

TENTAMEN

Van Quantum tot Materie

Prof. Dr. C. Gooijer en Prof. Dr. R. Griessen

Januari 13, 2005

18.30-21.30

KC 137

Dit schriftelijk tentamen bestaat uit 6 **opdrachten**. Na de titel van elk opdracht is het aantal punten aangegeven dat je maximaal kunt halen. Dit is de som van de punten bijbehorend bij de deelvragen van een opdracht. In totaal, voor het hele tentamen, kunnen **70** punten worden gehaald.

De docenten en werkcollegebegeleiders wensen jullie een succesvol tentamen.

1 H								2 He
3 Li	4 Be		5 B	6 C	7 N	8 O	9 F	10 Ne
11 Na	12 Mg		13 Al	14 Si	15 P	16 S	17 Cl	18 Ar

Natuurconstanten

$e = 1.60 \cdot 10^{-19} \text{ C}$
 $h = 6.63 \cdot 10^{-34} \text{ Js}$
 $\hbar = 1.05 \cdot 10^{-34} \text{ Js}$
 $m_e = 9.11 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$
 $c = 3 \cdot 10^8 \text{ m/s}$
 $\mu_0 = 4\pi \cdot 10^{-7} \text{ N/A}^2$
 $\epsilon_0 = 8.85 \cdot 10^{-12} \text{ C}^2/\text{Nm}^2$
 $1 \text{ eV} = 1.60 \cdot 10^{-19} \text{ J}$

1. Nota Bene
2. Beantwoord elke van de 6 vragen op een apart vel papier; gebruik zo mogelijk het opgave-blad
3. Schrijf op elke bladzijde je naam
4. Schrijf duidelijk (onleesbare antwoorden leveren 0 punten op)

1. **Waar bestaat de zon uit? (10)**

Stel je werkt als beginnend astronoom bij *The Isaac Newton Group of Telescopes (ING)* in La Palma, Spanje. Het hoofd van de afdeling geeft jou de opdracht om te gaan onderzoeken of er waterstof zit in de buitenste laag van de zon. Je gaat als volgt tewerk:

- 2 a) De energie van de grondtoestand van waterstof is -13.6 eV . Bereken de energieën van de $n=2$ tot $n=5$ niveaus en vertel welke ionisatie de niveaus hebben.

- 4 b) De *Balmer series* zijn de overgangen van een electron van de toestanden $n = 3, 4, 5, 6, 7, \text{etc}$ naar de toestand $n = 2$ (of andersom, van een $n = 2$ naar een $n = 3, 4, 5, 6, 7, \text{etc}$ toestand).

Bereken de golflengte van het licht dat nodig is om een electron van de $n = 2$ naar de $n = 3$ toestand te exciteren.

Bereken de golflengte van het licht dat nodig is om een electron van de $n = 2$ naar de $n = 4$ toestand te exciteren.

- 2 c) Stel, licht van alle golflengten gaat door een wolk van waterstof atomen heen. Wat verwacht je dat er gebeurt met het licht van de golflengtes die je in b) berekend hebt en van alle andere golflengtes die overeenkomen met electron-overgangen in het waterstof atoom? En wat gebeurt er met de golflengtes die niet overeenkomen met electronovergangen?

- 2 d) Je begint nu aan je experiment. Met een telescoop en een spectrometer bepaal je welke golflengtes aanwezig zijn in het ontvangen licht. In het zichtbare spectrum neem je de volgende lijnen waar:

