Tentamen: Theoretische Chemie 1 (4052THECHT) (part 1)	Exam: Theoretical Chemistry 1 (4052THECHT) (deel 1)
Datum: 20 October 2015	Date: 20 Oktober 2015
Tijd/tijdsduur: 13.30-16.30 (3 uur)	Time/duration: 13.30-16.30 (3 hours)
Docent(en) en/of tweede lezer:	Lecturer(s) and/or second reader:
Dr. F. Buda Dr. M. Somers	Dr. F. Buda Dr. M. Somers
Dit tentamen bestaat uit: (aantal opgaven en punten per opgave) 1. Basisinzichten open vragen (25) 2. Operatoren, eigenfuncties en eigenwaarden (25) 3. Eenvoudige QM systemen (25) 4. Het waterstof atoom (25)	This examination consists of: (number of items and points per item) 1. Basic knowledge: open questions (25) 2. Operators, eigenfunctions and eigenvalues (25) 3. Simple QM models (25) 4. Hydrogen atom (25)
Vermeld duidelijk op ieder vel: naam en studienummer	Please clearly indicate on each sheet: name and study number
Maak dit tentamen in blauwe of zwarte inkt. Geen potlood!	Please write with blue or black ink. Don't use a pencil!
Veel succes!	**Good Luck!**

Tentamen TC1, Dinsdag 20 oktober 2015, 13:30-16:30 uur, Gorlaeus, Zaal 2.

1. **Basisinzichten**

(a) Op basis van de quantum mechanisch postulaten, is het mogelijk om de tijd ontwikkeling van een golffunctie te voorspellen? Verklaar uw antwoord. (2.5 punt)

(b) Wat zijn de randvoorwaarden van de golffunctie voor en deeltje in een één-dimensionale doos? (2.5 punt)

(c) Het radiale deel van het waterstof atoom golffunctie *R(r)* is afhankelijk van de straal r, met $0 \leq r \leq \infty$. Wat zijn de randvoorwaarde waar *R(r)* aan moet voldoen? (2.5 punt)

(d) Wat betekent de uitspraak dat het quantummechanische deeltje in een één-dimensionale doos een nulpuntsenergie heeft? (2.5 punt)

(e) Geef een uitleg over de aanwezigheid en oorzaak van nulpuntsenergie voor een deeltje in een één-dimensionale doos. (2.5 punt)

(f) Wat betekent de uitspraak dat de eigenfuncties van een hermitische operator een volledig stelsel vormen? (2.5 punt)

(g) Beschouw een systeem waarvan de golffunctie een superpositie is, met gelijke coëfficiënten, van twee energietoestanden:

$$\Psi = N\left\{\phi_1(\boldsymbol{r})e^{-iE_1t/\hbar} + \phi_2(\boldsymbol{r})e^{-iE_2t/\hbar}\right\}$$

Is Ψ een *stationaire toestand*? Verklaar uw antwoord. (5 punten)

(h) Een operator wordt hermitisch genoemd als geldt:

$$\int (\hat{H}\phi)^* \psi dx = \int \phi^* (\hat{H}\psi) dx$$

Gegeven twee hermitische operatoren $\hat{A}$ en $\hat{B}$, is the operator $\hat{C} = \hat{A} + \hat{B}$ ook een Hermitische operator?

(Gebruik de gegeven definitie van hermitisiteit voor uw antwoord) (5 punten)

Totaal vraag 1: 25 punten.

2. Operatoren, eigenfuncties en eigenwaarden

2.1 Gegeven de operator $\hat{A} = \dfrac{d^2}{dx^2}$, beschouw de volgende functies:

a) $f(x) = e^{-ax}$

b) $g(x) = e^{-iax}$

c) $h(x) = e^{-ax^2}$

waar a een reële parameter is.

Bepaal welke van deze functies een eigenfunctie van de operator $\hat{A}$ is, en wat de behorende eigenwaarden zijn.

(6 punten)

2.2 Bepaal de vorm van de operator $\hat{A}^2$ als $\hat{A} = \frac{d}{dx} + x$.

Gebruik een algemene functie $f(x)$ om het antwoord af te leiden.

(5 punten)

2.3 De functie $\Psi(x) = e^{-ikx}$ is een eigenfunctie van de Hamiltoniaan voor een vrije deeltje in één-dimensie. Wat is de bijbehorende energie?

(3 punten)

2.4 Gegeven de operator $\frac{\partial}{\partial \phi}$ en de functie $sin\theta cos\phi$, is die functie een eigenfunctie van de operator? Als de functie een eigenfunctie is, wat is dan de bijbehorende eigenwaarde?

