

Tentamen Inleiding Quantumchemie (MST1171)

Datum: Wo 22 Augustus 2007

*** Schrijf duidelijk je naam, je **Leidse** studienummer en studierichting op je antwoordblad ***

*** Het tentamen bestaat uit **vijf** opgaven. Maak waar nodig gebruik van het formuleblad ***

Opgave 1

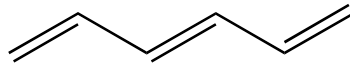
Geef van de onderstaande beweringen aan of ze waar of niet waar zijn (zonder verklaring):

- Een deeltje kan door een oneindig hoge barrière tunnelen als deze maar smal genoeg is.
- Het energie verschil tussen elektronen in de 3s, 3p en 3d orbitalen in Ne wordt veroorzaakt door de repulsie tussen de verschillende elektronen.
- De energie van een harmonische oscillator kan in de kwantummechanische beschrijving nul worden.
- Volgens het variatie principe is de totale energie van een benaderde golffunctie altijd hoger dan de exacte grondtoestands energie.
- Volgens de Born-Oppenheimer benadering kan de beweging van de elektronen afzonderlijk van die van de kernen behandeld worden als gevolg van het grote verschil in massa.
- Het Pauli principe zegt dat er in elke ruimtelijke orbital maximaal twee elektronen met dezelfde spin kunnen zitten.
- In het foto-elektrische effect wordt de kinetische energie van een elektron dat vrijgemaakt wordt uit een vaste stof alleen bepaald door de energie van het foton.
- Een molecuul moet een permanent dipoolmoment hebben om in een rotatie spectrum aanleiding te geven tot een absorptie band.
- De energie en de plaats van een deeltje kunnen volgens de kwantummechanica niet tegelijkertijd exact bepaald worden.
- Bij één bepaalde eigenfunctie van de Schrödinger vergelijking kunnen meerdere waarden voor de energie horen.
- Voor het waterstof atoom bestaat een exacte oplossing van de Schrödinger vergelijking.
- Voor het helium atoom bestaat een exacte oplossing van de Schrödinger vergelijking.
- De afstand tussen de energie niveaus voor de harmonische oscillator neemt toe naarmate de energie toeneemt.
- Een elektron in een 2s orbital bevindt zich gemiddeld verder van de kern dan een elektron in een 1s orbital.
- Het vibratie spectrum van een twee-atomig molecuul geeft informatie over de krachtsconstante van de binding in zo'n molecuul.

Opgave 2

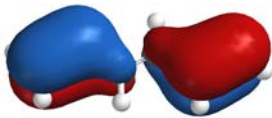
Hexatrieen (zie onder) is een geconjugeerd molecuul waarin de 6 p-orbitalen op de koolstof atomen samen 6 gedelocaliseerde π -orbitalen vormen volgens de LCAO-MO methode. Deze orbitals worden bezet door 6 elektronen. Hoewel hexatrieen geen lineair molecuul is nemen we aan dat de π -electronen in hexatrieen bewegen als deeltjes in een 1-dimensionale doos waarvan de lengte gelijk is aan: drie keer de lengte van de C-C dubbele binding (3×135 pm) plus twee keer de lengte van een C-C enkele binding (2×154 pm) plus twee keer de straal van een koolstof atoom aan de uiteinden (2×77 pm). De totale lengte van de doos is dus 867 pm ($1 \text{ pm} = 10^{-12} \text{ m}$).

Hexatrieen:

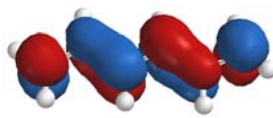


- Maak een tekening van de energie niveaus voor $n=1$ t/m $n=6$ en geef daarin de bezetting door de elektronen aan.
- Schets de golffunctie voor de niveaus met $n=1$ t/m $n=6$ voor een deeltje in een doosje.
- Hieronder staan de 6 π -orbitalen berekend voor hexatrieen. Geef in de tekening van deel (a) van deze opgave aan welke van deze orbitalen bij elk van de 6 energie niveaus hoort en geef een korte verklaring.

