Tentamen Theoretische Scheikunde I

26 maart 2008

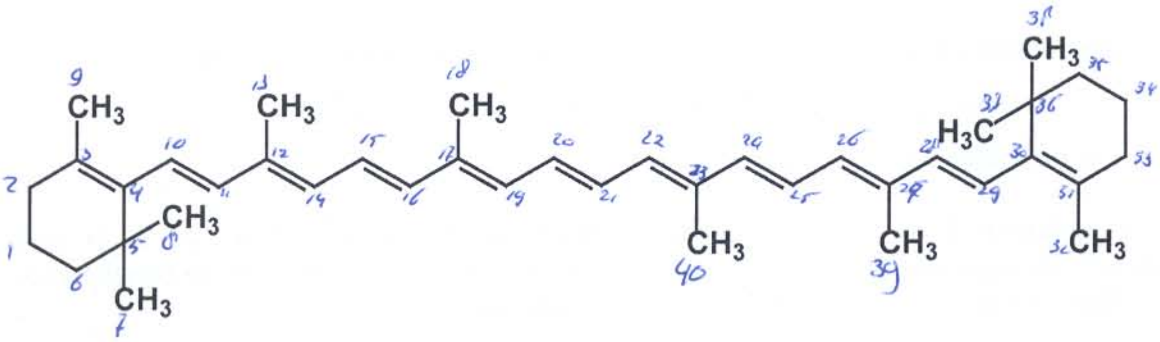
Aan het eind van het tentamen staan formules en constanten die je kunt gebruiken.

1 Theorie

Formuleer de onzekerheidsrelatie van Heisenberg voor plaats en impuls. En leg de betekenis ervan uit.

2 Worteltjes

Worteltjes staan bekend om hun hoge gehalte aan de provitamine β-caroteen. De structuurformule is gegeven in de figuur hieronder. Het π-geconjugeerd systeem functioneert als een soort 1-dimensionale doos voor de elektronen. Door het verschil tussen de grondtoestand en de eerste aangeslagen toestand van deze "doos" te bepalen, kunnen we een aardige schatting maken van de belangrijkste absorptie lijn van β-caroteen.



a) Los het deeltje in de 1-dimensionale doos op, waarbij de doos van 0 tot L loopt. Bepaal zowel de stationaire, genormeerde oplossingen $\psi_n(x)$ als de bijbehorende energieën E_n.
Met andere woorden los de Schrödinger vergelijking op voor

$$V(x) = \begin{cases} 0 & 0 \leq x \leq L \\ \infty & \text{daar buiten} \end{cases}$$

b) Laat zien dat het verschil tussen twee naast elkaar liggende energieniveaus wordt gegeven door

$$E_{n+1} - E_n = (2n+1)\frac{h^2}{8m_e L}$$

Als schatting voor de lengte van de "caroteen doos" nemen we het aantal C–C-eenheden maal hun effectieve lengte in de z-richting. Dus krijgen we voor de lengte $L = (N-1)R_z^{\mathrm{CC}}$ waarbij N het aantal koolstofatomen is die de doos vormen. Elk koolstofatoom draagt 1 elektron bij aan het π-geconjugeerd systeem. Het aantal elektronen in de doos is dus N. Verder hebben elektronen de eigenschap dat er maximaal twee in een niveau kunnen zitten. De energie van de eerste en belangrijkste piek waar licht geabsorbeerd wordt, is daarom gegeven door $\Delta E = E_{N/2+1} - E_{N/2}$.

c) Neem aan dat $R_z^{\mathrm{CC}} = 0.120$ nm. Bepaal de lengte van de doos L en bereken ΔE.
Hint: Je mag grove schattingen gebruiken, bijvoorbeeld $h = 7 \cdot 10^{-34}$ Js.

d) Wat is de frequentie van dit geabsorbeerde licht? En de golflengte?

Als het goed is heb je een waarde voor de golflengte die in het infrarood ligt. De absorptie piek zou echter in het blauwe gebied (≈ 450 nm) moeten liggen, zodat de oranje kleur terug wordt gereflecteerd zoals bij worteltjes het geval is. We zitten er dus maar een factor 2 naast wat al heel aardig is voor zo'n grof model.

3 Waterstof

Op een zeker tijdstip is de volgende golffunctie voor een waterstofatoom gegeven:

$$\Psi(r,\theta,\phi) = 2R_{21}(r)Y_1^0(\theta,\phi) + 4R_{31}\left[Y_1^{-1}(\theta,\phi) + 3Y_1^0(\theta,\phi)\right].$$

a) Normeer de golffunctie $\Psi(r,\theta,\phi)$.

b) Is de golffunctie Ψ een eigenfunctie van de $\hat{H}$ operator? Van $\hat{L}^2$? Van $\hat{L}_z$? Zo ja, geef de bijbehorende eigenwaarde. Indien niet, geef de mogelijke meetwaarden met de bijbehorende kansen. Vergeet niet de *genormeerde* golffunctie te gebruiken!

c) Bereken de verwachtingswaarde voor $\hat{L}_z$.

4 Spin

We beginnen met een golffunctie, die een spin $\frac{\hbar}{2}$ in de z-richting heeft: $\psi_z = \binom{1}{0}$. We willen vervolgens de spin gaan meten in het xz-vlak, onder een hoek van 60 graden met de z-as. Deze eigenschap wordt gegeven door de operator:

$$S_{zx} = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2}\sqrt{3} \\ \frac{1}{2}\sqrt{3} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}$$

Verder is nog gegeven dat de spin in de x-richting bepaald kan worden met de operator:

$$S_x = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

a) Wat is de verwachtingswaarde van S_x voor ψ_z?

b) Laat zien dat de operator S_{zx} de vectoren $\frac{1}{2}\binom{\sqrt{3}}{1}$ en $\frac{1}{2}\binom{-1}{\sqrt{3}}$ als eigenvectoren heeft.

c) Wat zijn de kansen om de verschillende eigenwaarden van S_{zx} te meten?

Formules en constanten

$$h = 6.626 \cdot 10^{-34}\ \mathrm{Js}$$
$$m_e = 9.109 \cdot 10^{-31}\ \mathrm{kg}$$
$$c = 2.998 \cdot 10^{8}\ \mathrm{ms}^{-1}$$
$$a_0 = 0.529 \cdot 10^{-10}\ \mathrm{m}$$

$$R_{10}(r) = 2\left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2} \mathrm{e}^{-r/a_0} \qquad Y_0^0(\theta,\phi) = \sqrt{\frac{1}{4\pi}}$$

$$R_{21}(r) = \frac{2}{\sqrt{3}}\left(\frac{1}{2a_0}\right)^{3/2} \frac{r}{2a_0}\mathrm{e}^{-r/2a_0} \qquad Y_1^0(\theta,\phi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos(\theta)$$

$$R_{31}(r) = \frac{4}{3\sqrt{2}}\left(\frac{1}{3a_0}\right)^{3/2}\left(2 - \frac{r}{3a_0}\right)\frac{r}{3a_0}\mathrm{e}^{-r/3a_0} \qquad Y_1^{-1}(\theta,\phi) = \sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin(\theta)\mathrm{e}^{-i\phi}$$