Tentamen Theoretische Chemie I

17 februari 2009

1 Theorie

a) De personen in figuur 1 hebben in meer of mindere mate ervoor gezorgd dat jullie een tentamen theoretische chemie mogen maken. Verbind de juiste afbeeldingen van de personen uit figuur 1 met de afbeeldingen uit figuur 2.
b) Geef de Hamiltoniaan voor het Neptunium atoom (Np). Je krijgt een bonus als je de sommaties over het juiste aantal elektronen laat lopen.
c) Gegeven zijn twee oplossingen van de tijdsonafhankelijke Schrödinger vergelijking: $\psi_1(\boldsymbol{x})$ en $\psi_2(\boldsymbol{x})$ met energieën E_1 en E_2 respectievelijk. Geef de bijbehorende oplossingen $\Psi_1(\boldsymbol{x}, t)$ en $\Psi_2(\boldsymbol{x}, t)$ voor de tijdsafhankelijke Schrödinger vergelijking.
d) Voldoet een lineaire combinatie van $\Psi_1(\boldsymbol{x}, t)$ en $\Psi_2(\boldsymbol{x}, t)$ (uit opgave **1c**) ook aan de tijdsafhankelijke Schrödinger vergelijking? Verklaar je antwoord.
e) Stel dat er een operator $\hat{A}$ gegeven is, met twee eigenfuncties v_1 en v_2. Dat wil zeggen

$$\hat{A}v_1 = \lambda_1 v_1$$
$$\hat{A}v_2 = \lambda_2 v_2$$

Met $\lambda_1 \neq \lambda_2$. Laat zien of $v_1 + v_2$ een eigenfunctie is.

2 Het Deeltje en de Doos

Gegeven is de volgende potentiaal

$$V(x) = \begin{cases} 0 & -\pi a \leq x \leq \pi a \\ \infty & \text{elders.} \end{cases}$$

a) Schets hoe je verwacht dat de grondtoestand $\psi_1(\boldsymbol{x})$ en de eerste aangeslagen toestand $\psi_2(\boldsymbol{x})$ eruit zien en geef een wiskundige formule voor beide functies.
b) Los de tijdsonafhankelijke Schrödinger vergelijking op voor dit systeem en normeer de oplossingen.
c) Bereken $\langle p_x \rangle$ en $\langle p_x^2 \rangle$ voor de grondtoestand en de eerste aangeslagen toestand.
d) Formuleer het Heisenberg onzekerheids principe.

e) Laat zien dat de golffunctie van de grondtoestand ψ_1 en de eerste aangeslagen toestand ψ_2 hieraan voldoen. Gegeven is dat

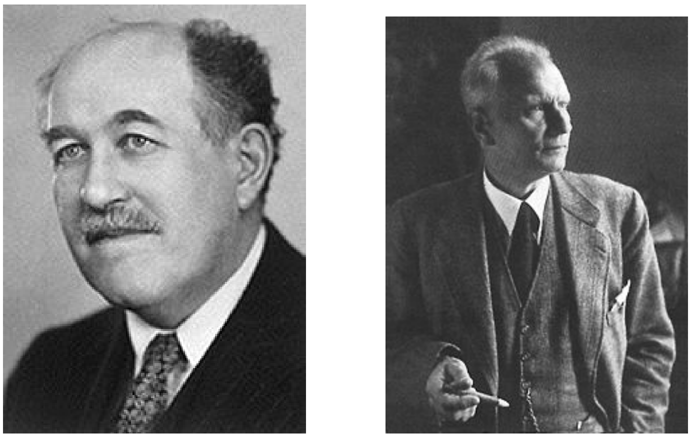
$$\langle\psi_1|x^2|\psi_1\rangle = a^2\left(\frac{\pi^2}{3} - 2\right)$$
$$\langle\psi_2|x^2|\psi_2\rangle = a^2\left(\frac{\pi^2}{3} - \frac{1}{2}\right).$$

3 Waterstof

Gegeven is een golffunctie

$$\Psi(r,\theta,\phi) = \frac{N}{\sqrt{\pi}}\Big(R_{21}(r)Y_1^1(\theta,\phi) + 3R_{42}(r)Y_2^1(\theta,\phi) + R_{63}(r)Y_3^1(\theta,\phi)\Big)$$

a) Normeer deze golffunctie en laat duidelijk zien van welke eigenschap(pen) van $R_{nl}(r)$ en $Y_l^m(\theta,\phi)$ je gebruik maakt.
b) Is deze golffunctie een eigenfunctie van de Hamiltoniaan? Van de operator $\hat{L}_z$? Van de operator $\hat{L}^2$? Zo ja, wat is de eigenwaarde? Zo nee, wat zijn de mogelijke meetwaardes en de bijbehorende kansen om in een experiment ook daadwerkelijk die waarde te meten?
c) Wat is de verwachtingswaarde van de Hamiltoniaan?