(2 punten)

2.5 Gegeven $\hat{H} = \dfrac{\hat{p}_x^2}{2m} + V(x) = -\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)$

Laat zien dat: $\left[\hat{x}, \hat{H}\right] = \hat{x}\hat{H} - \hat{H}\hat{x} = \dfrac{\hbar^2}{m}\dfrac{\partial}{\partial x} = \dfrac{i\hbar}{m}\hat{p}_x$.

Gebruik een zogenaamde dummy functie *Ψ(x)*, om niet te vergeten dat we met operatoren aan het werk zijn.

(6 punten)

2.6 Zijn de functies $f(x) = e^{-3x^2}$ en $g(x) = e^{+3x^2}$ kwadratisch integreerbaar op het interval $-\infty \leq x \leq \infty$?

Welke consequenties heeft dat voor *f(x)* en *g(x)* als ze als golffuncties worden gebruikt?

(Beantwoord met argumentatie, zonder de integraal expliciet te evalueren)
(3 punten)

Totaal vraag 2: 25 punten.

3. Eenvoudige QM systemen

3.1 Vrije deeltje

Een acceptabele oplossing voor het vrije deeltje probleem is een superpositie van meerdere impuls eigenfuncties (een zogenaamd golfpakket):

$$\Psi(x,t) = \int_{k_1}^{k_2} dk\, g(k)\, e^{ikx} e^{-i\frac{E_k}{\hbar}t}$$

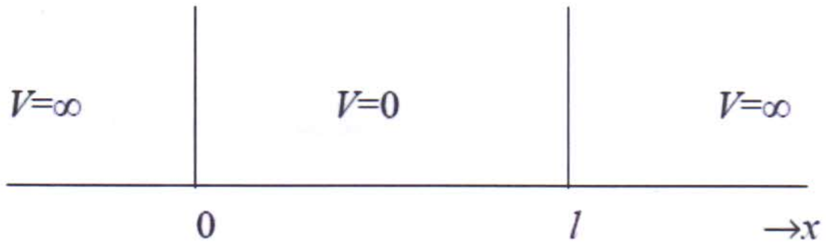
a. Is de golfpakket een stationaire toestand van het vrije deeltje?

b. Gegeven dat $k_2 > k_1$, welke component van de golfpakket beweegt sneller, k_1 of k_2?

(5 punten)

3.2 Deeltje in een doos.

De functies $\Psi_1(x) = \sin\left(\frac{\pi x}{l}\right)$ en $\Psi_2(x) = \sin\left(\frac{2\pi x}{l}\right)$ zijn eigenfuncties van de Hamiltoniaan voor een deeltje in een één-dimensionale doos (zie onderstaande afbeelding)



a. Wat zijn de bijbehorende energieën?

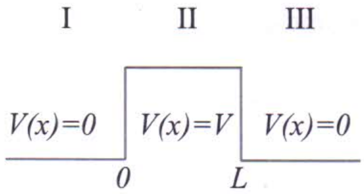
(4 punten)

b. Laat zien, of beredeneer, dat $\Psi_1(x)$ en $\Psi_2(x)$ orthogonaal zijn. [gebruik: $-2\sin(a)\sin(b) = \cos(a+b) - \cos(a-b)$].

(5 punten)

3.3 **Tunneling**

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



a. Gegeven een binnenkomende deeltje met massa m van links ($x \leq 0$) met energie $E < V$ tegen de barrière. Stel de Schrödingervergelijking op voor het gebied II (3 punten)

b. De oplossing van de Schrödinger vergelijking voor de energie $0 < E < V$ in gebied II is een lineaire combinatie van exponentiële functies met een positieve en een negatieve exponent:

$$\Psi^{II}(x) = A^{II}e^{-Kx} + B^{II}e^{Kx}$$

Laat door substitutie in de Schrödinger vergelijking zien wat de relatie tussen K en de energie E en de massa m is? (3 punten)

c. De transmissie waarschijnlijkheid T (de kans om door de barrière heen te gaan, tunneling) is:

$$T = \frac{1}{1 + \frac{(e^{KL} - e^{-KL})^2}{16\frac{E}{V}\left(1 - \frac{E}{V}\right)}}$$

Leg uit hoe deze kans wordt beïnvloed door de hoogte van de barrière (V), de breedte van de barrière (L) en de massa van het deeltje (m).
(5 punten)

Totaal vraag 3: 25 punten.