

Tussentoets Fysische Chemie 1, 27 April 2009 (voor constantes zie ommezijde).

1) Een deeltje met massa m bevindt zich in een 1-dimensionale ruimte met lengte L . De ruimte is begrensd door een oneindige potentiaal ter plekke $x=0$ en $x=L$. De Schroedingervergelijking voor het deeltje is:

$$(-\hbar^2/2m) (d^2/dx^2) \Psi = E \Psi$$

Leid af wat de energie eigenwaarden E en de bijbehorende golffuncties Ψ zijn.

2) De translatieenergie van een gas zoals N_2 in een begrensd volume is gekwantiseerd. Volume A is 10 nm^3 en volume B is 1 mm^3 . In welk volume zul je het makkelijkste deze kwantisatie kunnen meten en waarom?

3) Wat zijn de posities van een deeltje in een doosje L met potentiaal $V=0$, $0 < x < L$, en $V(x=0)=\infty$, $V(x=L)=\infty$, dat zich bevindt in quantumtoestand $n=4$, met de grootste kans om het deeltje daar aan te treffen? Leid af waarom.

4) In het lineaire N_2O molecuul is de bindingsafstand van N-N, $r_{NN} = 1.127 \text{ Angström}$, de bindingsafstand $r_{NO} = 1.185 \text{ Angström}$. Waar ligt het massamiddelpunt van het molecuul?

5) Laat zien dat het traagheidsmoment voor een diatoom met massas m_1 en m_2 op onderlinge afstand R gelijk is aan $I = \mu R^2$.

6) Hoeveel vibratiemodi heeft etheen C_2H_2 ?

7) Het CO_2 molecuul heeft een symmetrische strek vibratie bij 1388 cm^{-1} en een asymmetrische strek vibratie bij 2349 cm^{-1} .

Wat is de nulpuntsenergie in Kelvin van beide vibraties?

Welke trilling heeft de sterkste krachtsconstante denk je?

8) Energie niveaus in een quantum systeem kunnen ontaard zijn. Wat betekent dit?

De rotatiebeweging in een lineaire rotor wordt beschreven door het rotatiequantum getal J . De niveaus zijn ontaard, wat is de achterliggende reden voor de ontaarding?

Weet je een manier waarop je die ontaarding kunt opheffen?

9) Een diatomair molecuul heeft een vibratie constante $\bar{\omega} = 100 \text{ cm}^{-1}$ en een rotatieconstante $B = 12 \text{ cm}^{-1}$. De bezetting n_n van een niveau n met energie ϵ_n is gegeven door de Boltzmann factor: $n_n = g_n \exp(-\epsilon_n/kT)$, met g_n de ontaarding van niveau n , k de constante van Boltzmann en T de thermodynamische temperatuur.

Wat is het laagste rotatieniveau J dat minder bezetting heeft dan het eerste vibratieniveau $v=1$? Leg uit waarom.

$c = 2.99792458 \cdot 10^8 \text{ m/s}$
elementaire lading $e = 1.6022 \cdot 10^{-19} \text{ C}$
 $k = 1.3807 \cdot 10^{-23} \text{ J/K}$
 $R = 8.31447 \text{ J/(K mol)}$

$h = 6.62608 \cdot 10^{-34} \text{ Js}$
atomaire massa eenheid $u = 1.66054 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$
getal van Avogadro: $N_A = 6.02214 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}$