

Toets Inleiding Kwantumchemie (MST1171)

Uitgifte datum: vrijdag 2 maart 2007

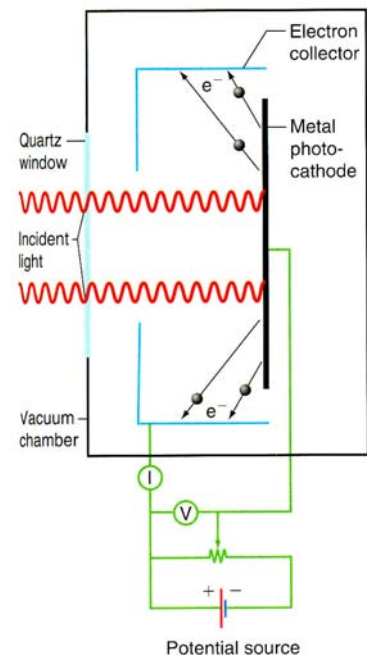
Uiterste inleverdatum: dinsdag 6 maart 2007, aan het begin van het college (om 8:45!)

*** Schrijf duidelijk je naam, studienummer en studierichting op je antwoordenblad ***

Maak indien nodig gebruik van het formuleblad (zie Blackboard)

1. Met de opstelling zoals hiernaast getekend worden twee experimenten aan metallisch lithium gedaan. Bij het 1^e experiment heeft het invallende licht een golflengte van 300 nm. Er begint een stroompje te lopen op het moment dat $V_{\text{elektron collector}} - V_{\text{fotokathode}} (= \Delta V) \geq -1.83$ volt. Bij het 2^e experiment heeft het invallende licht een golflengte van 400 nm. Nu begint de stroom toe te nemen vanaf $\Delta V \geq -0.80$ volt.

- a. Bereken de constante van Planck uit deze gegevens
- b. Bereken ook de werkfunctie van lithium



2. Een chemiestudent heeft een nieuw type katalysator ontwikkeld voor de ontzweving van diesel. Hij wil vervolgens de kristalstructuur van de buitenste atoomlagen van de katalysator bepalen door argon ionen aan het oppervlak te laten diffracteren. Hij gebruikt hiervoor enkelvoudig geïoniseerde argon ionen, die op de katalysator worden geschoten met een versnelspanning van 10 kV. Zal het de student lukken om diffractie van Ar^+ ionen waar te nemen? Motiveer uw antwoord met een berekening.
3. Geef voor elk van de volgende functies aan of het een golf functie is of niet. Als het een golf functie is, geef dan ook aan of het een lopende of een staande golf betreft. Licht je antwoorden (kort) toe.
 - a. $\psi(x,t) = 10 \cos^2(x-6t)$
 - b. $\psi(x,t) = \pi t e^{(-2x)}$
 - c. $\psi(x,t) = 2^{1/2} e^{i(2x-3t)}$
 - d. $\psi(x,t) = \sin(x/3) \cos(\pi+t/5)$

4. 1,3-Butadiene heeft vier vrije π -elektronen die we kunnen beschouwen als deeltjes in een 1-dimensionaal doosje met een afmeting van 6.4 \AA . Als we aannemen dat het doosje oneindig hoge potentiaalwanden heeft, dan worden de energie-niveaus van de elektronen gegeven door $E = \frac{\hbar^2 n^2}{8ma^2}$.

- Teken de energieniveaus voor $n=1$ t/m $n=4$ en geef daarin de bezetting door de elektronen aan.
- Door 1,3-butadiene te belichten kunnen we een elektron uit de hoogst-bezette toestand (HOMO) naar de eerstvolgende onbezette toestand (LUMO) aanslaan. Bereken de golflengte die hiervoor nodig is.
- We kunnen deze overgang ook krijgen door de temperatuur te verhogen. Bij welke temperatuur is de kans 10% dat de LUMO bezet is met een elektron?
- De chemische reactiviteit van benzeen wordt in belangrijke mate bepaald door de hoogte van de potentiaalwanden. Geef hiervoor een verklaring.

5. Elk vrij π -elektron in 1,3-butadiene kan beschreven worden met de volgende golf functies:

$$\psi_n(x) = A \cos\left(\frac{n\pi x}{a}\right), \text{ met } n = 1, 2, 3, \dots \text{ De afmeting van het doosje is wederom } a.$$

- Laat zien dat $\psi_n(x)$ eigenfuncties zijn van de energie-operator $\hat{H} = \left\{ \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right\}$ voor het geval dat $V(x) = 0$.
- Normaliseer de golf functie $\psi_n(x)$ door de waarde van A te berekenen.
- Bereken voor een elektron in de 1^e aangeslagen toestand ($n=2$) de kans dat het zich tussen $x = 1/3a$ en $x = 2/3a$ bevindt.
- Geef de uitdrukking waarmee de meest waarschijnlijke plaats van het elektron in het molecuul berekend kan worden (je mag de integraal laten staan, hoef je niet uit te rekenen).
- Is het mogelijk om de plaats en de energie van een elektron in 1,3-butadiene tegelijkertijd exact te bepalen? Is dit mogelijk voor de impuls en de energie van het elektron? Motiveer je antwoorden.