  $\theta$  heeft deze golffunctie nulpunten? (5 punten)

c. Laat zien dat  $\psi_{310}(r, \theta, \phi)$  een eigenfunctie van de operator  $\hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi}$  is. Wat is de bijbehorende eigenwaarde? (5 punten)

d. Laat zien dat  $\psi_{310}(r, \theta, \phi)$  een eigenfunctie van de operator

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2 \left[ \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right]$$

is. Wat is de bijbehorende eigenwaarde? (5 punten)

Totaal vraag 3: 20 punten.

### 4. Elektronenconfiguraties en MO-diagrammen

Het fluoratoom heeft een atoomgetal van 9.

(a) Schrijf de elektronenconfiguratie van fluor op. (3 punten)

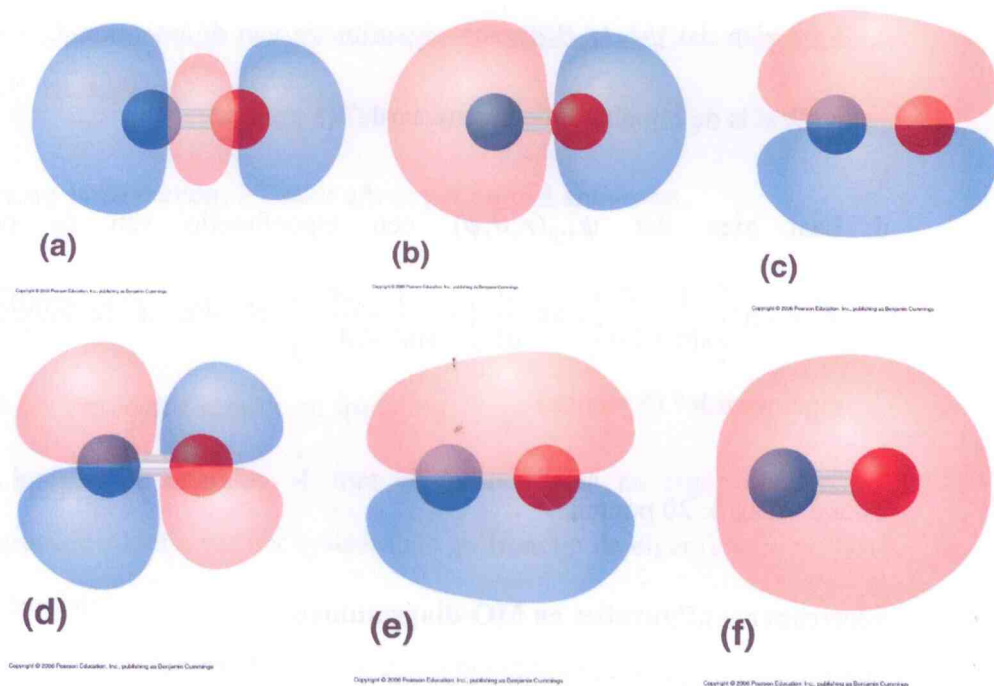
(b) Stel een MO-diagram voor  $F_2$  op. Geef daarin duidelijk aan wat de symmetrie van de MO's is (met labels  $\sigma$  en  $\pi$ , en  $g$  en  $u$ , en nummer de MO's). Geef met pijltjes de bezetting van de orbitals door de elektronen aan, waarbij de richting van de pijltjes het al dan niet gepaard zijn van de elektronen aangeeft. (10 punten)

(c) Heeft het  $F_2$  molecuul ongepaarde elektronen? Zo ja, hoeveel? (3 punten)

(d) Neem aan dat het  $F_2^+$  cation en het  $F_2^-$  anion bestaat. Verwacht je dat de bindingslengte van het cation groter is of kleiner is dan de bindingslengte van het neutrale  $F_2$  molecuul? Verwacht je dat de bindingslengte van het anion groter is of kleiner is dan de bindingslengte van het neutrale  $F_2$

molecuul? Motiveer je antwoord en gebruik daarbij het begrip bandorde.  
(4 punten)

- (e) Onder zie je 6 MO's van het NO molecuul getekend, die geassocieerd zijn met de  $3\sigma$ ,  $4\sigma^*$ ,  $5\sigma$ ,  $1\pi$ ,  $2\pi$ , en  $3\pi^*$  orbitals (links N-atoom, blauw, rechts O-atoom, rood). Geef aan welke orbital bij welke letter (a-f) hoort, en uit welke atomaire orbitals die MO's primair zijn opgebouwd. Leg uit waarop je het onderscheid tussen de  $1\pi$  en  $2\pi$  MO's baseert. Gegeven: als een lob van de golf functie groter is op atoom A dan op atoom B, geldt  $c_A > c_B$ . (5 punten)



- (f) Maak een schets van de hoogst bezette moleculaire orbital (HOMO) van  $B_2^+$  (2.5 punt)
- (g) Maak een schets van de hoogst bezette moleculaire orbital (HOMO) van  $O_2^-$  (2.5 punt)

Totaal vraag 4: 30 punten.

#### 5. Huckel theorie voor geconjugeerde moleculen.

Beschouw de moleculen etheen en butadiëen. De energieën die verbonden zijn

