Opgave 1

Tweedegraads differentiaal vergelijking: $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi = E\psi$

probeer $\psi = A\cos kx + B\sin kx$

randvoorwaarden: $\psi(x=0)=0 \rightarrow A=0$

$\psi(x=L)=0 \rightarrow B\sin kL=0 \rightarrow k=\frac{n\pi}{L}, n=1,2,\ldots$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}(-k^2)B\sin kx = E\cdot B\sin kx$$

$$\rightarrow E = \frac{\hbar^2k^2}{2m} = \frac{h^2n^2}{8mL^2} \quad n=1,2,3,4,\ldots$$

golffunctie is genormeerd zodat: $\int_0^L \psi^*(x)\psi(x)\,dx = 1$

$$\text{dus } 1 = B^2\int_0^L \sin^2 kx\,dx = \frac{B^2}{k}\int_0^{n\pi}\sin^2 y\,dy =$$

$$= \frac{B^2}{k}\left[\frac{1}{2}y - \frac{1}{4}\sin 2y\right]_0^{n\pi}$$

$$= \frac{B^2}{k}\left[\frac{n\pi}{2}\right] = \frac{B^2}{2}L \rightarrow B=\sqrt{\frac{2}{L}}$$

dus $\psi(x)=\sqrt{\frac{2}{L}}\sin kx$ met $k=\frac{n\pi}{L}$, $n=1,2,3$

$$E_n = \frac{\hbar^2k^2}{2m} = \frac{h^2n^2}{8mL^2} \quad n=1,2,3,\ldots$$

Opgave 2

Voor een deeltje in een 3-dimensionale doos:

$$E_n = \frac{h^2}{8m}\frac{1}{V^{2/3}}n^2$$

dus $\Delta E = E_{n+1} - E_n = (2n+1)\frac{h^2}{8mV^{2/3}}$

$V_A = 10\ nm^3$

$V_B = 1\ nm^3$ dus $\Delta E(V_A) \gg \Delta E(V_B)$

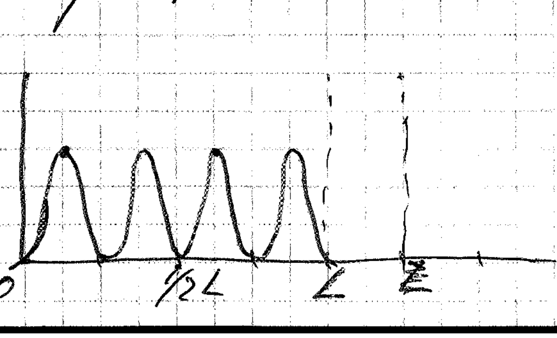
dus het makkelijkste te meten in volume A

Opgave 3

$\psi_{n=4}(x) = \sqrt{\frac{2}{L}}\sin\frac{4\pi}{L}x$

Waarschijnlijkheid $P=\psi^*(x)\psi(x)\,dx$

maxima bij $x=\frac{1}{8}L, \frac{3}{8}L, \frac{5}{8}L, \frac{7}{8}L$



Opgave 9

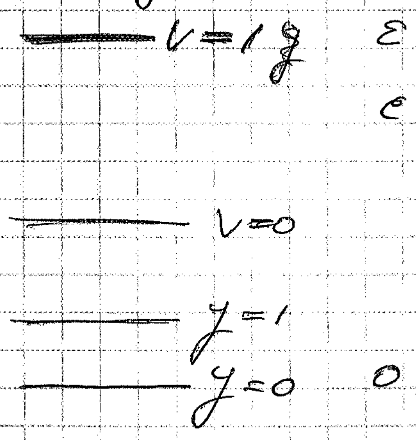
$$n_{vib} = e^{-E_{vib}/kT} \qquad E_{vib} = (v+\tfrac{1}{2})\tilde{\nu} \qquad \tilde{\nu} = 100\ cm^{-1}$$

$$n_{rot} = (2J+1)\, e^{-E_{rot}/kT} \qquad E_{rot} = BJ(J+1) \qquad B = 12\ cm^{-1}$$

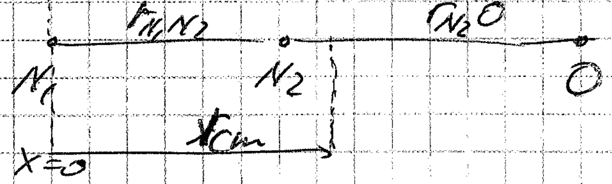
$$\rightarrow \frac{n_{rot}}{n_{vib}} = (2J+1)\, e^{-E_{rot}/E_{vib}} = (2J+1)\, e^{-\frac{BJ(J+1)}{\frac{1}{2}\tilde{\nu}}} = (2J+1)\, e^{-\frac{J(J+1)}{12.5}}$$

J	$(2J+1)$	$J(J+1)$	$e^{-\frac{J(J+1)}{12.5}}$	$(2J+1)e^{-J(J+1)/12.5}$
0	1	0	1	1
1	3	2	0.852	2.556
2	5	6	0.619	3.095
3	7	12	0.383	2.681
4	9	20	0.202	1.818
5	11	30	0.0907	0.9977
6	13	42	0.0347	0.4516

Dus $J=5$ heeft gelijke populatie ten opzichte van



Opgave 4



$M_{tot} = 2 \cdot 14 + 16 = 44$

$r_{N_1N_2} = 1.127\ Å$

$r_{N_2O} = 1.185\ Å$

$r_{N_1O} = 2.312\ Å$

$$r_{cm} = \frac{1}{M_{tot}} \sum_i m_i x_i = \frac{1}{44}\left[r_{N_1N_2} m_N + r_{N_1O} m_O\right] = \frac{14}{44} \cdot 1.127 + \frac{16}{44} 2.312 = 1.199\ Å$$

Opgave 5

Zie uitwerking werkcollege 1 opgave 5

Opgave 6

C_2H_2 : $N=4$, lineair molekuul

↳ totaal aantal vrijheidsgraden: $3 \cdot 4 = 12$

aantal vrijheidsgraden van massamiddelpunt: 3

" " " rotatie: 2

→ aantal vibraties: $12-3-2=7$

Opgave 7

Harmonische vibraties: $E_v = (v+\tfrac{1}{2}) h\nu = (v+\tfrac{1}{2})\tilde{\nu}$

Nulpuntsenergie: $E_0 = \tfrac{1}{2}\tilde{\nu}$

$207\ cm^{-1} = 298\ K$

Dus $E_0(\text{sym. strek}) = \frac{1}{2}\frac{1388}{207} \cdot 298 = \frac{1}{2} 1998\ K = 999\ K$

$E_0(\text{asym. strek}) = \frac{1}{2}\frac{2349}{207} \cdot 298 = \frac{1}{2} \cdot 3382\ K = 1691\ K$

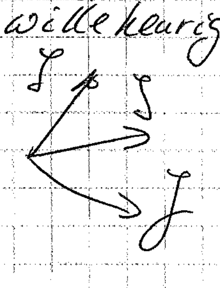
$\omega = \sqrt{\frac{k}{\mu}}$ voor zelfde $\mu_{\text{sym strek}} = \mu_{\text{asym strek}}$

volgt dus dat $k_{\text{asym strek}}$ is grootste

Opgave 8

Ontaarding: verschillende quantumtoestanden (dus toestanden met andere quantumgetallen) hebben dezelfde energie

Rotatie: de stand van de rotatie as in een isotrope ruimte is willekeurig, en al deze niveaus hebben dezelfde energie



totale ontaarding voor een rotatieniveau J

$g_J = 2J+1$