

Tentamen Spectroscopie en Quantumchemie – MLS

Maandag 27 maart, 13:00 – 16:00 uur

David Lloyd Hal3

Lees dit eerst!

Graag op alle papieren die je inlevert je naam en studentnummer vermelden. Geef bij alle antwoorden **een duidelijke toelichting** waarin je aangeeft hoe je tot het antwoord gekomen bent.

Maak de opgaven Spectroscopie en de opgaven Quantumchemie op aparte vellen!

De opgaven Spectroscopie en Quantumchemie tellen elk voor de helft mee in het eindcijfer.

Bij enkele opgaven heb je een rekenmachine of geodriehoek nodig. Mocht je die vergeten zijn, dan heeft de surveillant er één beschikbaar. Als je recht hebt op extra tentamentijd, dan kun je tot 16:30 uur doorwerken.

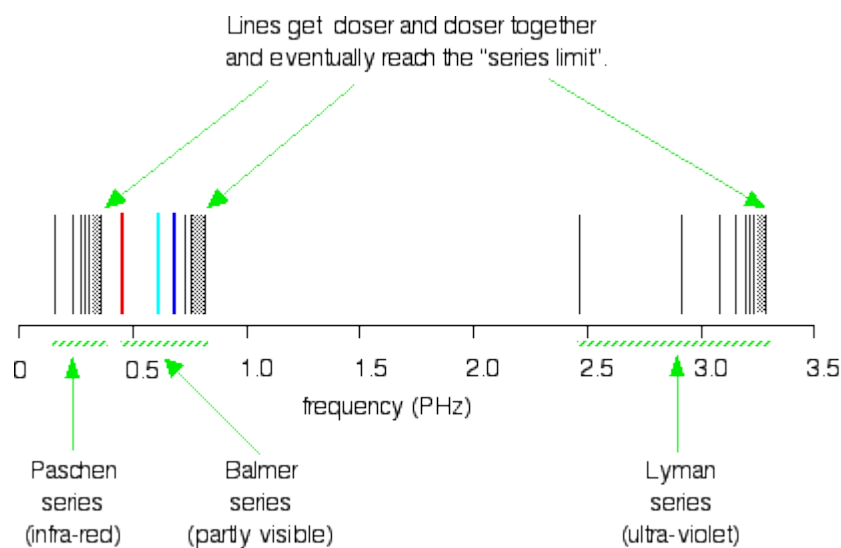
Na afloop mag je de opgaven meenemen. Veel succes!

Opgaven Spectroscopie

Opgave 1

(15)

In de onderstaande figuur zijn voor de Lyman, Balmer en Paschen series de posities van lijnen gegeven. De positie is gegeven in de (in de spectroscopie ongebruikelijke) eenheid PHz (Peta Hertz, 10^{15} Hz).



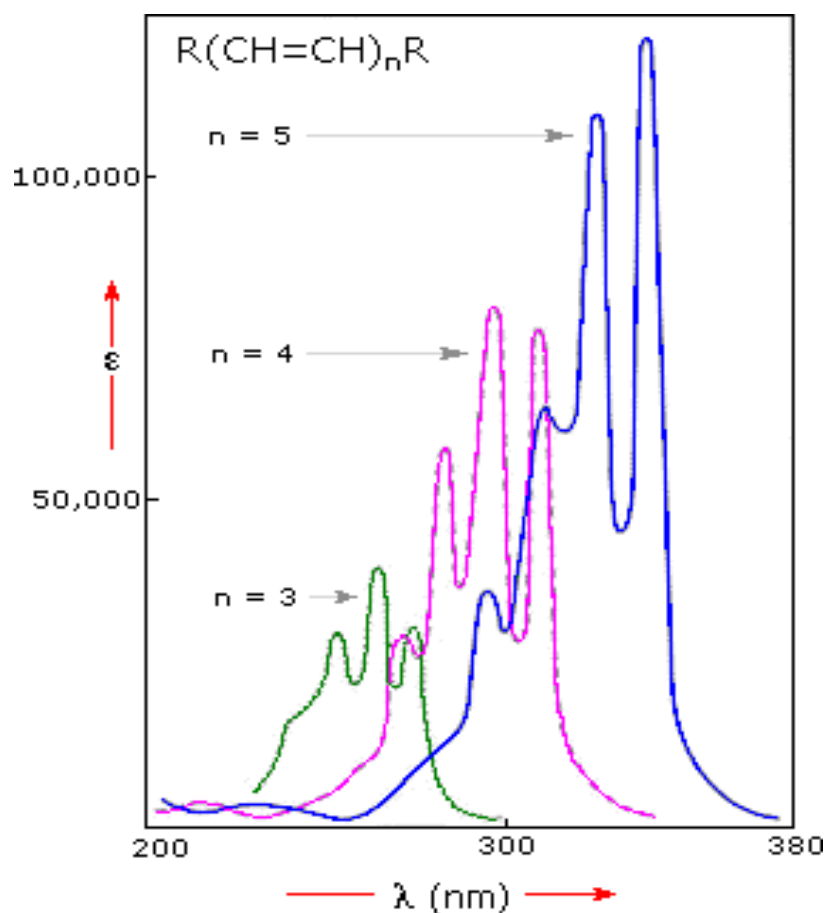
- a) Het is lastig de precieze positie van de lijnen af te lezen. Bereken voor de eerste twee lijnen van de Lyman serie de positie (in PHz) in drie significante cijfers. In de figuur liggen de lijnen net beneden 2.5 PHz en beneden 3.0 PHz) **(5)**
- b) Boven de figuur staan pijlen naar de grenzen ('series limits'). Bepaal de drie 'series limits' in nm (golflengte) en in cm^{-1} (energie) **(5)**
- c) In de Balmer series zijn drie lijnen gekleurd (rood, blauw-groen en blauw). Verklaar de kleuren. **(5)**

