

<p>Tentamen: Theoretische Chemie 1 (4052THECHT) (part 1)</p> <p>Datum: 21 October 2014</p> <p>Tijd/tijdsduur: 14.00-17.00 (3 uur)</p> <p>Docent(en) en/of tweede lezer:</p> <p>Dr. F. Buda Prof. G-J. Kroes</p> <p>Dit tentamen bestaat uit: (aantal opgaven en punten per opgave)</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Basisinzichten open vragen (25) 2. Operatoren en eigenfuncties (25) 3. Eenvoudige QM systemen (25) 4. Het waterstof atoom (25) <p>Studenten die hun opgaven hebben ingeleverd voor de werkcolleges en de computerlabs in het huidige academische jaar krijgen een cijfer zoals beschreven in de Syllabus van het huidige academische jaar (examen 85%, WCs 10%, Computerlabs 5%).</p> <p>Voldoendegrens is 55 van 100 punten (afgerond cijfer 6.0)</p> <p>Toegestane informatiebronnen en hulpmiddelen:</p> <p>Zakrekenmachine (een grafische rekenmachine is niet toegestaan)</p> <p>Vermeld duidelijk op ieder vel: naam en studienummer</p> <p>Maak dit tentamen in blauwe of zwarte inkt. Geen potlood!</p> <p>Veel succes!</p>	<p>Exam: Theoretical Chemistry 1 (4052THECHT) (deel 1)</p> <p>Date: 21 Oktober 2014</p> <p>Time/duration: 14.00-17.00 (3 hours)</p> <p>Lecturer(s) and/or second reader:</p> <p>Dr. F. Buda Prof. G-J. Kroes</p> <p>This examination consists of: (number of items and points per item)</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Basic knowledge (open questions) (25) 2. Operators and eigenfunctions (25) 3. Simple QM models (25) 4. Hydrogen atom (25) <p>Students who turned in their Werkcollege and Computerlab assignments in the present academic year will be graded as stated in the Syllabus of the present academic year (exam 85%, WC 10%, Computerlab 5%).</p> <p>A minimum of 55 points out of 100 is required for a pass (rounded mark = 6.0)</p> <p>Allowed information sources and tools:</p> <p>Pocket calculator (graphical calculator is not allowed)</p> <p>Please clearly indicate on each sheet: name and study number</p> <p>Please write with blue or black ink. Don't use a pencil!</p> <p>Good Luck!</p>
--	--

Tentamen TC1, Dinsdag 21 oktober 2014, 14-17 uur, Gorlaeus, Zaal 2.

1. Basisinzichten

- (a) Wat betekent de uitspraak dat de eigenfuncties van een hermitische operator een volledig stelsel vormen? (2.5 punt)
- (b) Wat betekent de uitspraak dat de twee operatoren \widehat{L}_z and \widehat{L}^2 *compatibel* zijn? (2.5 punt)
 Wat zijn de gevolgen van die eigenschap voor het waterstof atoom? (2.5 punt)
- (c) Schrijf de eigenwaarde-vergelijking op voor de x -component van de impuls operator \widehat{p}_x ; (2.5 punt)
 De eigenwaarde-vergelijking voor \widehat{p}_x is een standaard eerste-orde differentiale vergelijking. Geef de eigentoestanden, die de oplossing van die vergelijking vormen; (2.5 punt)
 Verklaar hoe de de Broglie-relatie van toepassing is op deze eigentoestanden. (2.5 punt)
- (d) Wat betekent de uitspraak dat de quantummechanische harmonische oscillator een nulpuntsenergie heeft? (2.5 punt)
- (e) Waarom worden de eigenfuncties van de Hamiltoniaan \widehat{H} *stationaire toestanden* genoemd? (2.5 punt)
- (f) Een operator wordt hermitisch genoemd als geldt:

$$\int (\widehat{H}\phi)^* \psi dx = \int \phi^* (\widehat{H}\psi) dx$$

Zij H hermitisch, met eigenfuncties ψ_i :

$$\widehat{H} \psi_i = \lambda_i \psi_i.$$

Bewijs dat voor hermitische operatoren geldt dat de eigenwaarden λ_i reëel zijn. (5 punten)

Totaal vraag 1: 25 punten.

2. Operatoren en eigenfuncties

(a) Laat zien dat de Hamiltoniaan van een vrij deeltje in één dimensie (x) en de x -component van de impuls operator commuteren. Wat is de consequentie van dit resultaat? (5 punten)

(b) Gegeven de operatoren $\hat{A} = \frac{d}{dx}$ en $\hat{B} = x$ en de functie xe^{-ax^2} , laat zien dat de operatoren \hat{A} en \hat{B} niet commuteren. (4 punten)

(c) Gegeven de operator $\frac{\partial^2}{\partial \phi^2}$ en de functie $\sin\theta\cos\phi$, is die functie een eigenfunctie van de operator? Als de functie een eigenfunctie is, wat is dan de bijbehorende eigenwaarde? (2.5 punt)

(d) Gegeven de functie $f(x) = e^{-ax^2}$ en de operator $\hat{A} = \frac{d^2}{dx^2} - bx^2$, onder welke voorwaarde voor de parameters a en b is de functie $f(x)$ een eigenfunctie van de operator \hat{A} en wat is dan de eigenwaarde? (2.5 punt)

(e) Inversie-operator

De inversie operator verandert x in $-x$: $\hat{I}f(x) = f(-x)$. Welke van de volgende functies zijn eigenfuncties van de inversie-operator \hat{I}

1. $x^3 - kx$ (2 punten)
2. $\cos kx$ (2 punten)
3. $x^2 + 3x - 1$ (2 punten)
4. $\sin x + \cos x$ (2 punten)

Geef ook de correcte eigenwaardes in het geval van eigenfuncties.