$$\lambda = 656.5 \text{ nm}$$

$$\lambda = 589 \text{ nm}$$

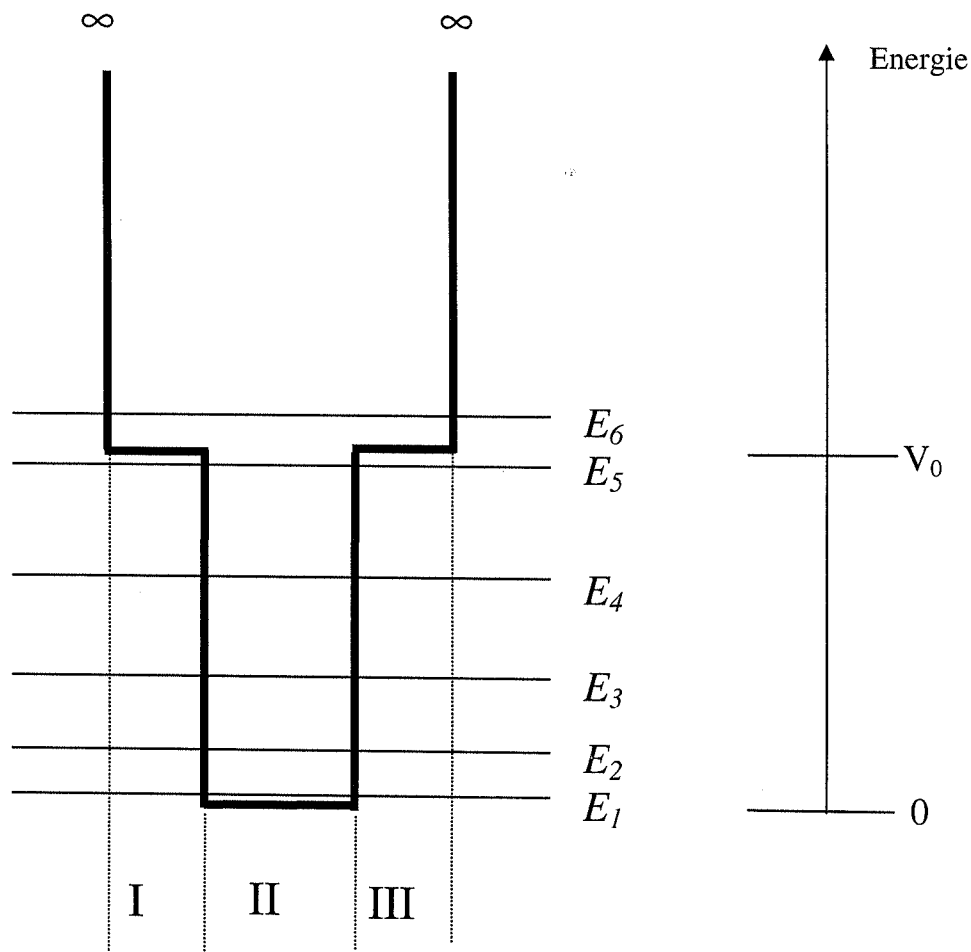
$$\lambda = 527 \text{ nm}$$

$$\lambda = 486.1 \text{ nm}$$

$$\lambda = 430.8 \text{ nm}$$

Komen één of meer van de lijnen overeen met de overgangen in waterstof (die je in b hebt berekend)? Bevat de zon dus waterstof in zijn buitenste laag? Nota bene: neem aan dat de overgangen berekend in b) uniek zijn voor waterstof en verwaarloos de effecten die bijvoorbeeld de atmosfeer eventueel zou kunnen hebben op jouw meting.

2. *Potentiaalput (10)*



Met behulp van een numerieke oplossing van de Schrödinger vergelijking voor een deeltje met massa m in het hier boven aangegeven 1-dimensionale potentiaalput zijn de energieniveaus $E_1, E_2, E_3, \dots$ gevonden.

- 2 a) Schrijf voor de gebieden I, II en III de Schrödinger vergelijking voor het deeltje op.
- 2 b) Geef de wiskundige vorm van de oplossingen van de Schrödinger vergelijkingen voor alle 3 de gebieden zonder de Schrödinger vergelijkingen helemaal op te lossen. Hierbij kun je het best $x=0$ in het midden van de potentiaalput kiezen. Wat kun je zeggen over de amplitude van de golf functie buiten de gebieden I, II en III?
- 4 c) Teken in de bovenstaande figuur de golf functie voor elk aangegeven energieniveau zodat hun belangrijke kenmerken duidelijk naar voren komen (eventueel toelichten met een paar steekwoorden)
- 2 d) Waarom zijn de energieën gequantiseerd?

