

Tentamen

Kwantumchemie & Fysica (4051QCHFYZ-1314FWN)

Datum: 6 April 2016, 9:00-12:00

Tijd/tijdsduur: 3 uur

Docent(en) en/of tweede lezer:

Dr. F.C. Grozema

Prof. dr. L.D.A. Siebbeles

Dit tentamen bestaat uit 5 opgaven:

1. Opgave 1 (20)
2. Opgave 2 (10)
3. Opgave 3 (25)
4. Opgave 4 (20)
5. Opgave 5 (15)

Cijfer van dit deeltentamen: aantal behaalde punten +10 gedeeld door 100

Voor het totale eindcijfer telt dit tentamen mee voor 70% (deeltoets 30%).

Voldoendegrens is cijfer 6.0

Toegestane informatiebronnen en hulpmiddelen:

- rekenmachine
- formuleblad

Vermeld duidelijk op ieder vel: naam en **Leids** studienummer

Maak dit tentamen in blauwe of zwarte inkt. Geen potlood!

Opgave 1

- 1.1 Welke van de onderstaande beweringen of tunnels is waar:
- Tunnelen is alleen mogelijk als de energie van de eindtoestand lager is dan de begintoestand.
 - Tunnelen is alleen mogelijk als de energie van de begin toestand gelijk is aan die van de eindtoestand.
 - Tunnelen door een oneindig hoge barrière is alleen mogelijk als die barrière zeer smal is.
- 1.2 De afstand tussen de energie niveaus van een deeltje in een doosje:
- blijft gelijk als het doosje breder wordt.
 - neemt af als het doosje breder wordt.
 - wordt groter als het doosje breder wordt.
- 1.3 Welk van de onderstaande beweringen is onjuist:
- De golffunctie voor een systeem met meerdere elektronen moet antisymmetrisch zijn onder uitwisseling van twee elektronen.
 - Er kunnen zich maximaal twee elektronen met dezelfde spin in 1 ruimtelijk orbital bevinden.
 - Het verwisselen van twee elektronen in een systeem met meerdere elektronen leidt tot een verandering van het teken van de golffunctie.
- 1.4 Welke van de onderstaande beweringen is juist:
- De vibratie energie van een molecuul kan nooit gelijk zijn aan nul.
 - De rotatie-energie van een molecuul kan gelijk zijn aan nul.
 - De vibratie energie van een molecuul wordt nul bij 0 Kelvin.
- 1.5 Welke van de onderstaande beweringen is waar:
- Hoe groter het aantal knopen in een eigenfunctie, hoe lager de energie van deze functie.
 - Hoe groter het aantal knopen in een eigenfunctie, hoe hoger de energie van deze functie.
 - Er is geen relatie tussen het aantal knopen in een eigenfunctie en de energie.
- 1.6 Als een licht bundel een overgang maakt naar een medium met een andere brekingsindex dan:
- Blijft de golflengte van het licht gelijk.
 - Wordt er alleen licht gereflecteerd als de brekingsindex groter is dan 1.
 - Blijft de frequentie van het licht gelijk.
- 1.7 Welk van de onderstaande beweringen is juist:
- De verwachtingswaarde van een golffunctie geeft de meest waarschijnlijke uitkomst van een meting aan een kwantum systeem.
 - De waarde van de golffunctie is evenredig met de kans om een deeltje ergens aan te treffen.
 - Het gemiddelde van een heleboel metingen aan een kwantum systeem wordt gegeven door de verwachtingswaarde.
- 1.8 Voor welk van de onderstaande kwantum systemen bestaat er een exacte oplossing van de Schrödinger vergelijking ?
- He
 - H₂
 - Li²⁺
- 1.9 Welk van de onderstaande beweringen is onjuist:
- In een Ne atoom is de energie van de 3s 3p en 3d orbitals verschillend.
 - In een H atoom is de energie 3s 3p en 3d orbitals hetzelfde.
 - In een He⁺ atoom is de energie van de 3s, 3p en 3d orbitals hetzelfde.
- 1.10 Welke van de onderstaande beweringen is juist:
- Voor een klassieke harmonische oscillator kan de energie gelijk zijn aan nul.
 - De maximale kans om een klassieke harmonische oscillator aan te treffen is in de evenwichtstoestand.
 - De maximale kans om een kwantum mechanische harmonische oscillator aan te treffen is in de evenwichtstoestand.