Aanwijzing: $E(\text{cm}^{-1}) = R_H (1/n_1^2 - 1/n_2^2)$; $R_H = 109\,737 \text{ cm}^{-1}$

Opgave 2

(15)

In de onderstaande figuur zijn de absorptiespectra gegeven van drie moleculen $R(\text{CH}=\text{CH})_nR$ waarbij n varieert van 3 tot 5.

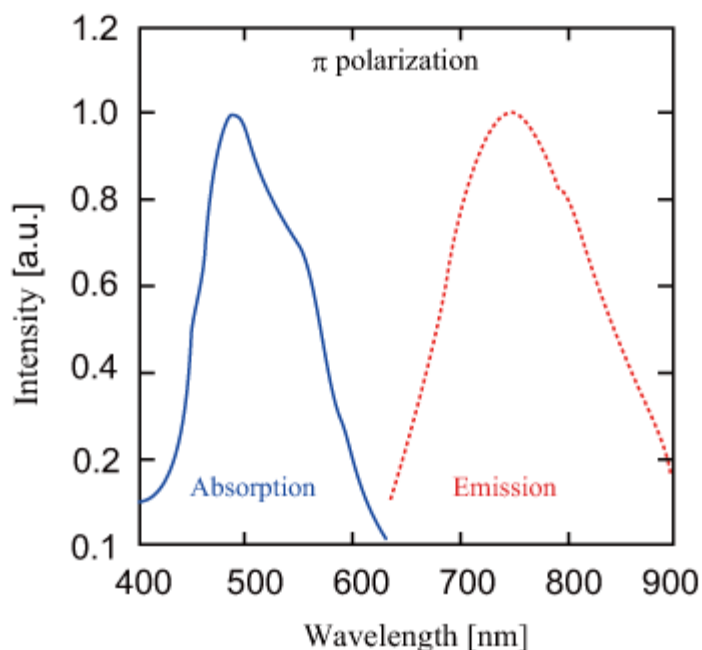


- a) Verklaar de verschuiving van de absorptiespectra naar langere golflengtes als n toeneemt (5)
- b) Bepaal, indien mogelijk, de energie van vibraties in i) de grondtoestand en ii) de aangeslagen toestand van het molecuul met $n=3$ (groene spectrum). Laat duidelijk zien hoe u de energie berekent. (5)
- c) Het molecuul met $n=5$ vertoont twee emissiebanden: één bij 370 nm en één bij 480 nm. Verklaar waarom het molecuul twee emissiebanden vertoont, beschrijf de overgangen die verantwoordelijk zijn voor de emissie en geef een schatting voor de levensduur van beide emissies. (5)

Opgave 3

(15)

Het Ti^{3+} ion heeft de $3d^1$ configuratie. In de onderstaande figuur zijn het absorptie- en emissiespectrum van Ti^{3+} in Al_2O_3 gegeven. In het Al_2O_3 kristal vervangt het Ti^{3+} ion een klein deel van de Al^{3+} ionen in het rooster en de Ti^{3+} ionen zijn in het kristal omringd door een octaëder van O^{2-} liganden.



- Teken hoe en verklaar waarom de vijf d-orbitalen d_{xy} , $d_{x^2-y^2}$, d_{xz} , d_{yz} en d_z^2 opsplitsen in een octaëder van O^{2-} liganden (5)
- Hoe groot is de Stokes shift voor de Ti^{3+} emissie? (5)
- De molaire extinctie-coëfficiënt voor de 500 nm absorptie is ongeveer $15 \text{ M}^{-1}\cdot\text{cm}^{-1}$. De levensduur van de Ti^{3+} emissie bij 760 nm is 3 μs . Verklaar deze waarnemingen. (5)

Ga verder op een nieuw blad!