3. H_2^+ molecuul (14)

- 3 a) Schrijf de Schrödinger vergelijking voor H_2^+ op. Geef voor elk term de fysische betekenis aan. De afstand tussen de twee protonen zij d .
- 2 b) Wij hebben een oplossing van deze Schrödinger vergelijking in de vorm $\Psi(x) = \alpha\psi_L(x) + \beta\psi_R(x)$ gezocht. Wat zijn $\psi_L(x)$ en $\psi_R(x)$?
- 2 c) Geef de uitdrukking van het tunnel matrix element t .
- 2 d) Teken de golffunctie Ψ bijbehorend bij de bonding state (bindend) en de antibonding state (antibindend). Neem hierbij de x-as langs de verbindingsas tussen de twee protonen. Hoe groot zijn α en β voor de bonding state (bindend) en de antibonding state (antibindend)?
- 2 e) Teken de bijbehorende kansverdeling (probability density) van het electron voor deze twee toestanden.
- 3 f) Maak een tekening van de variatie van $E_{bonding}$ en $E_{antibonding}$ als functie van de afstand d tussen de twee protonen. Leg uit waarom $E_{bonding}$ een minimum vertoont terwijl $E_{antibonding}$ dat niet doet.

4. Homo- en hetero-nucleaire moleculen (11)

Homonucleair molecuul: O₂

In de fotodynamische therapie wordt gebruik gemaakt van 'actieve' zuurstof. Geef de elektronenstructuur van het zuurstofmolecuul

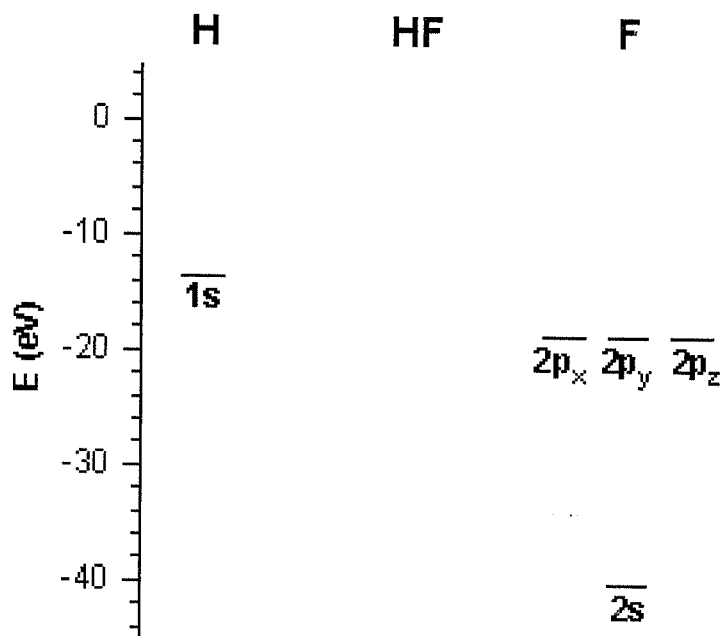
- 2 a) in de grondtoestand
- 2 b) in de eerste aangeslagen toestand.

Geef voor beide gevallen de bijbehorende bondorder en geef aan of het molecuul para-magnetisch dan wel diamagnetisch is.

Heteronucleair molecuul: HF

Waterstoffluoride (HF) is een kleurloze, zeer giftige vloeistof. In het onderstaande schema staan de atomaire energie niveaus van waterstof en fluor. De z-as ligt over de as van het molecuul.

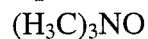
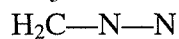
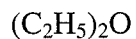
- 4 c) Maak in een tekening duidelijk welke orbitalen elkaar zullen gaan overlappen bij de vorming van het molecuul HF?



- 3 d) Teken in het bovenstaande schema de moleculaire orbitalen van het molecuul HF en vul de moleculaire orbitalen op met de valentie-electronen. Geef duidelijk aan of het orbitaal bindend, antibindend of niet-bindend is.

