

Chemical Bonding

Hertentamen 2-12-2019

Science Park

18.00 – 21.00

D1.113

Schrijf duidelijk en vermeld je naam en collegekaartnummer boven aan elk vel papier.

De volgende 6 opgaven dienen gemaakt te worden.

Toegestane hulpmiddelen: het periodiek systeem (uitgereikt), (grafische) rekenmachine en lijst met fysische constanten (uitgereikt).

$$1 \text{ J} = 1 \text{ kg m}^2 \text{ s}^{-2}$$

$$1 \text{ eV} = 1.60217662 \times 10^{-19} \text{ J}$$

Docent en coördinator: dr S. Ingemann Jørgensen

Opgave 1 (Het onzekerheidsprincipe van Heisenberg) (14 pt)

a) (5 pt) Volgens het atoommodel van Bohr is de snelheid van het elektron in het waterstofatoom gegeven door:

$$v = \frac{e^2}{2\epsilon_0 h n} \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

v : snelheid e : elementaire lading ϵ_0 : vacuüm permittiviteit h : Planck's constant

Bereken de snelheid van het elektron voor $n = 1, 2$ en 3 .

b) (5 pt) Het onzekerheidsprincipe van Heisenberg is gegeven door:

$$\Delta p \Delta x \geq (h/4\pi)$$

Δx : onzekerheid in plaats

Δp : onzekerheid in impuls $p = mv$ (m : massa)

Neem aan dat de snelheid van het elektron is bekend met een onzekerheid van $\pm 10\%$ van de berekende waarde d.w.z. $\Delta v = 20\%$ van v .

Bereken nu de onzekerheid in plaats, Δx , voor $n = 1, 2$ en 3 .

c) (4 pt) Vergelijk de verkregen waarden van Δx met de van der Waals straal van het waterstofatoom, $r = 74.5$ pm.

Opgave 2 (Deeltje in een doos) (18 pt)

De energie, E_n , van een elektron in een één-dimensionale doos met lengte $L = 100$ pm is gegeven door onderstaande vergelijking:

$$E_n = \frac{n^2 h^2}{8m_e L^2}$$

$n = 1, 2, 3, \dots$ h : Planck's constant m_e : massa van het elektron L : lengte van de doos

a) (5 pt) Bereken het verschil in energie, ΔE , tussen de energieniveaus: **i)** $n_2 = 2$ en $n_1 = 1$ en **ii)** $n_3 = 3$ en $n_2 = 2$. Licht de resultaten toe met behulp van een tekening.

b) (4 pt) De 'probability density', ψ^2 , van een elektron in één-dimensionale doos is gegeven door onderstaande vergelijking (x = positie):

$$\psi^2(x) = \left(\frac{2}{L}\right) \sin^2\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$$

Geef voor de twee energieniveaus **i)** $n_1 = 1$ en **ii)** $n_2 = 2$ de positie(s) aan voor welke de waarde van ψ^2 maximaal is.

De energie, E_n , van een elektron in een twee-dimensionale doos met de lengten L_1 en L_2 is gegeven door onderstaande vergelijking:

$$E_{n_1, n_2} = \left(\frac{n_1^2}{L_1^2} + \frac{n_2^2}{L_2^2}\right) \frac{h^2}{8m_e}$$

c) (5 pt) Beschouw een twee-dimensionale doos met $L_1 = L_2 = L = 100$ pm. Bereken het verschil in energie, ΔE tussen, de energieniveaus:

i) $n_1 = 1, n_2 = 2$ en $n_1 = 1, n_2 = 1$

ii) $n_1 = 1, n_2 = 3$ en $n_1 = 1, n_2 = 2$ of $n_1 = 2, n_2 = 1$

Vergelijk de resultaten met de antwoorden van vraag a).

d) (4 pt) De 'probability density', ψ^2 , van een elektron in twee-dimensionale doos met $L_1 = L_2 = L$ is gegeven door onderstaande vergelijking ($x =$ positie in de x richting, $y =$ positie in de y richting):

$$\psi^2(x, y) = \left(\frac{2}{L}\right) \sin^2\left(\frac{n_1 \pi x}{L}\right) \sin^2\left(\frac{n_2 \pi y}{L}\right)$$

