

# Tentamen

## Chemical Bonding Premaster Course Pre-master Chemistry (joint degree)

Tentamen

Datum: 24 October 2019

Tijd: 9-12uur

Aantal pagina's: 7 (inclusief voorblad)

Aantal open vragen: 6

Bij iedere vraag staat het maximaal te behalen aantal punten vermeld. Totaal aantal te behalen punten: 100

### VOORDAT U BEGINT

- Controleer of uw versie van het tentamen compleet is.
- Schrijf **uw naam en studentnummer** en indien van toepassing **versienummer** op elk vel papier dat u inlevert en **nummer de pagina's**.
- Uw mobiele telefoon moet uit staan en in uw jas of tas zitten. Uw jas en tas moeten op de grond liggen.
- **Toegestane hulpmiddelen:** Kladpapier, Rekenmachine (grafisch), Rekenmachine (niet-grafisch), Het periodiek systeem en lijst met fysische constanten (beide uitgerekte). Overige hulpmiddelen zijn niet toegestaan.

### HUISHOUDELIJKE MEDEDELINGEN

- De eerste 30 minuten en de laatste 15 minuten mag u de zaal niet verlaten, ook niet voor het bezoeken van het toilet.
- 15 minuten voor het eind wordt u gewaarschuwd dat het inlevertijdstip nadert.
- Vul na afloop van het tentamen het evaluatieformulier in, indien van toepassing.
- U bent verplicht zich op verzoek van de examiner (of diens vertegenwoordiger) te kunnen legitimeren met een bewijs van inschrijving en een geldig legitimatiebewijs.
- Tijdens het tentamen is toiletbezoek niet toegestaan, tenzij de surveillant hier toestemming voor geeft.
- Na afloop mag u dit tentamen meenemen.

Succes!

### Opgave 1 (Ionisatie en Rydberg) (16 pt)

De 1<sup>e</sup> en 2<sup>e</sup> ionisatie-energieën van enkele elementen zijn als volgt:

Element	1 <sup>e</sup> IE in kJ mol <sup>-1</sup>	2 <sup>e</sup> IE in kJ mol <sup>-1</sup>
Li	520	7298
Be	899	1757
B	801	2427
C	1087	2352
N	1402	2856
O	1314	3388
F	1631	3374
Cu	746	1958
Zn	906	1733

a) (8 pt)

i) Licht in eigen woorden de trend in de waarden van de 1<sup>e</sup> ionisatie-energieën van Li, Be, B, C, N, O en F toe.

ii) Geef een verklaring waarom het verschil tussen de 1<sup>e</sup> en 2<sup>e</sup> ionisatie-energie voor Li veel groter is dan voor Be.

iii) Geef een verklaring voor het feit dat het verschil tussen de 1<sup>e</sup> en 2<sup>e</sup> ionisatie-energie groter is voor B dan voor C.

iv) Geef een verklaring voor het feit dat de 2<sup>e</sup> ionisatie-energie voor Cu groter is dan voor Zn.

b) (4 pt) De 1<sup>e</sup> ionisatie-energieën van de halogenen zijn als volgt:

F:	1680 kJ mol <sup>-1</sup>
Cl:	1255 kJ mol <sup>-1</sup>
Br:	1140 kJ mol <sup>-1</sup>
I:	1008 kJ mol <sup>-1</sup>

Bereken de golflengte van de fotonen die nodig zijn om de elementen, F, Cl, Br en I te ioniseren vanuit hun grondtoestand. Licht de trend in de verkregen antwoorden toe.

c) (4 pt) De ionisatie-energie van een H atoom in een geëxciteerde toestand is:  $(1/16) h R$ . Geef de waarde van het hoofdkwantumgetal,  $n$ , van de toestand van de geëxciteerde H atomen.

Aanwijzing bij vraag c): 
$$\nu = RZ^2 \left( \frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right)$$

$h$ : Planck's constante     $R$ : Rydberg constante =  $3.28994 \times 10^{15} \text{ s}^{-1}$      $Z$ : atoomnummer

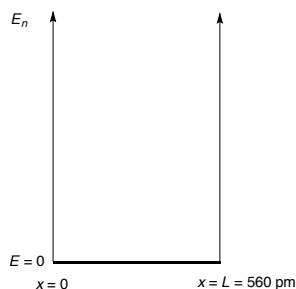
## Opgave 2 (Deeltje in een doos) (18 pt)

De energie van een elektron in een eendimensionale doos is gegeven door onderstaande vergelijking:

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

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

a) (6 pt) Wij beschouwen nu een eendimensionale doos met de lengte,  $L$ , van 560 pm.



