

Tentamen TC1, Vrijdag 10 Januari 2014, 9-12 uur, Gorlaeus, Zaal 1.**1. Basisinzichten**

- (a) Het is van belang dat een operator die een fysische grootheid karakteriseert hermitisch is. Wat zijn de eigenschappen van eigenwaarden en eigentoestanden van hermitisch operatoren? (3.0 pt)
- (b) Wat is het verschil tussen *stationaire* en *niet-stationaire* toestanden? (2.0 pt)
- (c) Welke drie parameters beïnvloeden de waarschijnlijkheid van tunnelen door een barrière, naast de kinetische energie? (2.5 pt)
- (d) Wat is nulpuntsenergie? (2.5 pt)
- (e) Geef een zo nauwkeurig mogelijke beschrijving van het variatietheorema. Verklaar waarom dit theorema nuttig is bij het zoeken van de best mogelijke golf functie die de grondtoestand van een systeem beschrijft. (5.0 pt)
- (f) Wat is de inhoud van het Pauli-uitsluitingsprincipe? (2.5 pt)
- (g) Wat is een moleculaire orbital? Hoe wordt een MO gekozen in de LCAO methode? (2.5 pt)

Totaal vraag 1: 20 punten.

2. **Operatoren en eigenfuncties**

(a) Laat zien dat de plaats operator \hat{x} en de impuls operator \hat{p}_x niet commuteren. Gebruik een generiek functie $\Psi(x)$. (5 punten)

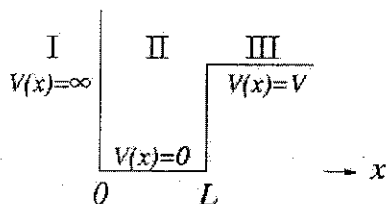
(b) Bereken de gemiddelde waarde (verwachtingswaarde) van de impuls van een zich vrij bewegend deeltje beschreven door de golf functie $\Psi(x) = e^{ikx}$ (5 punten)

(c) Gegeven de operator $\hat{A} = \left(\frac{d^2}{dx^2} - 4x^2 \right)$ en de functie $f(x) = e^{-ax^2}$, voor welke waarden van de parameter a is de functie $f(x)$ een eigenfunctie van de operator \hat{A} ? En wat zijn de behorende eigenwaarden? Welk probleem voorzie je voor één van deze eigenwaarden, als het domein van $f(x)$ gelijk is aan $[-\infty, +\infty]$? (5 punten)

Totaal vraag 2: 15 punten.

3. 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:

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

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

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

- (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)

Totaal vraag 3: 25 punten.

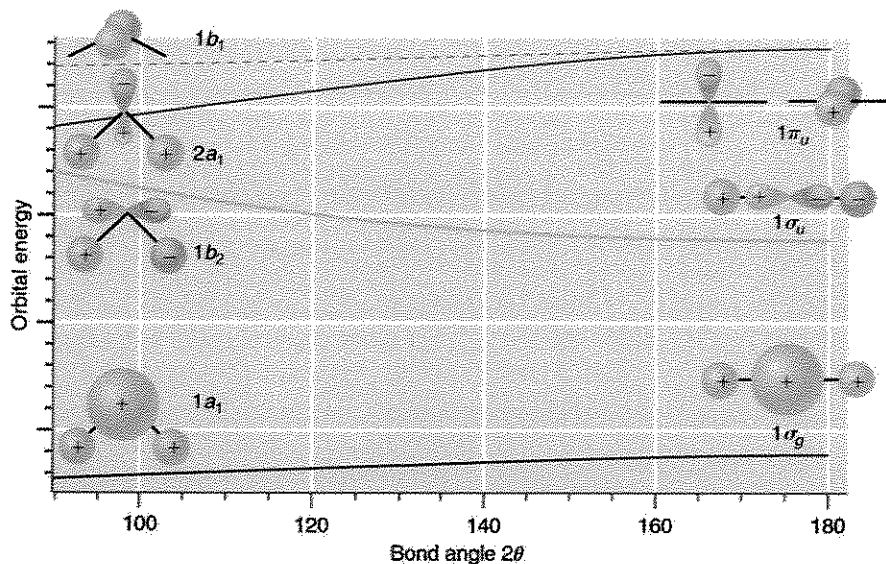
4. **MO-theorie van twee-atomige moleculen.**

- (a) Schrijf de elektronenconfiguratie op van atomair koolstof. Heeft het C-atoom ongepaarde elektronen? Zo ja, hoeveel? (3 punten)
- (b) Stel een MO-diagram voor het C_2 molecuul op. Geef daarin duidelijk aan wat de symmetrie van de MO's is (met labels σ en π , 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. (7 punten)
- (c) Neem aan dat het C_2^+ cation bestaat. Verwacht je dat de bindingslengte van het cation groter of kleiner is dan de bindingslengte van het neutrale C_2 molecuul? Verwacht je dat de vibratiefrequentie van het cation hoger of lager is dan de frequentie van het neutrale molecuul? Motiveer je antwoorden. (5 punten)
- (d) Heeft het C_2 -molecuul ongepaarde elektronen? Zo ja, hoeveel? Beargumenteer je antwoord met het eerder door jou getekende MO-diagram (5 punten).
- (e) Schets een MO-diagram van het OH-radicaal. Neem in je schets mee dat O electronegatiever is dan H. Label de MO's met de symbolen σ en π en geef op de bekende wijze aan of een MO anti-bindend is. Wat is de HOMO, en wat de LUMO? (5 punten)

Totaal vraag 4: 25 punten.

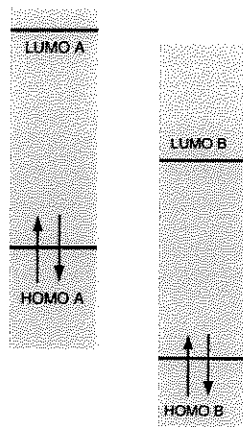
5. MO-theorie meer-atomige moleculen.

(a) Onder is een Walsh-diagram getekend voor drie-atomige moleculen van het type AH₂. Voorspel op basis van het diagram welke van de twee moleculen BH₂ of NH₂ de grootste bindingshoek heeft. Beargumenteer je antwoord. (6 punten)



Copyright © 2006 Pearson Education, Inc., publishing as Benjamin Cummings

(b) Twee moleculen, waarvan de relative ligging van de HOMO's en LUMO's onder gegeven is, gaan een chemische interactie aan. Als gevolg daarvan treedt een ladingscheiding op. Wordt het gevormde moleculaire complex het best beschreven door A⁺B⁻ of door A⁻B⁺? Onderbouw je antwoord met een argumentatie en een MO-diagram. (6 punten, ZOZ)



(c) Het allyl cation $\text{CH}_2 = \text{CH} - \text{CH}_2^+$ heeft een gedelocaliseerd π netwerk dat beschreven kan worden met de Hückelmethode. Stel de secular determinant van het cation op met de Hückelmethode. Geef de energieniveau's als functie van de Hückelparameters α en β op basis van deze secular determinant (3 pt).

Totaal vraag 5: 15 punten.