

Tentamen Inleiding Quantumchemie (MST1171)

Datum: 4 april 2013

*** 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. Golf functies met verschillende eigenwaarden van de hamiltoniaan van een systeem zijn orthogonaal.
- b. De golflengte van De Broglie wordt korter als een deeltje een hogere snelheid krijgt.
- c. Als een deeltje meer gelokaliseerd is in de ruimte dan is de onzekerheid in de snelheid kleiner.
- d. Bij het foto-elektrisch effect neemt de kinetische energie van vrijgemaakte elektronen toe met de lichtintensiteit.
- e. De energie van een foton neemt af als de golflengte toeneemt.
- f. De verwachtingswaarde geeft aan wat de meest waarschijnlijke uitkomst is van een meting aan een kwantumsysteem.
- g. De eerste meting aan een systeem heeft een probabilistische uitkomst, elke direct daarop volgende meting heeft een deterministische uitkomst.
- h. De afstand tussen opeenvolgende energieniveaus van een harmonische oscillator varieert met de energie.
- i. De afstand tussen opeenvolgende energieniveaus van een starre rotor is groter naarmate de energie hoger is.
- j. De rotatie-energie van een molecuul kan gelijk aan nul zijn.
- k. De waarde van een golf functie $\psi(x,t)$ kan negatief zijn.
- l. Elektronen die gepaard zijn in een moleculaire orbitaal hebben dezelfde spin.
- m. Volgens de Boltzmann verdeling neemt het aantal deeltjes in een hoger energieniveau toe met de massa van de deeltjes.
- n. De tunnelwaarschijnlijkheid door een energie barrière is in de kwantummechanische beschrijving niet afhankelijk van de temperatuur.
- o. De energieën van de pieken in het vibratie spectrum van een twee-atomig molecuul geven informatie over de evenwichtsafstand tussen de atomen.

Opgave 2

Beschouw een deeltje in een 1-dimensionaal doosje met afmeting L en oneindig hoge potentiaalwanden. Neem aan dat de totale golf functie van het deeltje in het doosje beschreven kan worden met de onderstaande lineaire combinatie van eigenfuncties:

$$\Psi(x, t) = c_1 \phi_1(x, t) + c_2 \phi_2(x, t) + c_3 \phi_3(x, t)$$

waarbij
$$\phi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$$

De eigenfuncties ϕ_1 t/m ϕ_3 zijn genormeerde eigenfuncties die horen bij de energie-operator \hat{H} . De eigenwaarden zijn gegeven door

$$E_n = \frac{n^2 h^2}{8mL^2} = An^2 \text{ met } A = 4 \times 10^{-3} \text{ eV.}$$

We brengen het deeltje in een toestand waarbij de eerste twee coëfficiënten de volgende waarden hebben:

$$c_1 = \frac{1-i}{\sqrt{20}} \text{ en } c_2 = -\sqrt{\frac{3}{5}}.$$

- Bereken de absolute waarde van c_3 .
- Hoeveel mogelijke uitkomsten zijn er voor metingen van de energie van het deeltje dat beschreven wordt door de totale golf functie $\Psi(x)$? Wat is voor elk van deze mogelijke uitkomsten de waarschijnlijkheid dat je deze waarde meet?
- Bereken de gemiddelde waarde van de energie die wordt gevonden bij metingen aan een groot aantal van deze (identiek geprepareerde) systemen. Geef het antwoord in eenheden van eV.
- Stel dat de waarde E_1 gevonden wordt bij een meting van de energie van het elektron. Wat is de kans om bij een tweede, direct hierop volgende meting wederom de waarde E_1 te vinden? Leg je antwoord uit.

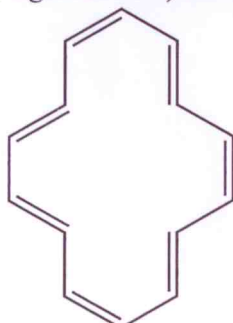
Opgave 3

Voor een gasvormig koolstofmonoxide molecuul ($^{12}\text{C}^{16}\text{O}$) is het energie verschil tussen de twee laagste rotatietoestanden gelijk aan 3.86 cm^{-1} terwijl in het infrarood vibratie spectrum een absorptieband wordt gevonden bij 2170 cm^{-1} .

- Bereken de krachtsconstante, k , van de drievoudige binding in een CO molecuul.
- Bereken de bindingslengte in het CO molecuul.
- Bereken het relatieve aantal CO moleculen in de rotatie toestand met $J=2$ t.o.v. de rotatie grondtoestand bij een temperatuur van 500 K.
- Schets de potentiële energie voor zowel de harmonische oscillator als voor de anharmonische en teken hierin de laagste 4 energie niveaus. Teken ook de golf functies behorende bij de laagste vier niveaus.
- Leg uit wat er gebeurt met de energie niveaus voor de harmonische oscillator als de krachtsconstante van de vibratie toeneemt.

Opgave 4

14-annuleen is een ringvormig molecuul bestaande uit 14 koolstof atomen, zie onder. De beweging van de 14 π -elektronen in dit annuleen molecuul kan in benadering beschreven worden als beweging van 14 deeltjes op een ring (een tweedimensionale rigide rotator). De ring heeft een straal van 330 pm.



- a) Maak een tekening van de energieniveaus van dit molecuul (2D rotator) waarbij genoeg energie niveaus getekend worden voor alle elektronen en er minimaal twee lege niveaus zijn. Geef in de tekening de bezetting van de niveaus en de bij elk niveau horende waarde van het kwantumgetal m_l .
- b) Een mogelijke oplossingen voor de Schrödinger vergelijking van de 2D rotator worden gegeven door de algemene vergelijking

$$\Phi(\phi) = Ae^{im_l\phi}$$

waarbij A een normalisatie constante is en m_l het kwantum getal. Leidt af wat de normalisatie constante is voor deze eigenfuncties.

- c) De Schrödinger vergelijking voor de 2D rotator wordt gegeven door

$$\frac{-\hbar^2}{2\mu r_0^2} \frac{d^2}{d\phi^2} \Phi(\phi) = E\Phi(\phi)$$

Laat zien dat de bij b gegeven algemene functie inderdaad een oplossing van deze Schrödinger vergelijking is en leidt een uitdrukking af voor de eigenwaarden.

- d) Bereken de golflengte van het licht dat nodig is om een elektron van de hoogste bezette orbital naar de laagste onbezette orbital in het annuleen aan te slaan (in het hier gebruikte model van de 2D rotator).
- e) Leg uit waarom er maar 1 kwantum getal nodig is om de eigenfuncties voor rotaties in 2 dimensies te beschrijven, en 2 voor rotaties in 3 dimensies.

