

Tentamen + Uitwerkingen Inleiding Quantumchemie (QCH)

Datum: Donderdag 5 april 2012

*** Schrijf duidelijk je naam, je **Leidse** studienummer en studierichting op je antwoordblad ***
*** Het tentamen bestaat uit **vier** 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):

- a) Binnen de grenzen van haar toepassingsgebied kan de kwantummechanica tot nog toe alle waargenomen verschijnselen verklaren.
- b) Het Pauli principe zegt dat een golffunctie van teken moet veranderen als je twee elektronen omwisselt.
- c) De vergelijking van De Broglie geeft het verband weer tussen de impuls en de golflengte van een foton
- d) Bij het foto-elektrische effect leidt een hogere intensiteit van de invallende straling tot een hogere stroom (indien $h\nu > \text{werkfunctie}$)
- e) De klassieke fysica veronderstelde dat de energie van een oscillerende dipool alleen afhangt van de temperatuur
- f) Complexe wiskunde is slechts een hulpmiddel bij het beschrijven van kwantummechanische problemen, het levert geen nieuwe inzichten op
- g) De eigenfuncties van een kwantummechanische operator zijn niet per definitie orthogonaal.
- h) De eerste meting aan een systeem heeft een deterministische uitkomst, elke direkt daarop volgende meting heeft een probabilistische uitkomst.
- i) De afstand tussen de energie niveaus voor de harmonische oscillator neemt toe naarmate de energie toeneemt.
- j) Het vibratie spectrum van een twee-atomig molecuul geeft informatie over de krachtsconstante van de binding in zo'n molecuul.
- k) Voor een neutraal Ne atoom kan geen exacte (analytische) oplossing voor de Schrodinger vergelijking gevonden worden.
- l) De amplitude van de 1s golffunctie van het waterstofatoom is oneindig op de kern: dit resultaat is fysisch onrealistisch.
- m) Koopman's theorema legt een verband tussen de ionisatie energie en de afstoting tussen verschillende elektronen
- n) De Hartree methode voor het berekenen van de energie houdt expliciet rekening met elektron-elektron interacties.
- o) Als er geen overlap is van de atomaire orbitalen zal er ook geen opsplitsing plaatsvinden van de daaruit voortkomende moleculaire orbitalen

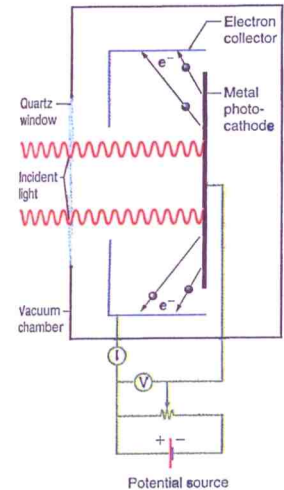
Opgave 2

Met de opstelling zoals hiernaast getekend worden twee experimenten aan metallisch cesium gedaan.

Bij het 1^e experiment heeft het invallende licht een golflengte van 400 nm. Er begint een stroompje te lopen op het moment dat $V_{\text{elektron collector}} - V_{\text{fotokathode}} (= \Delta V) \geq -0.96$ volt.

Bij het 2^e experiment heeft het invallende licht een golflengte van 500 nm. Nu begint de stroom toe te nemen vanaf $\Delta V \geq -0.34$ volt.

- Bereken de constante van Planck uit deze gegevens.
- Bereken ook de werkfunctie van cesium.
- Wat verwacht je voor de uitkomst van dit experiment als je het nogmaals uitvoert, maar dan bij een golflengte van 600 nm?
- Naast het foto-elektrisch effect waren er nog drie andere beroemde experimenten (of waarnemingen) die men niet kon verklaren met de toenmalige natuurkundige kennis. Welke zijn dit? Beschrijf van elke waarneming / experiment kort welk aspect men niet begreep (in 3-5 zinnen).



Opgave 3

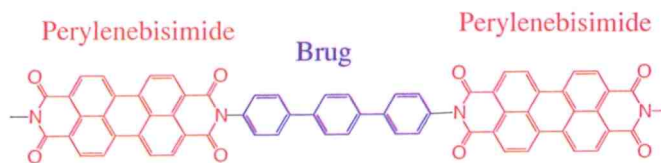
In moderne gepulste lasers kunnen extreem korte lichtpulsen worden gemaakt om chemische processen op hele korte tijdschalen te onderzoeken. Een voorbeeld van zo'n proces is het tunnelen van een lading in een molecuul. Met een Titaan-Saffier laser kan een lichtpuls worden gemaakt die 50 femtosseconden duurt ($1 \text{ fs} = 10^{-15} \text{ s}$) en een golflengte heeft van 800 nm.

- Het Heisenberg principe voor tijd en energie wordt gegeven door:

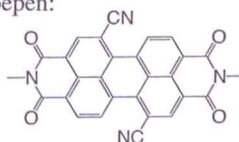
$$\Delta E \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}$$

Bereken wat de onzekerheid is in de energie van de fotonen in de bovengenoemde Ti:Saffier laser.

- In een laser wordt gebruik gemaakt van gestimuleerde emissie. Wat zijn de essentiële verschillen tussen gestimuleerde emissie en spontane emissie?
- Om een werkende laser te maken is zogenaamde populatie-inversie nodig. Leg uit wat populatie-inversie is en waarom dit nodig is om een laser te maken.
- Met behulp van een Ti-Saffier laser kan het tunnelen van elektronen in moleculen bestudeerd worden. In de onderstaande moleculen kan een elektron van de ene perylenebisimide naar de andere tunnelen door een brug die bestaat uit benzeenringen. Hoe verandert de snelheid van tunnelen wanneer het aantal benzeenringen in de brug toeneemt?



Met cyano-groepen:



- e. De peryleenbisimide aan de rechterkant wordt voorzien van cyano-groepen zoals in figuur b hierboven. Hierdoor wordt de energie van een elektron aan deze kant lager. Wat gebeurt er dan met de snelheid van tunnelen ?

Opgave 4

Voor een waterstofbromide molecuul ($^1\text{H}^{81}\text{Br}$) wordt in het infrarood vibratie spectrum een absorptieband wordt gevonden bij 2649 cm^{-1} . De bindinglengte is 141.4 pm ($1\text{ pm} = 10^{-12}\text{ m}$)

- 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 $^1\text{H}^{81}\text{Br}$
- Wat is het relatieve aantal moleculen in de rotatie toestand met $J=2$ t.o.v. de *rotatie* grondtoestand bij 1100 K ?
- Schets zowel voor de harmonische oscillator als voor een anharmonische oscillator de potentiaal als functie van de afstand en geef daarin de laagste 4 energie niveaus aan. Beschrijft kort de essentiële verschillen.