I



II



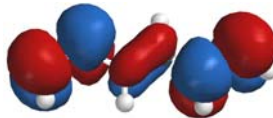
III



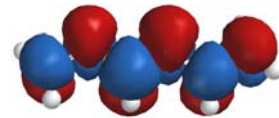
IV



V



VI



(de kleur geeft het teken van de golffunctie aan)

- Als hexatrieen licht absorbeert kan er een elektron van de hoogste bezette orbital naar de laagste onbezette orbital worden 'aangeslagen'. Bereken de golflengte van het licht dat hier voor nodig is.
- Als een hexatrieen molecuul opgerekt wordt worden alle binding langer. Beredeneer of er dan meer of minder energie nodig is om een elektron van de hoogste bezette naar de laagste onbezette orbital aan te slaan.

Opgave 3

Voor een waterstofchloride molecuul ($^1\text{H}^{35}\text{Cl}$) wordt in het infrarood vibratie spectrum een absorptieband gevonden bij 2886 cm^{-1} . De bindinglengte is 127.5 pm ($1\text{ pm} = 10^{-12}\text{ m}$).

- Bereken de krachtsconstante, k , van de enkelvoudige binding in HCl.
- Bij welke energie wordt een absorptie band gevonden in het infrarood spectrum als het waterstofatoom wordt vervangen door deuterium (^2H)? De krachtsconstante van de binding blijft gelijk.
- Bereken het energie verschil tussen de laagste twee rotatie toestanden in $^1\text{H}^{35}\text{Cl}$.
- Wat is het relatieve aantal moleculen in de rotatie toestand met $J=1$ t.o.v. de *rotatie* grondtoestand bij 700 K ?

Gebruik indien nodig de volgende formules (en eventueel het formuleblad):

Rotaties:

$$E = \frac{h^2}{8\pi^2 \mu r_0^2} J(J+1) \quad \text{met } J = 0, 1, 2, 3, \dots, K \quad \text{Ontaardingsgraad rotatie niveaus: } 2J+1$$

Vibraties (harmonische oscillator):

$$E_n = h\nu \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad \text{met } n = 0, 1, 2, \dots, K \quad \nu = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{\mu}}$$

Opgave 4

- Leg uit waarom het foto-elektrisch effect laat zien dat licht een kwantummechanisch karakter heeft.
- Bereken de kinetische energie van elektronen die worden vrijgemaakt als chroom wordt bestraald met ultraviolet licht met een golflengte gelijk aan 200 nm. De werkfunctie (ϕ) van chroom is 4.40 eV.
- Uit metingen van het foto elektrisch effect in natrium is de kinetische energie van de vrijgemaakte elektronen bepaald voor verschillende golflengtes van het gebruikte licht. De waarden staan in de onderstaande tabel. Bepaal met behulp van deze getallen de constante van Planck (h).

λ (nm)	100	200	500
E_{kin} (eV)	10.1	3.94	0.222

Opgave 5

Hieronder wordt de Hamilton operator voor het helium atoom gegeven, waarbij de kern de index a heeft en de elektronen de indexen 1 en 2 . De massa van de He kern is aangeduid als m_{He} en die van het elektron als m_e .

$$\hat{H} = \frac{-\hbar^2}{2m_{\text{He}}} \nabla_a^2 + \frac{-\hbar^2}{2m_e} \nabla_{e1}^2 + \frac{-\hbar^2}{2m_e} \nabla_{e2}^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{2}{r_{a1}} + \frac{2}{r_{a2}} - \frac{1}{r_{12}} \right)$$

- Geef van elk van de 6 termen kort (1 zin) aan wat ze beschrijven.
- Schrijf op dezelfde manier de Hamilton operator voor het lithium atoom ($Z=3$).