

Tussentoets 6A7X0 deel Voortgezette Chemische Binding
Woensdag 4 maart 2015, 18.30-20.30 uur

Opgave 1

De Schrödinger-vergelijking voor een deeltje in een doos met oneindig harde wanden wordt gegeven door:

$$-\frac{\hbar^2}{8\pi^2 m} \frac{d^2}{dx^2} \Psi(x) = E\Psi(x)$$

Als we de wanden op de posities $x = -L$ en $x = L$ zetten, dan zijn er oplossingen van de vorm:

$$\Psi(x) = \sqrt{\frac{1}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right),$$

met n een positief geheel getal. (Let op: De breedte van de doos is hier $2L$, en we kijken niet naar alle oplossingen.)

We veranderen nu de doos. Het linkerdeel met $-L \leq x \leq 0$ laten we hetzelfde, maar in het rechterdeel veranderen we de potentiaal en we veranderen de lengte van dat deel. Dit betekent dat de Schrödinger-vergelijking als volgt wordt:

$$-\frac{\hbar^2}{8\pi^2 m} \frac{d^2}{dx^2} \Psi(x) + V\Psi(x) = E\Psi(x), \text{ voor } 0 \leq x \leq M.$$

In het linkerdeel blijft de Schrödinger-vergelijking hetzelfde. We zoeken een oplossing die zoveel mogelijk op de oplossing van het oorspronkelijke systeem lijkt. We proberen een oplossing van de vorm:

$$\Psi(x) = \begin{cases} A \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) & -L \leq x \leq 0 \\ B \sin\left(\frac{n\pi x}{M}\right) & 0 \leq x \leq M \end{cases},$$

met n weer een positief geheel getal.

- a. (5 ptn) Laat zien dat $\Psi(x)$ een acceptabele golf functie is, mits $A/L = B/M$: d.w.z. de functie is continu en continu differentieerbaar voor $-L \leq x \leq M$, en de functie wordt 0 bij de wanden.
- b. (15 ptn) Laat zien de gegeven functie een oplossing is voor de Schrödinger-vergelijking als:

$$V = \frac{n^2 \hbar^2}{8m} \left[\frac{1}{L^2} - \frac{1}{M^2} \right]$$

geldt. Geef een uitdrukking voor de energie E .

c. (5 ptn) Bepaal A zodat de gegeven functie genormeerd is. Gebruik de standaardintegraal

$$\int_{x_1}^{x_2} \sin^2 ax \, dx = \left[\frac{1}{2}x - \frac{1}{4a} \sin 2ax \right]_{x_1}^{x_2}$$

Opgave 2

Cyclobutadien (C_4H_4) is een vlak ringvormig molecuul. De koolstofatomen vormen een vierkant. De π -moleculaire orbitalen (MO's) zijn te berekenen met de Hückel methode. De $2p$ -orbitaal van het koolstofatoom n dat loodrecht op het vlak van het molecuul staat noemen we $2p_n$. Je mag aannemen dat alle atomaire orbitalen (AO's) $2p_n$ genormeerd zijn. Overlap tussen atomaire orbitalen op verschillende atomen mag verwaarloosd worden. Voor de elementen van de Fock-matrix geldt:

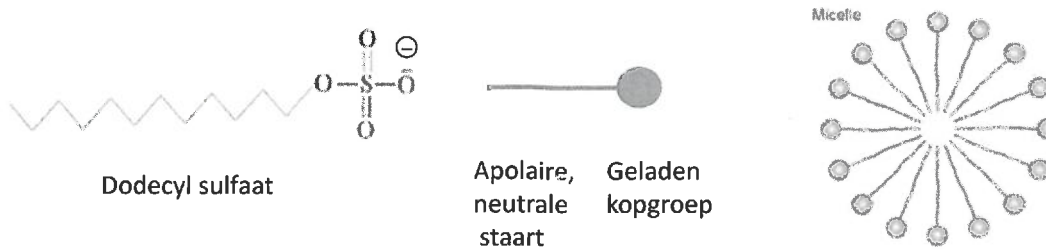
$$\int 2p_n f 2p_n \, d\tau = \alpha, \text{ en}$$
$$\int 2p_n f 2p_m \, d\tau = \beta, \text{ als } n \text{ en } m \text{ buren zijn.}$$

In alle andere gevallen is de laatste integraal 0.

a. (5 ptn) Bepaal de overlapmatrix S en de Fock matrix F voor de $2p_n$ basisfuncties van cyclobutadien.

b. (5 ptn) Stel de Roothaan vergelijking op en bepaal uit de vergelijking de MO-energieën. Welke orbitalen zijn bezet?