Bereken de energie die nodig is om een elektron te brengen:

- i) van  $n_1 = 1$  naar  $n_2 = 2$
- ii) van  $n_1 = 2$  naar  $n_2 = 3$
- iii) van  $n_1 = 3$  naar  $n_2 = 4$ .

Licht de resultaten toe met behulp van een tekening.

b) (5 pt) Wij beschouwen nu een tweedimensionale doos met de met dimensie van  $L_x = 560$  pm,  $L_y = 560$  pm. Voor een tweedimensionale doos geldt het volgende:

$$E_{n_x, n_y} = \frac{h^2}{8m_e} \left[ \frac{n_x^2}{L_x^2} + \frac{n_y^2}{L_y^2} \right] \quad n_x = 1, 2, \dots \quad n_y = 1, 2, \dots$$

Bereken de energie die nodig is om een elektron te brengen:

- i) van de toestand met  $n_x = n_y = 1$  naar de toestand met  $n_x = 1$  en  $n_y = 2$ .
- ii) van de toestand met  $n_x = 1$  en  $n_y = 2$  naar de toestand met  $n_x = 2$  en  $n_y = 2$ .

c) (5 pt) Wij beschouwen nu een driedimensionale doos met de dimensie van  $L_x = 560$  pm,  $L_y = 560$  pm en  $L_z = 560$  pm. Voor een driedimensionale doos geldt het volgende:

$$E_{n_x, n_y, n_z} = \frac{h^2}{8m} \left[ \frac{n_x^2}{L_x^2} + \frac{n_y^2}{L_y^2} + \frac{n_z^2}{L_z^2} \right] \quad n_x = 1, 2, \dots \quad n_y = 1, 2, \dots \quad n_z = 1, 2, \dots$$

Bereken de energie die nodig is om een elektron te brengen:

- i) van de toestand met  $n_x = n_y = n_z = 1$  naar de toestand met  $n_x = 1$ ,  $n_y = 1$  en  $n_z = 2$
- ii) van de toestand met  $n_x = 1$ ,  $n_y = 1$  en  $n_z = 2$  naar de toestand met  $n_x = 1$ ,  $n_y = 2$  en  $n_z = 2$

d) (2 pt) Vergelijk de antwoorden van de vragen a), b) en c).

### Opgave 3 (Golffunctie en elektronconfiguratie) (14 pt)

a) (7 pt) De uitdrukkingen van de golffuncties van de  $2p_x$ ,  $2p_y$  en  $2p_z$  niveaus zijn hieronder gegeven:

**$2p_x$ :**

$$\psi(r, \theta, \phi) = \frac{1}{2\sqrt{6}} \left( \frac{1}{a_0} \right)^{5/2} r e^{-r/2a_0} \left( \frac{3}{4\pi} \right)^{1/2} \sin \theta \cos \phi$$

**$2p_y$ :**

$$\psi(r, \theta, \phi) = \frac{1}{2\sqrt{6}} \left( \frac{1}{a_0} \right)^{5/2} r e^{-r/2a_0} \left( \frac{3}{4\pi} \right)^{1/2} \sin \theta \sin \phi$$

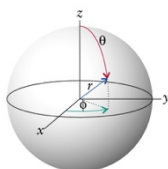
**$2p_z$ :**

$$\psi(r, \theta, \phi) = \frac{1}{2\sqrt{6}} \left( \frac{1}{a_0} \right)^{5/2} r e^{-r/2a_0} \left( \frac{3}{4\pi} \right)^{1/2} \cos \theta$$

De elektronverdeling in het  $2p$  niveau is gegeven door de som van de kwadraten van de golffuncties:

$$\Psi^2(2p_x) + \Psi^2(2p_y) + \Psi^2(2p_z).$$

Laat zien dat de elektronenverdeling in het  $2p$  niveau van de grondtoestand van het stikstofatoom sferisch symmetrisch is d.w.z. onafhankelijk van de hoeken  $\theta$  en  $\phi$  (zie tekening met de bolcoördinaten); hint:  $\sin^2(x) + \cos^2(x) = 1$ .



b) (7 pt) Welk van de volgende elementen zijn gekenmerkt door een sferisch symmetrisch elektronenverdeling in het buitenste elektronische niveau: O, Cl, Mn, Ca, Ni, Pd.