Geef voor de twee laagste energieniveaus (zie hieronder) de positie(s) aan voor welke de waarde van ψ^2 maximaal is:

i) 1^e niveau: $n_1 = 1, n_2 = 1$

ii) 2^e niveau: $n_1 = 1, n_2 = 2$ of $n_1 = 2, n_2 = 1$

Opgave 3 (Golffunctie en elektronconfiguratie) (18 pt)

a) (2 pt) Omschrijf met eigen woorden het begrip atoomorbitaal

b) (3 pt) De golffunctie van het $2p_z$ orbitaal van het waterstofatoom is hieronder gegeven.

$$\psi(r, \theta, \varphi) = \frac{1}{24^{1/2}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \left(\frac{Zr}{a_0}\right) e^{-Zr/2a_0} \frac{1}{2} \left(\frac{3}{\pi}\right)^{1/2} \cos(\theta)$$

Geef aan wanneer de waarde van de golffunctie van het $2p_z$ orbitaal nul is. Licht het antwoord toe met behulp van een tekening van het $2p_z$ orbitaal.

c) (2 pt) De golffunctie van het $2p_z$ orbitaal is samengesteld uit een radiële functie, $R(r)$, en een hoekafhankelijke functie, $Y(\theta, \phi)$:

$$\psi(r, \theta, \phi) = R(r)Y(\theta, \phi)$$

Geef nu de uitdrukking voor $R(r)$ van het $2p_z$ orbitaal.

d) (3 pt) De radiale distributiefunctie, $P(r)$, is als volgt gedefinieerd:

$$P(r) = r^2 R^2(r)$$

Geef nu de uitdrukking van $P(r)$ voor het $2p_z$ orbitaal.

e) (3 pt) Geef aan voor welke waarden van r de $P(r)$ functie gelijk aan nul is.

f) (3 pt) Schets nu in een figuur de radiale distributiefunctie, $P(r)$, voor het $2p_z$ orbitaal (d.w.z. het verloop van $P(r)$ als functie van r). Licht het antwoord toe met eigen woorden.

Opgave 4 (Kwantumgetallen en elektronconfiguratie) (16 pt)

a) (5 pt) De elektronenconfiguratie van atomen wordt door de vier kwantumgetallen (n , l , m_l en m_s) aangegeven. Geef aan welke van de volgende combinaties van kwantumgetallen zijn toegestaan en welke niet. Licht de antwoorden toe.

- | | |
|--|--|
| 1. $n = 4, l = 2, m_l = 1, m_s = 1/2$ | 5. $n = 3, l = 2, m_l = 1, m_s = 1/2$ |
| 2. $n = 5, l = 1, m_l = 2, m_s = -1/2$ | 6. $n = 2, l = 0, m_l = 1, m_s = -1/2$ |
| 3. $n = 2, l = 1, m_l = 2, m_s = 1/2$ | 7. $n = 6, l = 2, m_l = -2, m_s = 1/2$ |
| 4. $n = 2, l = -1, m_l = 0, m_s = 1/2$ | 8. $n = 2, l = 2, m_l = -2, m_s = 1$ |