Vraag 2. Anionische micellen



Anionische micellen zijn aggregaten van zeepmoleculen met een negatief geladen polaire kopgroep en een neutrale apolaire staart. In de bolvormige micel zitten de apolaire staarten van de zeepmoleculen bij elkaar in het binnenste van de micel en de geladen groepen aan het oppervlak van de bolvormige structuur. Het zeepmolecuul dodecylsulfaat vormt micellen in water met gemiddeld 62 dodecylsulfaat moleculen per micel. De micel heeft een straal r_m van ongeveer 2.5 nm. Binnenin de micel, in het hydrofobe deel, is de relatieve diëlektrische constante laag, ongeveer $\epsilon_r = 3$. Buiten de micel is water en is dus de relatieve diëlektrische constante veel hoger, $\epsilon_r = 80$. We nemen aan dat we de micel als een perfecte bol mogen beschrijven met de lading van de 62 sulfaatgroepen gelijkmatig verdeeld over het oppervlak van de bol. We verwaarlozen de invloed van kationen (Na^+) in de oplossing.

- (5 pt) Gebruik de wet van Gauß 1a en bereken de sterkte en richting van het elektrische veld of een afstand van 10 nm van het midden van de micel.
- (5 pt) Bereken ook de grootte en richting van het elektrische veld binnenin de micel op een afstand van 0.5 nm van het midden van de micel.
- (5 pt) Bereken de sterkte van de elektrische potentiaal op een afstand van 10 nm van het midden van de micel. Leg ook uit welke ijking je daarbij gebruikt.
- (5 pt) Bereken de sterkte van de elektrische potentiaal op een afstand van 0.5 nm van het midden van de micel. Leg ook hier uit welke ijking je gebruikt.
- (5 pt) Bereken de totale elektrostatische potentiële energie van de micel. Ga hierbij uit van de potentiaal op de rand van de micel en bedenk hoeveel arbeid er verricht moet worden om de lading van de micel op te hogen van nul tot 62 q_e .
- (5 pt) Vergelijk de totale elektrostatische potentiële energie van de micel met die van 62 losse sulfaatgroepen in water. Neem hierbij aan dat de sulfaatgroep opgevat mag worden als een holle metalen bol met straal 0.15 nm en lading $-q_e$. Maak een schatting van het aantal Na^+ kationen dat aan de micel moet binden om deze elektrostatisch te stabiliseren.

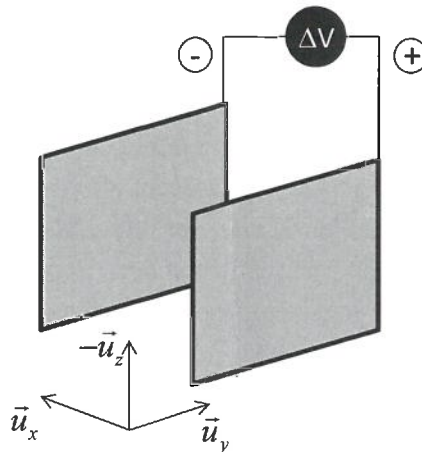
Einde

Tussentoets 6A7X0 deel Elektriciteit en Magnetisme
Woensdag 4 maart 2015 18.30-20.30 uur

Gebruik van een eenvoudige rekenmachine is toegestaan

Vraag 1. Elektroforese

Elektroforese is een scheidingstechniek die veel toegepast wordt in (bio-)chemisch onderzoek en die het mogelijk maakt om elektrisch geladen moleculen van elkaar te scheiden.



Het monster wordt ingebracht precies midden tussen twee parallelle vlakke elektrodes op onderlinge afstand d , waartussen met behulp van een spanningsbron een constant potentiaalverschil ΔV wordt aangelegd. De platen hebben een oppervlak A en zijn ondergedompeld in water. Stel dat het monster kleine hoeveelheden kationen bevat met lading $+2q_e$ en anionen met lading $-q_e$. Hierbij duidt q_e de absolute grootte van de elektronlading aan.

- a) (8 pt) Geef een uitdrukking voor de elektrische kracht inclusief richting en grootte, die de kationen en anionen ondervinden in termen van q_e , ΔV en d . Geef een aparte uitdrukking voor kationen en anionen.

Neem aan dat de ionen zich gaan verplaatsen met een snelheid en richting evenredig met het elektrische veld. Beargumenteer hoe de snelheid van de anionen verandert als we:

- b) (3 pt) het aangelegde potentiaalverschil ΔV verdubbelen in grootte tot $2 \Delta V$.
- c) (3 pt) het oppervlak van de platen verdubbelen van A naar $2A$.
- d) (3 pt) de afstand tussen de platen verdubbelen van d naar $2d$ bij constant potentiaalverschil ΔV .
- e) (3 pt) het monster inbrengen niet precies midden tussen de platen maar dichterbij de negatief geladen elektrode op een afstand $d/4$.