Opgave 2: Veer met ladingen

Twee gelijke positive puntladingen worden aan de twee verschillende uiteinden van een veer vastgemaakt. Aanvankelijk is de veer *niet* ingedrukt of uitgerekt en de lengte van de veer is dan 5 cm. In deze toestand is de Coulomb kracht tussen de ladingen gelijk aan 0.036 N.

(De krachtsconstante van de veer is 75 N/m.) ← fout!

- Bereken de grootte van de ladingen. Geef het antwoord met C (Coulomb) als éénheid.
- Door afstoting tussen de ladingen komt de veer uiteindelijk in uitgerekte toestand terecht met totale lengte van 7 cm. Bereken de krachtsconstante van de veer. Geef het antwoord in N/m met 2 significante cijfers.

Opgave 3: Elektron in halfgeleider nanostaaf

We beschouwen een elektron in een halfgeleider nanostaaf met lengte $L = 5$ nm. We beschrijven de energieniveaus van het belektron met het model van een vrij deeltje in een 1-dimensionaal doosje met oneindig hoge potentiaal buiten het de nanostaaf. De mogelijke energie niveaus zijn dus $E_n = \frac{n^2 h^2}{8mL^2}$

en de orthonormale eigenfuncties zijn $\varphi_n(x) = \sqrt{\frac{\pi}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$.

Aanvankelijk is het elektron in de grondtoestand met $n=1$.

- Bereken de golflengte van een foton waarmee het elektron naar het niveau met $n=4$ aangeslagen kan worden. Geef het antwoord in nm.

- Is de golf functie $\varphi_4(x) = \sqrt{\frac{\pi}{L}} \sin\left(\frac{4\pi x}{L}\right)$ een eigenfunctie van de impuls operator? Motiveer uw antwoord met een mathematische bewijs.

Vanuit het niveau met $n=4$ relaxeert het elektron naar lagere energie onder afgifte van warmte. Na relaxatie is de golf functie van het elektron gegeven door een superpositie van de golf functies voor $n=1$ en $n=2$, zodat $\Psi(x) = c_1\varphi_1(x) + c_2\varphi_2(x)$.

De coefficient $c_1=0.8$ en c_2 is positief.

- Bereken de waarde van c_2 .
- Wat is de kans dat direct na relaxatie van het elektron met bovenstaande golf functie $\Psi(x)$ de energie behorend bij $n=1$ (E_1) wordt gemeten?
- Wat is de kans dat daarna de energie behorend bij $n=2$ (E_2) wordt gemeten?

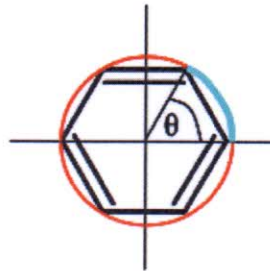
Opgave 4: Vibraties en rotaties in HCl

Voor een waterstofbromide molecuul ($^1\text{H}^{35}\text{Cl}$) wordt in het infrarood vibratie spectrum een absorptieband wordt gevonden bij 2885 cm^{-1} . De bindinglengte is 127 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 $^1\text{H}^{35}\text{Cl}$
- Wat is het relatieve aantal moleculen in de rotatie toestand met $J=1$ t.o.v. de rotatie grondtoestand bij 700 K ?
- 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.

Opgave 5: Absorptie spectrum benzeen

De beweging van de 6 π -elektronen in een benzeen molecuul (zie onder) kan in benadering beschreven worden als beweging van 6 deeltjes op een ring (een twee-dimensionale rigide rotator). De ring heeft een straal van 140 pm .



- 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 .
- 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 bij b gegeven algemene functie inderdaad een oplossing van deze Schrödinger vergelijking is en dat de eigenwaarde die bij deze algemene functie hoort gelijk is aan

$$E = \frac{\hbar^2 m_l^2}{2\mu r_0^2}$$

- Bereken de golflengte van het licht dat nodig is om een elektron van de hoogste bezette orbital naast de laagste onbezette orbital in het benzeen aan te slaan (in het hier gebruikte model van de 2D rotator).