

Oefententamen

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.

(1) Een quantummechanisch systeem wordt **volledig** beschreven door een **kwadratisch integreerbare functie** van de plaatscoördinaten van de samenstellende deeltjes en de tijd, de golf functie $\Psi(\mathbf{r}, t)$ of $Y(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N, t)$.

(2) Iedere **fysische grootheid** A wordt gekarakteriseerd door een observabele A , d.w.z., een lineaire, hermitische **operator** werkend in de vectorruimte van kwadratisch integreerbare functies.

(3) De **waarschijnlijkheid** waarmee de **eigenwaarde** van een observabele A bij 2 meting wordt gevonden is $P_n = |c_n|^2$.

(4) **Reductiepostulaat:** Wordt bij **meting** van een observabele A de **eigenwaarde** a_i gevonden, dan bevindt het systeem zich onmiddellijk na de meting in de bijbehorende **eigentoestand** ψ_i .

(5) Het gedrag van de golf functie in de tijd wordt beschreven door de z.g. **tijdsafhankelijke Schrödinger-vgl.:** $i\hbar(\partial/\partial t)Y = H Y$.

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

$$\int f^*(\mathbf{A}g)d\tau = \int (\mathbf{A}f)^* g d\tau = [\int g^*(\mathbf{A}f)d\tau]^*$$

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

$$\int \phi H \phi d\tau \geq E_0$$

(Wanneer een willekeurige (genormeerde kwadratisch integreerbare) golf functie wordt gebruikt om de energie te berekenen, zal deze energie nooit lager zijn dan de echte energie.)

- nette ϕ : genormeerd en kwadratisch integreerbaar
- E_0 : laagste exacte eigenwaarde van H
- $d\tau$: volume-element behorende bij coördinaten

Dit theorema is van belang bij het bepalen van een goede **benadering** als Ψ_0 niet opgelost kan worden, bij meer-elektron-atomen en moleculen. Ψ_0 kan benaderd worden door ϕ te **variëren** om $\int \phi H \phi d\tau$ te **minimaliseren** en zo dichterbij E_0 te komen.

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:

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

- a) Vind de normalisatie constant N .

$N = (2/L)^{1/2}$, zie Example 7B.2 op blz. 249 in Atkins voor de uitwerking.

- b) Stel $L=10$, bereken de waarschijnlijkheid dat het deeltje gevonden kan worden tussen $x = 4.95$ en $x = 5.05$.

De waarschijnlijkheid is **0.02**, zie de uitwerkingen van opgave P7B.7.

- c) Bereken op welke positie de maximum van deze golffunctie is. (Geef je antwoord in L)

$$\text{Maximum: } \frac{d}{dx} \psi_1(x) = 0$$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dx} \psi_1(x) &= \frac{d}{dx} \cdot N \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right) \\ &= N \cdot \frac{\pi}{L} \cos\left(\frac{\pi x}{L}\right) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \psi_1(x) = 0 &\rightarrow N \cdot \frac{\pi}{L} \cos\left(\frac{\pi x}{L}\right) = 0 \\ \cos\left(\frac{\pi x}{L}\right) &= 0 \end{aligned}$$

$$\frac{\pi x}{L} = \frac{1}{2}\pi, \frac{3}{2}\pi, \dots$$

$$x = \frac{1}{2}L$$

De andere waarden zoals $\frac{3}{2}L$ enz. liggen buiten het doosje ($> L$)

Een andere manier is om:

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

$$\begin{aligned} \hookrightarrow \text{maximaal als } \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right) &= 1 \\ \frac{\pi x}{L} &= \frac{1}{2}\pi, \frac{3}{2}\pi, \dots \\ x &= \frac{1}{2}L \end{aligned}$$

$$\hookrightarrow \text{waarbij het maximum: } \psi\left(\frac{1}{2}L\right) = N$$

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

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

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

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

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi \quad \text{met } \psi = N \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right)$$

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \cdot N \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right) \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d}{dx} \cdot N \cdot \frac{\pi}{L} \cdot \cos\left(\frac{\pi x}{L}\right) \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} N \frac{\pi^2}{L^2} \cdot -\sin\left(\frac{\pi x}{L}\right) \\ &= \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} \cdot N \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right) \\ &= \frac{(\hbar/2\pi)^2 \pi^2}{2mL^2} \cdot \psi \\ &= \frac{\hbar^2}{4 \cdot 2mL^2} \psi \end{aligned}$$

