

|   |  |
|---|--|
| <p><b>Hertentamen Theoretische Chemie 1<br/>(4052THECHT-1617FWN)</b></p> <p>Datum: 3 februari 2017</p> <p>Tijd/tijdsduur: 13.00-16.00 (3 uur)</p> <p>Docent(en) en/of tweede lezer:</p> <p>Prof. G-J. Kroes<br/>Dr. F. Buda</p> <p>Dit tentamen bestaat uit:<br/>(aantal opgaven en punten per opgave)</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. Basisinzichten open vragen (20)</li> <li>2. Operatoren en eigenfuncties (20)</li> <li>3. Eenvoudige QM systemen (20)</li> <li>4. MO-theorie van moleculen (30)</li> <li>5. Electronenstructuur atomen (10)</li> </ol> <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), periodiek systeemkaart</p> <p>Vermeld duidelijk op ieder vel: naam en studienummer</p> <p>Maak dit tentamen in blauwe of zwarte inkt. Geen potlood!</p> <p><b>Veel succes!</b></p> | <p><b>Resit Theoretical Chemistry 1<br/>(4052THECHT-1617FWN)</b></p> <p>Date: February 3, 2017</p> <p>Time/duration: 13.00-16.00 (3 hours)</p> <p>Lecturer(s) and/or second reader:</p> <p>Prof. G-J. Kroes<br/>Dr. F. Buda</p> <p>This examination consists of:<br/>(number of items and points per item)</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. Basic knowledge (open questions) (20)</li> <li>2. Operators and eigenfunctions (20)</li> <li>3. Simple QM systems (20)</li> <li>4. MO-theory of molecules (30)</li> <li>5. Electronic structure of atoms (10)</li> </ol> <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), card of periodic table</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><b>Good Luck!</b></p> |
|---|--|

1. **Basisinzichten (20 punten)**

- (a) Verklaar waarom een eigenfunctie van de Hamiltoniaan

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \Phi(\mathbf{r}) e^{-i/\hbar Et}$$

een stationaire toestand is genoemd? (2.5 punten)

- (b) Stel
- $A$
- is een observabele, met eigenfuncties
- $\psi_n$
- en eigenwaarden
- $a_n$
- :

$$\hat{A} \psi_n = a_n \psi_n.$$

Wat is de fysische betekenis van de eigenwaarden? (2.5 punten)

- (c) Een willekeurig golffunctie
- $\Psi$
- kan geschreven worden als een lineaire combinatie van de eigenfuncties van de operator
- $\hat{A}$
- :

$$\Psi = \sum_n c_n \psi_n$$

Wat is de fysische betekenis van  $|c_n|^2$  ?

(2.5 punten)

- (d) Wat geeft de reductiepostulaat aan? (2.5 punten)
- (e) Wat wordt in de quantummechanica bedoeld met het begrip degeneratie? En hoe luidt de regel van Hundt? Wat is de consequentie van de regel van Hundt in het geval we twee electronen beschikbaar hebben voor twee tot dan toe ongevolde, gedegenerereerd orbitals? (5.0 pt)
- (f) Geef een definitie van het begrip correlatie-energie. (2.5 pt)
- (g) Gegeven: een twee atomig molecuul heeft een moleculaire orbital met zich geassocieerd die  $\pi$ -symmetrie heeft. Wat wordt met deze symmetrie bedoeld? (2.5 pt)

2. Operatoren en eigenfuncties (20 punten)

- (a) Gegeven twee ontaarde eigenfuncties van een operator  $\hat{A}$ , laat zien dat iedere lineaire combinatie van deze ontaarde eigenfuncties weer een eigenfunctie is met de zelfde eigenwaarde.  
(3 punten)
- (b) Beschouw een vlakke golf  $e^{ikx}$ . Beschrijft deze functie een eigentoestand van de impuls operator voor beweging langs de  $x$ -as? Als de functie een eigenfunctie is, wat is dan de bijbehorende eigenwaarde? (2 punten)
- (c) Laat zien dat de resultaat in vraag 2b consistent is met de relatie tussen de impuls en de golflengte voor het eerst gepostuleerd door De Broglie.  
(2 punten)

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

Laat zien dat  $[\hat{p}_x, \hat{H}] = -i\hbar \frac{\partial V}{\partial x}$

(5 punten)

- (e) Gegeven de operator  $\frac{d^2}{dx^2}$ , 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.  $e^{-ix}$
3.  $\sin(3x)$
4.  $a \sin(3x) + b \sin(2x)$

(8 punten)



## 3. Eenvoudige QM systemen (20 punten)

- a. Bereken de gemiddelde waarde van de afstand  $r$  tussen een elektron en de kern van het waterstofatoom in de grondtoestand:

$$\Psi(r, \theta, \varphi) = \sqrt{\frac{1}{\pi a_0^3}} e^{-\frac{r}{a_0}}$$

Hint: gebruik de integraal

$$\int_0^{\infty} x^n e^{-ax} dx = \frac{n!}{a^{n+1}}$$

(4 punten)

- b. Bereken de gemiddelde waarde van de potentiële energie van het waterstofatoom in de grondtoestand (zie 3a boven). Hint: als je de exacte uitdrukking voor de potentiële energie operator niet weet, gebruik dan in ieder geval een uitdrukking die de correcte afhankelijkheid van  $r$  (de afstand van het elektron tot de kern) weergeeft (4 punten)

- c. Beschouw een deeltje in een één-dimensionale doos met eindige diepte, en lengte  $a$ . De potentiaal wordt als volgt gedefiniëerd:

$$V(x) = 0 \text{ for } \frac{a}{2} > x > -\frac{a}{2} \text{ (gebied I)}$$

$$V(x) = V \text{ for } x \geq \frac{a}{2}, x \leq -\frac{a}{2} \text{ (gebied II)}$$

Schrijf de Schrödingervergelijking op voor een deeltje met massa  $m$  onder invloed van deze potentiaal. Beschouw de twee gebieden (binnen en buiten de doos) apart. (4 punten)

Laat door substitutie in de Schrödinger vergelijking zien dat

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

een algemene oplossing is voor de energie  $0 < E < V$  in gebied II. (2.5 punten)

Wat is dan de relatie tussen  $K$  en de energie  $E$ , de massa  $m$ , en de potentiaal  $V$ ? (2.5 punten)

- d. De energie van een deeltje met massa  $m$  in een doos met lengte  $a$  is gegeven door

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{n\pi}{a} \right)^2 = \frac{h^2 n^2}{8m a^2}, \quad \text{for } n = 1, 2, 3, \dots$$

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

Wat is dan de nulpuntsenergie van een elektron in een doos van 20 Bohr?

Is het mogelijk om het elektron van de grondtoestand naar de toestand  $n = 3$  te exciteren met zichtbaar licht (met energie in de range 1.5-3.5 eV)?

*(Hint: Het is handig om de energie in atomaire eenheden te berekenen (a.u.): in deze a.u. wordt  $\hbar=1$ , de elektron massa  $m=1$  a.u., and the Bohr radius  $a_0=1$  a.u. De atomaire eenheid van energie heet de Hartree (1 Hartree  $\sim 27,2$  eV).*

(3 punten)