**Opgave 4 (Kwantumgetallen en elektronconfiguratie) (16 pt)**

**a)** (3 pt) **i)** Atoom orbitalen worden geclassificeerd door de drie kwantumgetallen  $n$ ,  $l$ ,  $m_l$ . Licht de betekenis toe van deze drie kwantumgetallen; **ii)** Het vierde kwantumgetal is  $m_s$ , licht de betekenis toe van  $m_s$ .

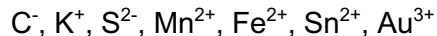
**b)** (2 pt) Geef de mogelijke waarden van de verschillende kwantumgetallen.

**c)** (3 pt) **i)** Geef de mogelijke waarden van de verschillende kwantumgetallen voor  $n = 4$ , **ii)** geef het aantal orbitalen voor  $n = 4$  en het maximale aantal elektronen die zich kunnen bevinden in de orbitalen met  $n = 4$ .

**d)** (3 pt) Teken in één figuur de relatieve energieniveaus van de  $1s$ ,  $2s$ ,  $2p$ ,  $3s$ ,  $3p$  en  $3d$  orbitalen van het H atoom. Geef in de figuur aan in welk orbitaal het elektron zich bevindt in de grondtoestand van het waterstofatoom.

**e)** (3 pt) Teken in één figuur de relatieve energieniveaus van de  $1s$ ,  $2s$ ,  $2p$ ,  $3s$ ,  $3p$ ,  $3d$  en  $4s$  orbitalen van het Mn atoom. Geef in de figuur aan in welke orbitalen de elektronen zich bevinden van het Mn atoom in de grondtoestand.

**f)** (2 pt) **i)** Geef de volledige elektronenconfiguratie van de onderstaande ionen; **ii)** het aantal ongepaarde elektronen in de ionen:



### Opgave 5 (MO theorie) (18 pt)

De binding in chemische deeltjes kunnen beschreven worden met behulp van de zogenaamde "Molecular Orbital Theory".

**a)** (3 pt) (Teken **i**) het MO diagram van  $H_2$ ; **ii**) het MO diagram van  $He_2$  en **iii**) het MO diagram van  $Li_2$ .

**b)** (2 pt) Geef met behulp van de MO-diagrammen (vraag **a**) een verklaring voor **i**) dat  $He_2$  geen stabiele verbinding is, en **ii**) dat  $Li_2$  stabiel is.

**c)** (2 pt) Teken nu het MO-diagram van  $O_2$  en geef een verklaring voor het feit dat  $O_2$  een biradicaal is.

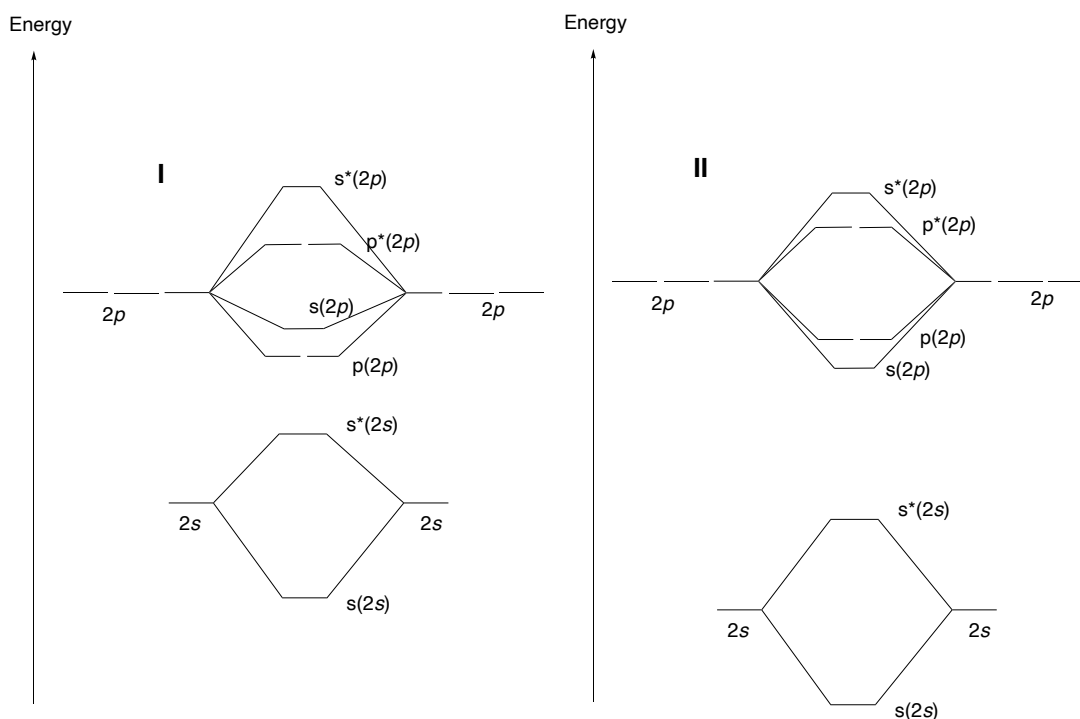
**d)** (4 pt) Teken een eenvoudig MO-diagram van  $FO\cdot$ .

