

Tentamen Theoretische Chemie I & Chemisch Binding I

29 maart 2006

Degenen die het vak Theoretische Chemie I volgen, hoeven enkel de opgaven 1 t/m 4 te maken. Degenen die voor het vak Chemische binding I het tentamen doen, worden geacht de opgaven 3 t/m 5 te maken.

1 De Heisenberg onzekerheidsrelatie

- Geef de formule van de Heisenberg onzekerheidsrelatie voor plaats en impuls.
- Leg uit in eigen woorden wat de Heisenberg onzekerheidsrelatie inhoudt.
- Wat betekenen de in de formule optredende termen? Hoe kun je deze uitrekenen, gegeven dat het systeem zich in de toestand Ψ bevindt?

2 Het variatie theorema

- Wat houdt het variatie theorema in (geen bewijs!)?
- Waarom is het variatie theorema nuttig?

3 De Hamilton operator

Geef de Hamilton operator voor het LiH molecuul.

4 De harmonische oscilator

De potentiaal voor de harmonische oscilator kan geschreven worden als:

$$V = \frac{1}{2}kx^2 = \frac{1}{2}m\omega^2x^2$$

Twee genormeerde oplossingen voor de Schrödinger vergelijking zijn:

$$\psi_0 = \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{1}{2}\alpha x^2}$$

$$\psi_1 = \left(\frac{4\alpha^3}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} x e^{-\frac{1}{2}\alpha x^2},$$

waar $\alpha = m\omega/\hbar$.

- Geef de Hamiltoniaan voor de harmonische oscillator.
- Controleer of ψ_0 en ψ_1 eigenfuncties zijn van de Hamiltoniaan van de harmonische oscillator.
- Is $\Psi = c_0\psi_0 + c_1\psi_1$ een eigenfunctie van de Hamilton operator?
- Een quantumstelsel wordt door de genormeerde golf functie Ψ beschreven. Bereken de kans dat het stelsel in toestand 0 (ψ_0) wordt gemeten, gegeven dat de coëfficiënt voor ψ_1 is: $c_1 = 0.8$.

5 MO theorie

- Wat is de MO-LCAO methode?
- Veel vuistregels voor het vormen van moleculaire orbitalen uit atomaire orbitalen volgen uit de bestudering van het 2×2 seculaire probleem:

$$(H_{11} - WS_{11})c_1 + (H_{12} - WS_{12})c_2 = 0$$

$$(H_{21} - WS_{21})c_1 + (H_{22} - WS_{22})c_2 = 0.$$

Wat is de betekenis van H_{12} , S_{11} , W en c_2 ?

- Stel dat we twee waterstof atomen hebben met elk een elctron in de 1s orbitaal om zo het waterstofmolecuul H_2 te vormen. Teken het MO-plaatje van de moleculaire orbitalen die uit deze twee atomaire orbitalen ontstaan en label de orbitalen naar symmetrie. Wat is de bindingsorde? Is het molecuul paramagnetisch of diamagnetisch? Maak een schets van beide moleculaire orbitalen.
- Is het molecuul H_2^+ paramagnetisch of diamagnetisch? Wat is de bindingsorde van H_2^+ ? Welk molecuul heeft de kortste evenwichtsafstand, H_2 of H_2^+ , en waarom?