

Tentamen Fysische Chemie 2 (Moleculaire Interactie en Dynamica)
14 December 2009

Zie voor hulp bij de beantwoording ook de constanten en formules op volgende blz.

- 1) De structuur van deeltjes als atomen en molekulen wordt beschreven door de Schrödinger vergelijking: $H\psi = E\psi$.
Leg duidelijk uit wat de grootte (operator) H beschrijft over de atomen en moleculen.
Wat is E en hoe moeten we ψ interpreteren?
- 2) De kinetische energie van een deeltje met massa m en impuls $\mathbf{p} = (p_x, p_y, p_z)$ is $\mathbf{p}\cdot\mathbf{p}/2m$.
De quantum mechanische operator voor de impuls is $\mathbf{p} = (\hbar/i)(\partial/\partial x, \partial/\partial y, \partial/\partial z)$.
Geef de Schrödinger vergelijking voor een deeltje in een doos met lengte (L_x, L_y, L_z) en leidt expliciet af wat de eigenfuncties en eigenwaarden zijn.
- 3) Stel we hebben een quantum deeltje dat zich beweegt in een cirkel. De eigenfuncties behorende bij deze beweging zijn:
 $\psi_m(\varphi) = N e^{-im\varphi}$, met $m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$ and $0 \leq \varphi < 2\pi$.
Wat is de normalisatieconstante N en laat expliciet zien hoe die berekend wordt.
- 4) Bereken de snelheid die een stilstaand He-atoom zal krijgen na absorptie van een foton met een golflengte van 780 nm.
- 5) Stel we hebben een 1-dimensionaal systeem van een $^{12}\text{C}^1\text{H}$ deeltje met totale massa $m=13$ u dat ter plekke $x=0$ een barriere tegenkomt met lengte L en hoogte V . De golf functie van het deeltje binnen de barriere kan geschreven worden als: $\psi = Ne^{-kx}$.
a) Bereken de waarschijnlijkheid dat het deeltje zich binnen de barriere bevindt.
b) Wat is de gemiddelde doordringlengte van het deeltje binnen de barriere?
c) Welk deeltje heeft de grootste gemiddelde doordringlengte, $^{12}\text{C}^1\text{H}$ of ^{12}Mg , en waarom?
- 6) Stel we hebben het N_2 molecuul met een (harmonische) krachtsconstante $k=2293.8$ N/m. We meten een puur vibrationeel Raman spectrum van N_2 met een laser bij een golflengte van $\lambda=512$ nm.
Bereken en geef in een duidelijke figuur aan hoe het Raman spectrum eruit ziet.
Wat is de nulpuntsenergie van N_2 ?
- 7) Bereken de frequentie van de straling die benodigd is om een pure rotatieovergang te maken van $J = 5 \leftarrow 4$ in $^{14}\text{N}^{16}\text{O}$. De evenwichtsbindingsafstand van $^{14}\text{N}^{16}\text{O}$ is 115 pm.

8) We hebben een deeltje met massa m in een 1-dimensionaal doosje met lengte L . Het deeltje bevindt zich in de laagste energie toestand, de grondtoestand.

a) Wat is de quantummechanische golf functie van dit deeltje ?

b) Wat is de waarschijnlijkheid dat het zich bevindt tussen $x=0.49L$ en $0.51L$; neem aan dat de golf functie in dit interval constant is.

9) Stel we maken een moleculaire bundel van ICl , de rotatieconstante is $B = 0.1142 \text{ cm}^{-1}$. Het blijkt dat als we met een laser meten wat de bezetting is over de rotatietoestanden van ICl we de bezetting kunnen beschrijven met een Boltzmannverdeling met een temperatuur $T=55$ Kelvin.

a) Geef in een duidelijke tekening met uitleg aan hoe je zo'n experiment zou opzetten waarmee je deze bezetting kunt meten?

b) Welk rotatieniveau J is het meest bezet in de moleculaire bundel en wat is de ontaardingsgraad van dit niveau?

10) Stel we meten het IR-absorptiespectrum $v=1 \leftarrow v=0$ van het diatoom AB met een vibratieconstante $\omega_e = 2991 \text{ cm}^{-1}$.

a) Hoe ziet het IR-spectrum er ruwweg uit, geef een duidelijke tekening met uitleg.

b) Stel we meten de volgende overgangsfrequenties:

$$(v=1, J=4) \leftarrow (v=0, J=5) = 2873 \text{ cm}^{-1}$$

$$(v=1, J=5) \leftarrow (v=0, J=4) = 3079 \text{ cm}^{-1}$$

$$(v=1, J=6) \leftarrow (v=0, J=5) = 3093 \text{ cm}^{-1}$$

$$(v=1, J=5) \leftarrow (v=0, J=6) = 2845.8 \text{ cm}^{-1}$$

Wat is de verhouding B_1/B_0 en waarom zijn de rotatieconstantes van $v=1$, B_1 , en $v=0$, B_0 , verschillend?

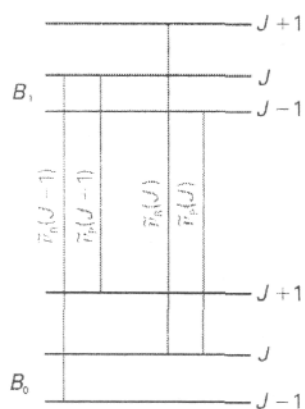


Figure 13-36
4th Ed Physical Chemistry, English Edition
© 2008 Pearson Education, Inc. and John Wiley & Sons, Inc.

Constantes en formules:

$$c = 2.99792458 \cdot 10^8 \text{ m/s}$$

$$\text{elementaire lading } e = 1.6022 \cdot 10^{-19} \text{ C}$$

$$\text{constante van Boltzmann } k = 1.3807 \cdot 10^{-23} \text{ J/K}$$

$$R = 8.31447 \text{ J/(K mol)}$$

$$h = 6.62608 \cdot 10^{-34} \text{ Js}$$

$$\text{atomaire massa eenheid } u = 1.66054 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$$

$$\text{getal van Avogadro: } N_A = 6.02214 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}$$