**e)** (3 pt) Geef een verklaring voor het feit dat de elektronenaffiniteit van  $O_2$  ( $EA(O_2) < 0.45$  eV) veel lager is dan de elektronenaffiniteit van het  $FO\cdot$  ( $EA(FO) = 2.3$  eV).

**f)** (4 pt) Geef de bindings-orde van onderstaande deeltjes ( $B.O. = \frac{1}{2}(N - N^*)$ ,  $N$  = aantal elektronen in bindend MO's en  $N^*$  aantal elektronen in anti-bindend MO's). Geef aan welke van de volgende deeltjes stabiel zijn en welke niet:



Hulp: I is van toepassing voor  $B_2$ ,  $C_2$  en  $N_2$  en II is van toepassing voor  $O_2$  en  $F_2$ .



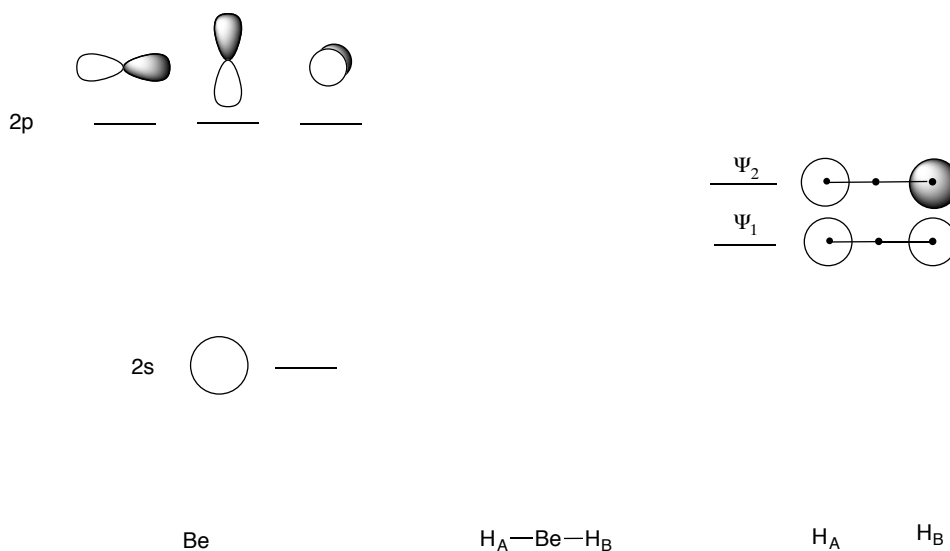
### Opgave 6 (Valentiebindingstheorie MO theorie, poly-atomaire moleculen) (18 pt)

BeH<sub>2</sub> is een bijzonder molecuul met een lineaire structuur.



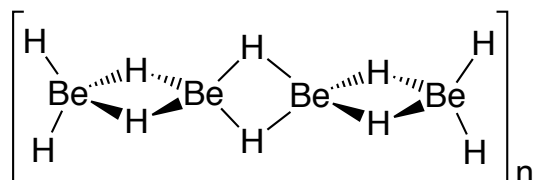
a) (2 pt) Geef de hybridisatie van Be in het BeH<sub>2</sub> molecuul.

b) (5 pt) Teken een MO diagram van het BeH<sub>2</sub> molecuul met onderstaande figuur als uitgangspunt:



c) (3 pt) Geef aan welke MO's **i)** bindend zijn; **ii)** niet-bindend zijn en **iii)** anti-bindend zijn.

d) (2 pt) BeH<sub>2</sub> kan als vaste stof een polymeerachtige structuur aannemen, [Be(H)<sub>2</sub>]<sub>n</sub>, waarin ieder Be center 4 gecoördineerd is:



Geef de hybridisatie van het Be in [Be(H)<sub>2</sub>]<sub>n</sub>

e) (3 pt) Welke atoomorbitalen zijn betrokken bij de vorming van de “Be-H-Be” interactie.

f) (3 pt) **i)** