

Trillingen binnen een molecuul

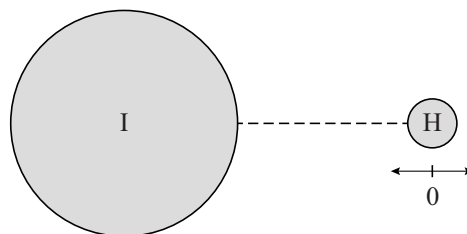
Lees onderstaand artikel.

In het molecuul waterstofjodide (HI) is het kleine waterstofatoom gebonden aan het grote jodiumatoom. De evenwichtsafstand tussen de twee atomen is $1,609 \cdot 10^{-10}$ m.

Als deze afstand groter of kleiner wordt, zorgt de binding voor een terugdrijvende kracht die in eerste benadering recht evenredig is met de uitwijking van de evenwichtsstand.

Een model om het molecuul te beschrijven is een massa-veersysteem, waarbij het waterstofatoom trilt, het jodiumatoom stilstaat en de binding beschouwd wordt als een veer.

In het klassieke model van een harmonisch trillend systeem zijn alle energietoestanden mogelijk. Kijkt men echter naar het spectrum van waterstofjodide, dan blijkt dat geen continu spectrum maar een lijnspectrum te zijn: om dat te begrijpen is een quantumfysisch model nodig!

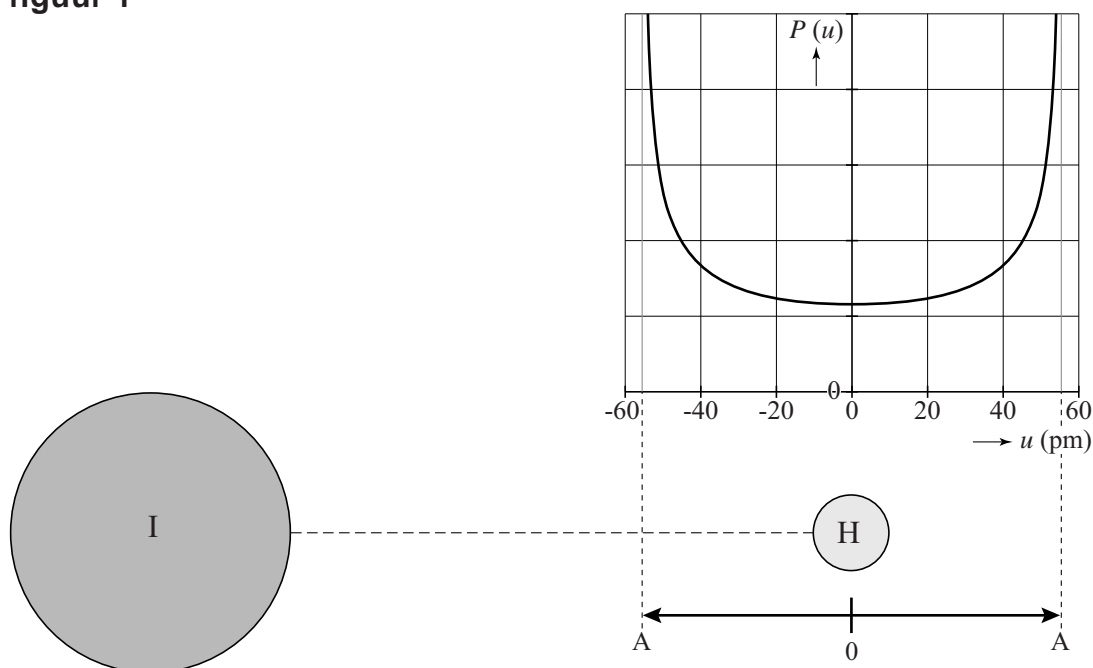


- De trillingsfrequentie f van dit massa-veersysteem is $6,92 \cdot 10^{13}$ Hz. Hiermee kan met het klassieke model de veerconstante berekend worden.
- 3p **16** Voer die berekening uit.