(f) Rotatie in twee dimensies

De Hamiltoniaan die de rotatie van een twee-atomig molecuul beschrijft in een vlak (nl., het xy -vlak) wordt gegeven door:

$$H_1 = -\frac{\hbar^2}{2\mu r^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2}.$$

Laat zien dat $\exp(im_j\phi)$ een eigenfunctie is van H_I . Wat is de bijbehorende eigenwaarde? (3 punten)

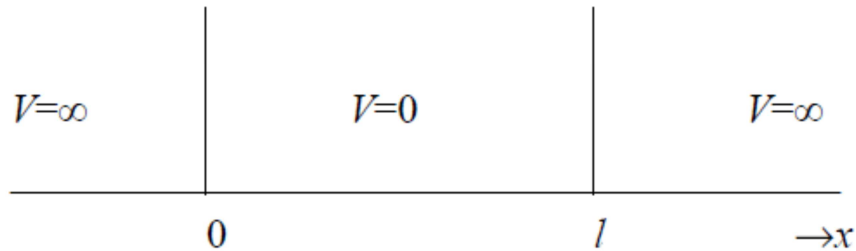
Totaal vraag 2: 25 punten.

3. Eenvoudige QM systemen

Deeltje in een doos.

Gegeven de functie $\Psi(x) = c \sin\left(\frac{\pi x}{l}\right) + d \sin\left(\frac{2\pi x}{l}\right)$,

- a. Laat zien dat $\Psi(x)$ voldoet aan de randvoorwaarden voor een deeltje in een één-dimensionale doos (zie onderstaande afbeelding) (3 punten)



- b. Is $\Psi(x)$ een eigenfunctie van de Hamiltoniaan van het deeltje in een doos? (3 punten)
- c. Gegeven dat het deeltje geheel gelocaliseerd is in een doos met lengte l , en dat het systeem wordt beschreven door de functie $\Psi(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{\pi x}{l}\right)$, is die functie een eigenfunctie van de plaats operator \hat{x} ? (3 punten)
- d. De eigenwaarden van de Hamiltoniaan van een deeltje in een doos zijn:

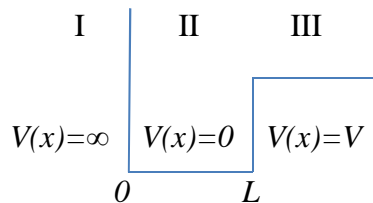
$$E_n = \frac{h^2 n^2}{8ma^2}$$

Is de nulpuntsenergie lager voor een electron of voor een He atoom in het doosje? (3 punten)

Deeltje in potentiaal put

Voor een potentiaal (zie ook figuur) geldt $V(x) = V$ voor $x > L$ (gebied III),

$V(x) = 0$ voor $0 \leq x \leq L$ (gebied II), en $V(x) = \infty$ voor $x < 0$ (gebied I).



- e. Stel de Schrödingervergelijking op voor een deeltje met massa m onder invloed van deze potentiaal. Doe dit apart voor gebied II en III. (4 punten)

De oplossing van de Schrödinger vergelijking is voor de energie $0 < E < V$ in gebied II en III steeds een lineaire combinatie van exponentiële functies met positieve en negatieve exponent. Het deeltje kan zich niet in gebied I bevinden:

$$\psi^I(x) = 0$$

$$\psi^{II}(x) = A' e^{-ikx} + B' e^{ikx}$$

$$\psi^{III}(x) = A'' e^{-\kappa x} + B'' e^{\kappa x}$$

- f. Laat door substitutie in de Schrödinger vergelijking zien wat de relatie tussen k en de energie E en de massa m van het deeltje is. En wat is de relatie tussen κ en de energie E en de massa m ? (3 punten)
- g. Voor het gegeven energie interval is de constante B'' nul. Waarom? (3 punten)

Toepassen van de voorwaarden van continuïteit van de eigenfunctie ter plekke van $x = 0$, en van continuïteit van de eigenfunctie en zijn eerste afgeleide ter plekke van $x = L$ levert drie vergelijkingen op.

- h. Geef deze drie vergelijkingen. (3 punten)

Totaal vraag 3: 25 punten.

4. **Het waterstofatoom.**

- a. De Schrödingervergelijking (SV) voor het H-atoom is

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{1}{r} \right] \psi = E\psi$$

Leg uit waarom de SV voor het H-atoom een sferische symmetrische probleem is. (5 punten)

Om een idee van de omvang van een atoom te krijgen, kunnen we o.m. de radiële nulpunten van de atomaire orbital berekenen, of we kunnen de meest waarschijnlijke afstand van het electron tot de atoomkern bepalen.

- b. De 3s eigenfunctie van het radiële probleem van het waterstofatoom is:

$$\psi_{300}(r) = \frac{1}{81\sqrt{3\pi}} \left(\frac{1}{a_0} \right)^{3/2} \left(27 - 18 \frac{r}{a_0} + 2 \frac{r^2}{a_0^2} \right) e^{-\frac{r}{3a_0}}$$

Voor welke waarde van r heeft deze golf functie nulpunten? (10 punten)

- c. Beschouw de radiële distributie functie $P(r)$ voor de 1s orbital van een waterstofachtig atoom met atoomgetal Z :

$$P(r) = \frac{4Z^3}{a_0^3} r^2 e^{-2Zr/a_0}$$

Bereken de meest waarschijnlijke afstand r^* van het electron in de 1s orbital tot de kern en bediscussieer hoe de waarde zal veranderen gaande van H naar Ne^{9+} (10 punten)

Totaal vraag 4: 25 punten.