5. VSEPR / Lewisstructuren (14)

Bekijk de volgende verbindingen:

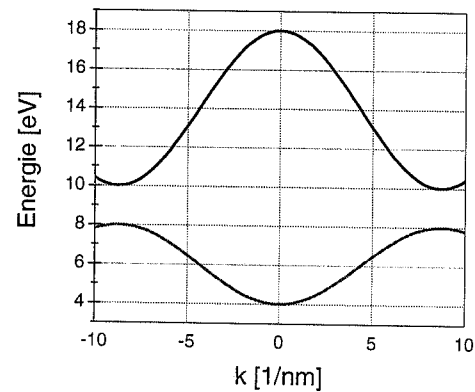


- 8 a) Teken van bovenstaande moleculen de Lewis-structuren en eventuele resonantie-structuren; geef daarbij aan welke de stabielste zal zijn. Geef in je tekening bij alle resonantie-structuren aan wat de formele lading op ieder atoom is. Geef aan of de moleculen een dipoolmoment hebben.
- 3 b) Welke hybridisatie heeft in de bovenstaande moleculen het centrale atoom? Wat is dus de ruimtelijke structuur?
- 3 c) $(\text{C}_2\text{H}_5)_2\text{O}$ en BF_3 reageren met elkaar onder vorming van $(\text{C}_2\text{H}_5)_2\text{O}-\text{BF}_3$. Leg aan de hand van de Lewisstructuren uit waarom.

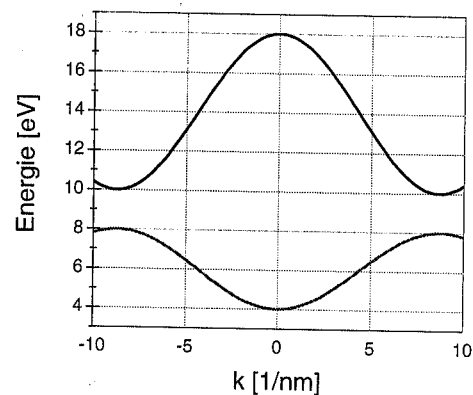
6. Elektrische geleiding in metalen en halfgeleiders (11)

Een vaste stof heeft een banden structuur zoals in de figuur aangegeven. Toestanden met een energie lager dan de Fermi energie E_F zijn bij 0 Kelvin allemaal bezet; die met een energie groter dan E_F allemaal onbezet. Dit definieert de Fermi energie eenduidig.

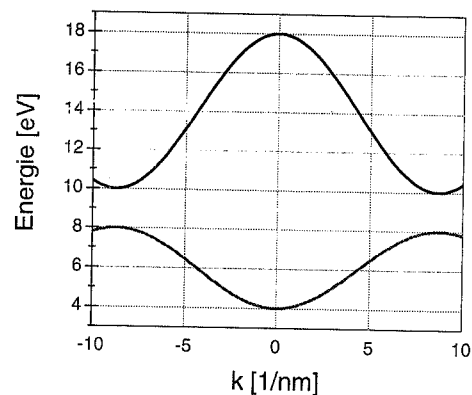
- 1 a) Geef in de tekening aan waar de Fermi energie E_F ligt voor een materiaal dat uit atomen bestaat met 1 electron per atoom ? Leg uit.



- 1 b) Geef in de tekening aan waar de Fermi energie E_F ligt voor een materiaal dat uit atomen bestaat met 2 electronen per atoom ? Leg uit.



- 1 c) Geef in de tekening aan waar de Fermi energie E_F ligt voor een materiaal dat uit atomen bestaat met 3 electronen per atoom ? Leg uit.



Naam

- 1 d) Welk(e) materia(l)(en) [in a), b) en c)] is/zijn meta(l)(en) ? Leg uit.
- 1 e) Welk(e) materia(l)(en) [in a), b) en c)] is/zijn halfgeleidend ? Leg uit.
- 3 f) Bereken de snelheid van een electron dat een energie heeft gelijk aan de Fermi energie in a) en c)
- 3 g) Volle banden kunnen geen elektrische stroom dragen bij 0 Kelvin. Hoe komt het dat halfgeleiders toch stroom kunnen dragen bij kamertemperatuur ? Hoe varieert dan hun soortelijke weerstand met toenemender temperatuur?