**Tentamen SK-BSPAN Deeltoets-A MLS Kwantum 27
maart 2017 13:00 uur**

Constanten

Lichtsnelheid:

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

Planck constanten:

$$h = 6.62606957 \times 10^{-34} \text{ Js}$$

$$\hbar = h/2\pi$$

Massa electron:

$$m_e = 9.10938215 \times 10^{-31} \text{ kg}$$

Massa proton:

$$m_p = 1.67262178 \times 10^{-27} \text{ kg} \quad (\text{massa proton})$$

Lading elektron:

$$e = 1.60217662 \times 10^{-19} \text{ C}$$

Permutiviteit vacuum:

$$\epsilon_0 = 8.854187818 \times 10^{-12} \text{ C}^2 \text{ s}^2 / \text{ kg m}^3$$

Formules

De Broglie:

$$\lambda = \frac{h}{mv}$$

De Planck-Einstein:

$$E = h\nu$$

Kinetische energie:

$$E_k = \frac{1}{2}mv^2$$

Vraag 1

- a. Een golffunctie die een fysisch deeltje beschrijft is altijd genormaliseerd? Waarom is dit?
- b. Helium heeft een tweede ionizatie energie van 8.761×10^{-18} J. We schijnen licht met een golflengte van 66.7 nm op een gas met He^+ ionen. Hierdoor verhogen we van een aantal elektronen de totale energie. Hoeveel gaat deze energie omhoog?
- c. De potentiële energie van de aangeslagen elektronen uit 1b is omhoog gegaan met 1.308×10^{-17} J. Met hoeveel moet dan de gemiddelde snelheid van deze elektronen zijn veranderd?
- d. Als je m metingen zou doen aan de snelheid van de elektronen in het gas, zou je dan 1 of meer verschillende waarden meten? Leg uit.

Vraag 2

- Hoe zijn de eigenfuncties van een Hamiltoniaan aan elkaar gerelateerd?
- Een elektron wordt beschreven door de golffunctie in Vgl. (2).

$$\psi_a(x) = \begin{cases} 0 & \text{als } x \notin [1, 2] \\ 1 & \text{als } 1 < x < 2 \\ 0 & \text{als } x > 2 \end{cases} \quad (2)$$

Maak een schematische tekening van de functie.

- Bereken de verwachtingswaarde voor de observabele positie bij deze golffunctie (de daarbij behorende operator is vermenigvuldiging met x).
- In Vgl. (3) is een Hamiltoniaan gegeven.

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{d^2}{dx^2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \sqrt{(x-3)^2}} \quad (3)$$

Wat stellen de verschillende termen van deze Hamiltoniaan voor? Welk deeltje wordt beschreven, en in wat voor situatie bevindt het zich?

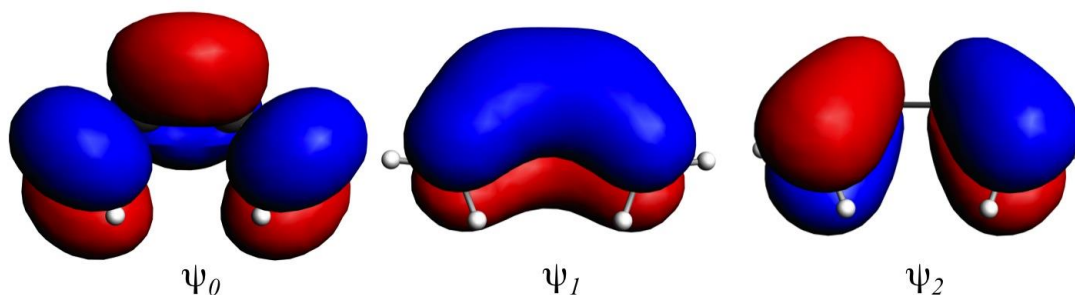
- Vgl. (4) introduceert nog een mogelijke golffunctie.

$$\psi_a(x) = \begin{cases} 0 & \text{als } x \notin [2, 3] \\ 1 & \text{als } 2 < x < 3 \\ 0 & \text{als } x > 3 \end{cases} \quad (4)$$

De situatie van een kwantum mechanisch deeltje wordt beschreven door de Hamiltoniaan uit vraag 2d. Welke van de twee golffuncties (Vgl. (2) of Vgl. (4)) zal de laagste energie verwachtingswaarde hebben? Leg uit.

Vraag 3

- Wat is het variatie principe?
- In Figuur 1 zijn drie MOs weergegeven voor butadieen.



Figuur 1. Drie MOs voor butadieen.

Er zijn vier elektronen te verdelen over deze MOs. Welke van de drie is de hoogst energetische bezette MO (de HOMO)?

- Butadieen heeft een totaal van 30 elektronen en 10 kernen. Schrijf 1 kinetische energie term en 1 potentiële energie term uit van de veel-elektron Hamiltoniaan.
- Zullen de orbitalen uit Figuur 1 eigenfuncties zijn van de veel-elektron Hamiltoniaan uit vraag 3c? Leg uit.