

Quantum Chemistry and Modelling

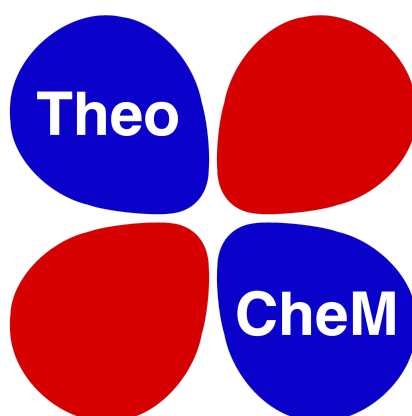
Bachelor Scheikunde – Jaar 1

Oefententamen-1

Datum: 14 Juni 2022

Aantal pagina's: 6 (inclusief voorblad)

Aantal open vragen: 3



Goniometrische gelijkheden

Machtsreductie formule:

$$\sin^2(x) = \frac{1}{2}(1 - \cos 2x)$$

Dubbele hoek-formule:

$$\sin(2x) = 2 \cos(x) \sin(x)$$

Product-naar-som-identiteiten:

$$\sin(x) \sin(y) = \frac{\cos(x-y) + \cos(x+y)}{2}$$

Opdracht 1

- a) Wat zijn de vijf postulaten van de quantum mechanica? Geef een korte beschrijving van elk postulaat.

- b) Geef de (wiskundige) definitie van een hermitische operator?

- c) Hoe luidt het variatietheorema? En wanneer is dit theorema van belang?

Opdracht 2

We beschouwen een deeltje met massa m in een doosje, waarbij het deeltje zich bevindt in een 1-dimensionale ruimte met $V(x) = 0$ tussen twee ondoordringbare muren waarvoor geldt:

$$V(x) = \infty \text{ voor } x \leq 0$$

$$V(x) = 0 \text{ voor } 0 < x < L$$

$$V(x) = \infty \text{ voor } x \geq L$$

We beschouwen de golffunctie voor de grondtoestand van dit systeem:

$$\psi_1(x) = N \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right)$$

- Vind de normalisatie constant N .
- Stel $L = 10$, bereken de waarschijnlijkheid dat het deeltje gevonden kan worden tussen $x = 4.95$ en $x = 5.05$.
- Bereken het maximum van deze golffunctie. (Geef je antwoord in L)

De Schrödinger vergelijking voor dit systeem voor het gebied $0 < x < L$ luidt:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi$$

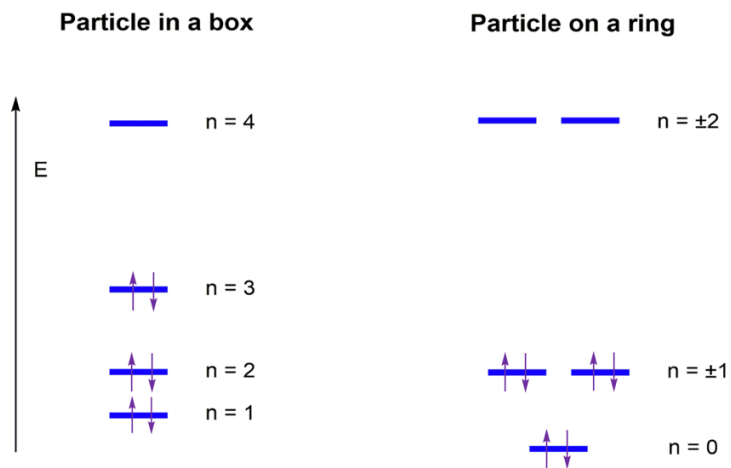
- Los de tweede-orde differentiaalvergelijking op voor $\psi_1(x)$ en bereken de energie die hoort bij deze toestand. Deze energie moet uitkomen op:

$$E_n^{DiD} = \frac{n^2 \hbar^2}{8mL^2}, \text{ waarbij } n=1$$

De energie van een deeltje in een doosje is hierboven gegeven en de energie van een deeltje op een ring is:

$$E_n^{DoR} = \frac{n^2 \hbar^2}{2mr^2}$$

- e) Stel 1,3,5-hexatrieen wordt beschreven door 6 deeltjes in een doosje met $L=2\pi r$, en benzeen wordt beschreven door 6 deeltjes in een doosje met omtrek $2\pi r$. Bereken de aromatische stabilisatie energie door het verschil in energie te berekenen tussen E_n^{DoR} en E_n^{DiD} . Zie onderstaand figuur voor de bezetting van de 6 deeltjes.



Opdracht 3

We beschouwen een deeltje met massa m dat zich beweegt langs de x -as in een potentiaalveld dat wordt gegeven door $V(x) = \frac{1}{2}k_f x^2$, de zogenoemde harmonische oscillator. Hier is k een constante groter dan nul.

- a) Geef de expliciete Schrödingervergelijking van dit systeem.

We beschouwen de golffuncties:

$$\begin{aligned}\psi_0(x) &= N_0 e^{-x^2/2\alpha^2} \\ \psi_1(x) &= N_1 \frac{2x}{\alpha} e^{-x^2/2\alpha^2}\end{aligned}$$

- b) Laat zien dat de golffuncties $\psi_0(x)$ en $\psi_1(x)$ orthogonaal zijn.

De energie behorende bij $\psi_n(x)$ wordt gegeven door:

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \nu \text{ en } \nu = \sqrt{\frac{k}{m}}$$

- c) Bepaal de energie die een foton moet hebben om een overgang plaats te laten vinden tussen $\psi_0(x)$ en $\psi_1(x)$. Zal deze energie groter, kleiner of gelijk aan de energie zijn voor een overgang tussen naburige hoger gelegen toestanden? (Geef je antwoord in \hbar , k en m)