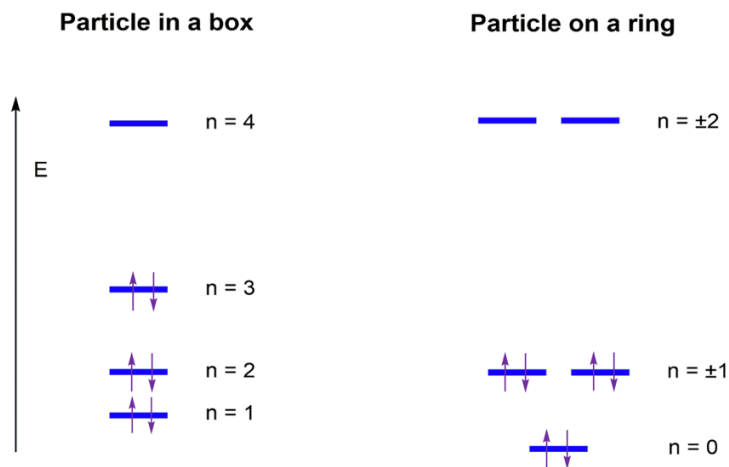
$$E = \frac{\hbar^2}{8mL^2}$$

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

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

- 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.



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

$$E_n^{DiD} = \frac{n^2 \hbar^2}{8mL^2} = \frac{n^2 \hbar^2}{8m(2\pi r)^2} = \frac{n^2 (\frac{h}{2\pi})^2}{8mr^2} = \frac{n^2 \hbar^2}{8mr^2}$$

Bij 1,3,5-hexatrieen zitten er 2 deeltjes in $\psi_1(x)$, 2 deeltjes in $\psi_2(x)$ en 2 in $\psi_3(x)$:

$$E_n^{DiD} = 2 * E_1^{DiD} + 2 * E_2^{DiD} + 2 * E_3^{DiD} = (2 * 1^2 + 2 * 2^2 + 2 * 3^2) \frac{\hbar^2}{8mr^2}$$

$$E_n^{DiD} = 28 \frac{\hbar^2}{8mr^2}$$

Bij benzeen zitten er 2 deeltjes in $\psi_0(x)$ en 4 deeltjes in $\psi_{\pm 1}(x)$:

$$E_n^{DoR} = 2 * E_0^{DoR} + 4 * E_1^{DoR} = (2 * 0^2 + 4 * 1^2) \frac{\hbar^2}{2mr^2} = 4 \frac{\hbar^2}{2mr^2}$$

$$\Delta E_{arom} = E_n^{DoR} - E_n^{DiD} = 4 \frac{\hbar^2}{2mr^2} - 28 \frac{\hbar^2}{8mr^2} = 16 \frac{\hbar^2}{8mr^2} - 28 \frac{\hbar^2}{8mr^2}$$

$$\Delta E_{arom} = -12 \frac{\hbar^2}{8mr^2}$$

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.

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{1}{2}k_f x^2 \psi = E\psi$$

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.

$$\psi_0(x) = N_0 e^{-x^2/2\alpha^2}, \quad \psi_1(x) = N_1 \frac{2x}{\alpha} e^{-x^2/2\alpha^2}$$

$$\text{Orthogonaal: } \int_{-\infty}^{\infty} \psi_0^* \psi_1 dx = 0$$

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{\infty} \psi_0^* \psi_1 dx &= \int_{-\infty}^{\infty} N_0^* e^{-x^2/2\alpha^2} N_1 \frac{2x}{\alpha} e^{-x^2/2\alpha^2} dx \\ &= \frac{2N_0^* N_1}{\alpha} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2/2\alpha^2} x e^{-x^2/2\alpha^2} dx \\ &= \frac{2N_0^* N_1}{\alpha} \int_{-\infty}^{\infty} x e^{-x^2/\alpha^2} dx \\ &= \frac{2N_0^* N_1}{\alpha} \int_{-\infty}^{\infty} x e^{-u} \frac{\alpha^2}{2x} du \quad \left\{ \begin{array}{l} u = \frac{x^2}{\alpha^2}, \quad \frac{du}{dx} = \frac{2x}{\alpha^2} \\ \hookrightarrow dx = \frac{\alpha^2}{2x} du \end{array} \right. \\ &= \frac{2N_0^* N_1}{\alpha} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\alpha^2}{2} e^{-u} du \\ &= \frac{2N_0^* N_1}{\alpha} \left[-\frac{\alpha^2}{2} e^{-u} \right] \\ &= \frac{2N_0^* N_1}{\alpha} \cdot -\frac{\alpha^2}{2} \left[e^{-x^2/\alpha^2} \right]_{-\infty}^{\infty} \\ &= -\alpha N_0^* N_1 (e^{-\infty^2/\alpha^2} - e^{-(-\infty)^2/\alpha^2}) \\ &= -\alpha N_0^* N_1 (0 - 0) \\ &= 0 \quad \rightarrow \text{ dus } \psi_0 \text{ en } \psi_1 \text{ zijn orthogonaal} \end{aligned}$$

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

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

- 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 h, k en m)

$$\Delta E = h \sqrt{k/m}$$

De excitatie energie voor naburige toestanden is altijd $\Delta E = h \sqrt{k/m}$, dus de energie blijft gelijk.