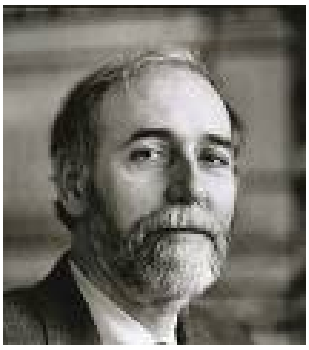
(a) Otto Stern en Walter Gerlach

(b) Werner Heisenberg

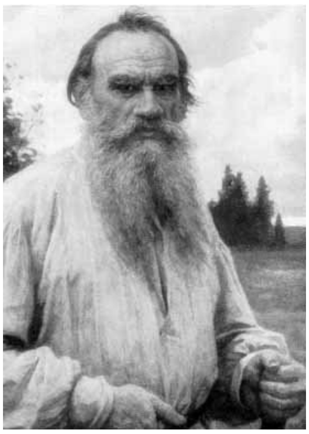
(c) Max Planck

(d) Erwin Schrödinger

(e) Johannes Brahms



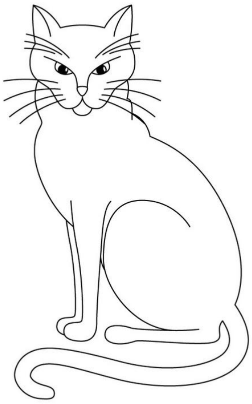
(f) Evert Jan Baerends



(g) Leo Tolstoy

(h) Niels Bohr

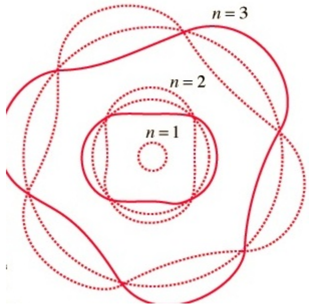
Figuur 1: Personen die in meer of mindere mate belangrijk zijn voor jullie ervaring van de quantum mechanica



(a)

$$h$$

(b)



(c)

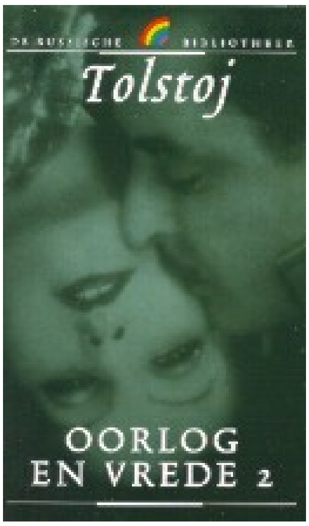
(d)

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$$

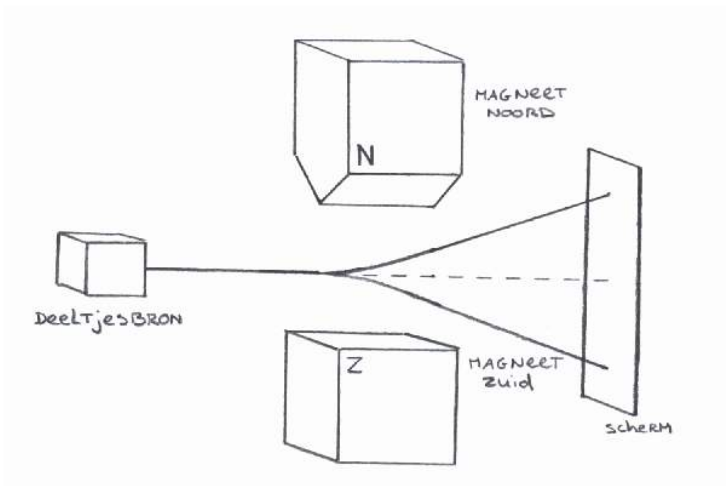
(e)

TC1 Dictaat

(f)



(g)



(h)

Figuur 2: Bijbehorende plaatjes