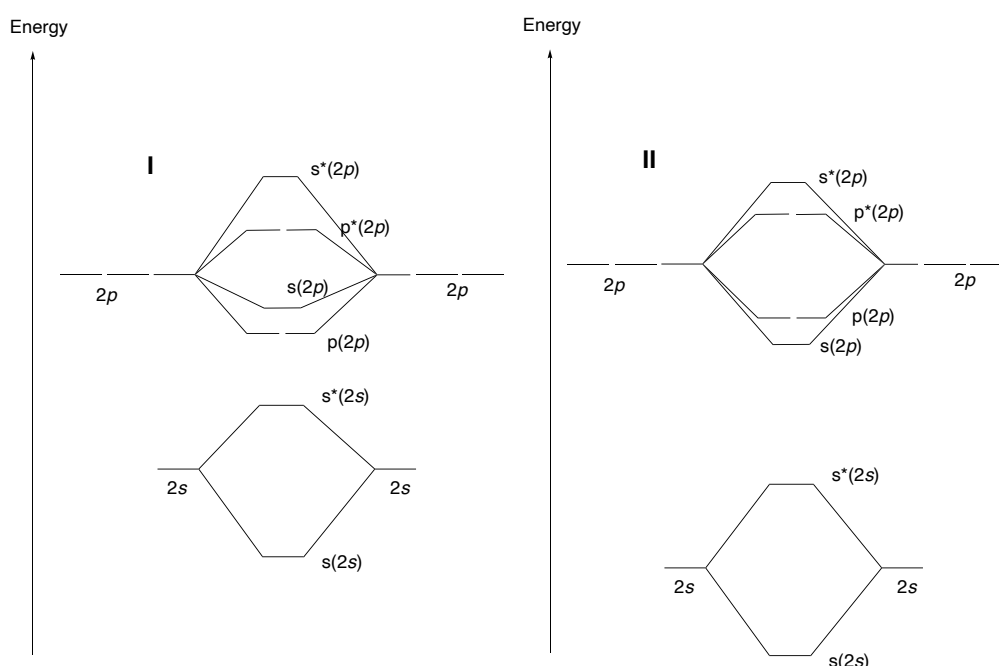
b) (5 pt) De vier kwantumgetallen liggen ten grondslag aan de opbouw van het periodiek systeem in combinatie met i) het uitsluitingsprincipe van Pauli en ii) de spinregel van Hund.

Leg in eigen woorden uit wat men verstaat onder i) het uitsluitingsprincipe van Pauli en ii) de spinregel van Hund.

c) (6 pt) Teken in een figuur de relatieve energieën van alle niveaus met $n = 1, 2$ en 3 voor de elementen: i) H, ii) P en iii) Ti. Geef een korte toelichting op de tekeningen.

Opgave 5 (MO theorie) (18 pt)

a) (8 pt) Hieronder zijn twee MO diagrammen getekend.



Geef met behulp van deze MO diagrammen een verklaring voor de volgende feiten:

- B_2 is paramagnetisch (bevat ongepaarde elektronen).
- C_2 is diamagnetisch (bevat geen ongepaarde elektronen).
- O_2 is paramagnetisch (bevat ongepaarde elektronen).

b) (3 pt) Geef de bindingsorder, B.O., voor: **i)** B₂, **ii)** C₂ en **iii)** O₂.

c) (3 pt) Geef een verklaring voor de volgende feiten:

C₂: bindingslengte: 124 pm bindingsenergie: 599 kJ mol⁻¹

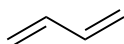
O₂: bindingslengte: 121 pm bindingsenergie: 494 kJ mol⁻¹

d) (4 pt) Teken een MO diagram van het deeltje BN en geef de B.O. van het deeltje. Is BN para- of diamagnetisch?

B.O. = $\frac{1}{2} (N - N^*)$, N = aantal elektronen in bindende MO's en N* aantal elektronen in anti-bindende MO's)

Opgave 6 (MO theorie, poly-atomaire moleculen) (16 pt)

Hieronder zijn de twee verbindingen, buta-1,3-dieen en cyclobuta-1,3-diene afgebeeld.



buta-1,3-dieen



cyclobuta-1,3-dieen

a) (6 pt)

i) Teken een MO diagram van het π systeem (d.w.z. de π bindingen) van buta-1,3-dieen.

ii) Zet de zogenaamde π -elektronen in de MO's.

iii) Geef de HOMO (Highest Occupied Molecular Orbital) en LUMO (Lowest Unoccupied Molecular Orbital) aan in het diagram.

b) (6 pt)

i) Teken een MO diagram van het π systeem (d.w.z. de π bindingen) van cyclobuta-1,3-dieen.

ii) Zet de zogenaamde π -elektronen in de MO's.

iii) Geef de HOMO (Highest Occupied Molecular Orbital) en LUMO (Lowest Unoccupied Molecular Orbital) aan in het diagram.

c) (4 pt) Geef een verklaring voor het feit dat buta-1,3-dieen stabiel is terwijl cyclo-1-butadien niet stabiel is.