

<p>Hertentamen Theoretische Chemie 1 (4052THECHT-1516FWN)</p> <p>Datum: 29 januari 2016</p> <p>Tijd/tijdsduur: 14.00-17.00 (3 uur)</p> <p>Docent(en) en/of tweede lezer:</p> <p>Prof. G-J. Kroes Dr. F. Buda</p> <p>Dit tentamen bestaat uit: (aantal opgaven en punten per opgave)</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Basisinzichten open vragen (20) 2. Operatoren en eigenfuncties (20) 3. Eenvoudige QM systemen (20) 4. MO-theorie van moleculen (26) 5. Hückel theorie (14) <p>Studenten die hun opgaven hebben ingeleverd voor de werkcolleges en de computerlabs in het huidige academische jaar krijgen een cijfer zoals beschreven in de Syllabus van het huidige academische jaar (tentamen 85%, WCs 10%, Computerlabs 5%).</p> <p>Voldoendegrens is 55 van 100 punten behaald op het gemiddelde cijfer (afgerond cijfer 6.0 of hoger).</p> <p>Toegestane informatiebronnen en hulpmiddelen:</p> <p>Zakrekenmachine (een grafische rekenmachine is niet toegestaan)</p> <p>Vermeld duidelijk op ieder vel: naam en studienummer</p> <p>Maak dit tentamen in blauwe of zwarte inkt. Geen potlood!</p> <p>Veel succes!</p>	<p>Resit Theoretical Chemistry 1 (4052THECHT-1516FWN)</p> <p>Date: January 29, 2016</p> <p>Time/duration: 14.00-17.00 (3 hours)</p> <p>Lecturer(s) and/or second reader:</p> <p>Prof. G-J. Kroes Dr. F. Buda</p> <p>This examination consists of: (number of items and points per item)</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Basic knowledge (open questions) (20) 2. Operators and eigenfunctions (20) 3. Simple QM systems (20) 4. MO-theory of molecules (26) 5. Hückel theory (14) <p>Students who turned in their Werkcollege and Computerlab assignments in the present academic year will be graded as stated in the Syllabus of the present academic year (exam 85%, WC 10%, Computerlab 5%).</p> <p>For a pass a minimum of 55 points out of 100 points (mark after round-off = 6.0 or higher) is needed for the averaged grade.</p> <p>Allowed information sources and tools:</p> <p>Pocket calculator (graphical calculator is not allowed)</p> <p>Please clearly indicate on each sheet: name and study number</p> <p>Please write with blue or black ink. Don't use a pencil!</p> <p>Good Luck!</p>
---	--

1. **Basisinzichten (20 punten)**

- (a) Beschouw de diffractie-experiment met elektronen door twee spleten. De resultaten van de experiment vertonen karakteristieken van zowel golven als deeltjes. Verklaar dit. (5 p)
- (b) Leg uit de Born interpretatie van de golffunctie en hoe gekoppeld is aan de normeringsconditie van Ψ ? (2.5 punten)
- (c) Waarom worden de eigenfuncties van de Hamiltoniaan \hat{H} *stationaire toestanden* genoemd? (2.5 punt)
- (d) Wat is een gerade golffunctie? (2.5 pt)
- (e) Wat is de inhoud van het Pauli-uitsluitingsprincipe? (2.5 pt)
- (f) Leg in maximaal 10 zinnen uit hoe je de Born-Oppenheimer benadering kan gebruiken om de frequenties uit te rekenen voor spectroscopische overgangen tussen vibratietoestanden in verschillende elektronische toestanden van een twee-atomig molecuul. Wat is de gemaakte benadering in formulevorm? Illustreer je antwoord eventueel met een plaatje (5 pt).

2. **Operatoren en eigenfuncties (20 punten)**

(a) Laat zien dat de plaats operator \hat{x} en de impuls operator \hat{p}_x niet commuteren. Gebruik daarvoor een generieke golffunctie $\psi(x)$. (4 punten)

(b) Gegeven de operator $-\hbar^2 \frac{d^2}{dx^2}$, laat zien of de volgende functies eigenfuncties zijn van deze operator. Als de functie een eigenfunctie is, wat is dan de bijbehorende eigenwaarde?