In figuur 1 is de klassieke waarschijnlijkheidsverdeling $P(u)$ van het trillende H-atoom in het massa-veersysteem gegeven met amplitude $A = 5,54 \cdot 10^{-11}$ m.

figuur 1

Klassieke waarschijnlijkheidsverdeling

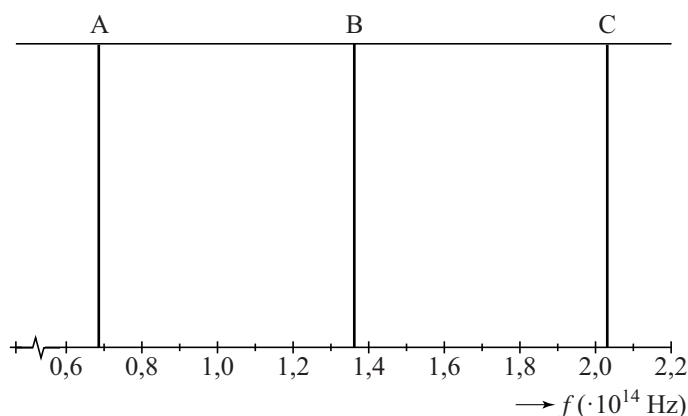


Uit de oppervlakte tussen twee posities onder de waarschijnlijkheidsverdeling is het percentage van de tijd te berekenen dat een trillende massa zich tussen die twee posities bevindt.

- 3p 17 Voer de volgende opdrachten uit:
- Geef aan waarom $P(u)$ een minimum heeft voor $u = 0$ en maximaal is voor $u \rightarrow \pm A$.
 - Leg uit hoe de waarschijnlijkheidsverdeling $P(u)$ in breedte en hoogte verandert als de totale energie van het systeem groter wordt.

Het spectrum van waterstofjodidegas is een lijnenspectrum. In dit spectrum zijn onder andere drie lijnen te zien. Zie figuur 2.

figuur 2

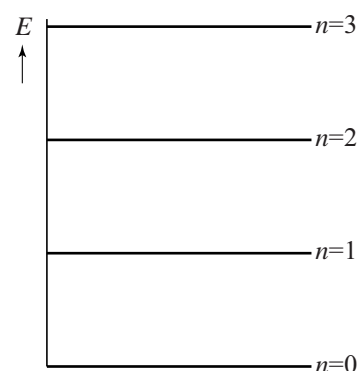


Dit lijnenspectrum is niet te verklaren met het klassieke model van het massa-veersysteem.

Blijkbaar heeft het HI-molecuul discrete energieniveaus.

Uit het spectrum van figuur 2 kan men het energie-niveau-schema van HI afleiden. Dit is in figuur 3 weergegeven. De energieniveaus worden aangegeven met de quantumgetallen $n = 0, 1, 2, \dots$. Figuur 3 staat ook op de uitwerkbijlage.

figuur 3



- 4p 18 Voer de volgende opdrachten uit:
- Leg uit hoe uit figuur 2 volgt dat de afstand tussen de energieniveaus in figuur 3 constant is.
 - Bepaal de waarde $\Delta E = E_1 - E_0$ in eV.
 - Teken in de figuur op de uitwerkbijlage een overgang die hoort bij lijn B van figuur 2.

Het is mogelijk om een quantumfysisch model van HI op te stellen, waarbij het trillende H-atoom beschreven wordt als een deeltje in een één-dimensionale energieput. De afstanden tussen de energieniveaus hangen af van de eigenschappen van de energieput.

We vergelijken de afstanden van de energieniveaus bij HI met de afstanden in twee andere quantumfysische modellen.

- 3p **19** Voer de volgende opdrachten uit:
- Geef aan hoe in het quantummodel van een energieput met oneindig hoge wanden de energieniveaus ten opzichte van elkaar liggen.
 - Geef aan hoe in het quantummodel van een (elektron in een) vrij waterstofatoom de energieniveaus ten opzichte van elkaar liggen.
 - Geef aan waarom beide modellen niet kunnen gelden voor HI.

In de quantumfysica is het uitgesloten dat het waterstofatoom in het molecuul HI helemaal stilstaat.

- 2p **20** Leg dit uit met behulp van de onbepaaldheidsrelatie van Heisenberg.

uitwerkbijlage

18

