# Herhalingstentamen Theoretische Chemie I

5^e^ paasdag 2010

## 1 Stern-Gerlach experiment

Een belangrijk experiment om quantummechanisch gedrag van deeltjes aan te tonen is het Stern-Gerlach experiment. Beschrijf het experiment en hoe quantummechanische deeltjes te onderscheiden zijn van klassieke deeltjes met dit experiment.

## 2 Deeltje in de doos

Gegeven zijn de stationaire oplossingen van de tijdsonafhankelijke Schrödinger vergelijking voor een deeltje met massa $m$ in een 1D-doos van 0 tot $l$

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{l}}\sin(k_n x), \qquad E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m}, \qquad k_n = \frac{n\pi}{l}, \qquad n = 1, 2, 3, \ldots$$

a) Stel dat het elektron in de tijdsonafhankelijke toestand $\psi_1(x)$ zit, wat is dan de verwachtingswaarde van $\langle x\rangle$? (Schets de golffunctie en probeer het antwoord zonder berekening te vinden.)
En wat is de verwachtingswaarde als het elektron in de toestand $\psi_4(x)$ zit?

b) Geef de tijdsafhankelijke oplossingen $\psi_n(x,t)$ met $n = 1$ en $n = 4$ voor de tijdsafhankelijke Schrödinger vergelijking.
Verschillen de verwachtingswaarden van $\langle x\rangle$ van $\psi_1(x,t)$ en $\psi_4(x,t)$ van de onder $a$) gevonden waarden? In het bijzonder: zijn ze afhankelijk van $t$?

c) Gegeven is de volgende genormeerde, tijdsafhankelijke golffunctie

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{5}}\big(\psi_1(x,t) + 2\psi_4(x,t)\big).$$

Bepaal de verwachtingswaarde $\langle x\rangle(t)$. Hoe gedraagt $\langle x\rangle(t)$ zich in de tijd?

**Gegeven integraal:**

$$\langle\psi_n|x|\psi_m\rangle = \int_0^l \mathrm{d}x\, \psi_s^*(x)x\psi_m(x) = \frac{4l}{\pi^2}\frac{mn}{(m^2-n^2)^2}\left((-1)^{m+n} - 1\right) \quad \text{voor } n \neq m$$

## 3 Waterstofachtige ionen

De $1s$ en $2s$ oplossingen voor de Schrödinger vergelijking van waterstofachtige ionen (ionen met maar 1 elektron) met een kernlading $Ze$, zijn gegeven als

$$\Psi_{1s}(r,\theta,\phi) = \frac{1}{\sqrt{\pi}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} e^{-Zr/a_0}$$
$$\Psi_{2s}(r,\theta,\phi) = \frac{1}{\sqrt{\pi}}\left(\frac{Z}{2a_0}\right)^{3/2}\left(1-\frac{Zr}{2a_0}\right) e^{-Zr/2a_0}$$

a) Laat expliciet zien dat de $1s$ en $2s$ functies orthogonaal zijn.

b) Geef een uitdrukking voor de kans, $P(r)$, om het elektron op een afstand $r$ van de kern in een bolschil met een dikte $dr$ te vinden.

c) Bereken voor de $1s$ toestand de gemiddelde waarde voor de afstand van het elektron tot de kern, $\langle r\rangle$.

d) Bepaal voor de $1s$ toestand de straal $r_e$ waar je de hoogste kans hebt het elektron te vinden, dus waar $P(r)$ maximaal is.

e) Bereken voor de $1s$ toestand de kans het elektron op een afstand kleiner dan $r_e$ te vinden.

**Integraal tip:**
Om te voorkomen dat je zeer vaak partieel moet integreren, gebruik de volgende truc:

$$\int_0^R \mathrm{d}r\, r^n \mathrm{e}^{-\alpha r} = \int_0^R \mathrm{d}r\, r^{n-1}\frac{-\partial}{\partial\alpha}\mathrm{e}^{-\alpha r} = \frac{-\partial}{\partial\alpha}\int_0^R \mathrm{d}r\, r^{n-1}\mathrm{e}^{-\alpha r} = \left(\frac{-\partial}{\partial\alpha}\right)^n \int_0^R \mathrm{d}r\, \mathrm{e}^{-\alpha r}$$

Gegeven is ook (als $\alpha > 0$):

$$\int_0^\infty \mathrm{d}r\, r^n \mathrm{e}^{-\alpha r} = \frac{n!}{\alpha^{n+1}}$$

## 4 Het waterstofatoom

De paashaas heeft afgelopen zondag een ei verstopt op de VU en het bleek versierd te zijn met de volgende uitdrukking voor de toestand van een elektron in de potentiaal van een proton

$$\Psi(r,\theta,\phi) = \frac{1}{\sqrt{19}}\Big[R_{50}(r)Y_0^0(\theta,\phi) + 3R_{54}(r)\big(2Y_4^{-3}(\theta,\phi) - 10Y_4^{-1}(\theta,\phi)\big)\Big]$$

a) Controleer of de paashaas de golffunctie $\Psi$ goed genormeerd heeft. Indien niet, verbeter de paashaas. Geef duidelijk aan van welke eigenschappen van $R_{nl}(r)$ en $Y_l^m(\theta,\phi)$ je gebruik maakt.

b) Controleer of de golffunctie $\Psi$ een eigenfunctie is van de volgende operatoren: $\hat{H}$, $\hat{L}^2$ en $\hat{L}_z$. Zo ja, geef de bijbehorende eigenwaarde. Indien niet, geef de waarden die gemeten kunnen worden voor deze operatoren en met welke kans ze waargenomen kunnen worden.