1. e^{-ax^2}
2. $5e^{ikx}$
3. $\sin ax$
4. $ae^{-3x} + be^{-3ix}$

(8 punten)

(c) Gegeven de Schrödinger vergelijking voor de harmonische oscillator

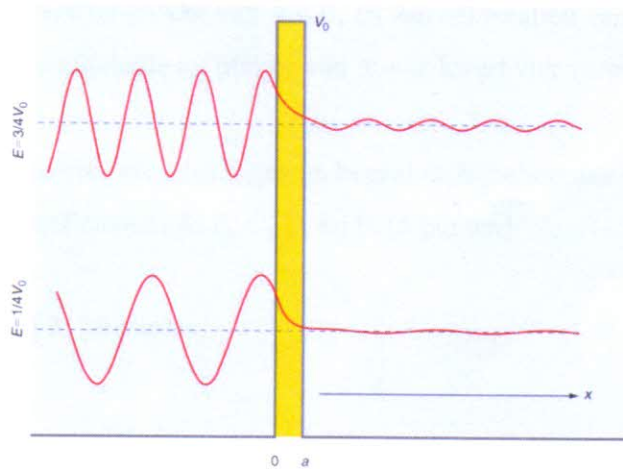
$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} kx^2 \right] \psi = E\psi$$

bepaal voor welke waarde van α de functie $\psi(x) = e^{-\frac{\alpha x^2}{2}}$ een eigenfunctie is van de harmonische oscillator Hamiltoniaan.

(8 punten)

3. **Eenvoudige QM systemen: Tunnelen door een barrière (20 punten)**

Voor een potentiaal (zie ook figuur) geldt $V(x) = 0$ voor $x < 0$ (gebied I),
 $V(x) = V_0$ voor $0 \leq x \leq a$ (gebied II), en $V(x) = 0$ voor $x > a$ (gebied III).



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

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

De oplossing van de Schrödinger vergelijking is voor de energie $0 < E < V_0$ in gebied I, II en III steeds een lineaire combinatie van exponentiële functies met positieve en negatieve exponenten:

$$\psi^I(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$$

$$\psi^{II}(x) = Ce^{\kappa x} + De^{-\kappa x}$$

$$\psi^{III}(x) = Fe^{ikx} + Ge^{-ikx}$$

- (b) Laat door substitutie in de Schrödinger vergelijking zien hoe k in ψ^I en ψ^{III} afhangt van de energie E en de massa m van het deeltje. Laat ook zien hoe κ in ψ^{II} afhangt van de energie E en de massa m . (5 punten)

- (c) Neem aan dat het deeltje de barrière nadert vanuit de negatieve x richting. Voor het gegeven energie interval is de constante G gelijk aan nul en de constante A niet gelijk aan nul. Waarom? (5 punten)

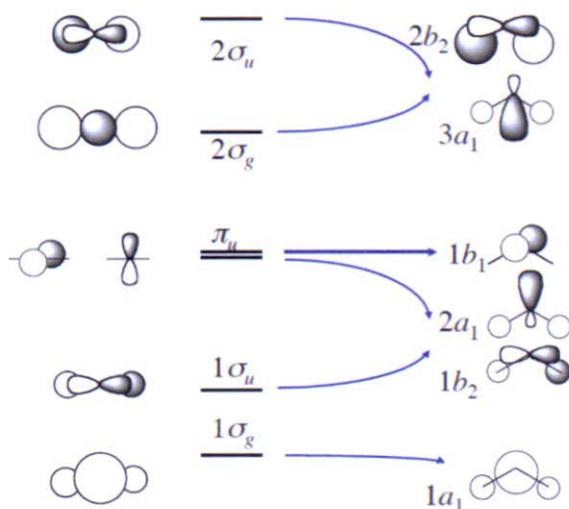
Toepassen van de voorwaarden van continuïteit van de eigenfunctie en zijn eerste afgeleide ter plekke van $x = 0$, en van continuïteit van de eigenfunctie en zijn eerste afgeleide ter plekke van $x = a$ levert vier vergelijkingen op.

- (d) Geef deze vier vergelijkingen en bepaal de bijbehorende betrekkingen tussen de coëfficiënten A , B , C , D , en F . (5 punten)

Totaal vraag 3: 20 punten.

4. MO-theorie van moleculen. (26 punten)

- (a) Schrijf de elektronenconfiguratie op van atomair fluor. Heeft het F-atoom ongepaarde elektronen? Zo ja, hoeveel? (3 punten)
- (b) Stel een MO-diagram voor het O₂ 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. Is het molecuul paramagnetisch? (Hint: de energie van een paramagnetisch molecuul hangt af van sterkte en richting van een aangelegd magnetisch veld). (7 punten)



- (c,d) Beschouw het bovenstaande plaatje en beantwoord de volgende vragen voor de onder gegeven twee moleculen met behulp van kwalitatieve MO-theorie: (I) Beredeneer of het onder gespecificeerde molecuul lineair of gebogen is (telkens 3 punten), (II) geef de elektronenconfiguratie van het molecuul aan, op analoge wijze als gedaan kan worden voor atomen (schrijf de bezette orbitals op en geef aan hoeveel elektronen in elke orbital zitten, op de gebruikelijke wijze, telkens 1 punt)

(c) BeH₂ (4 punten), (d) NH₂ (4 punten)

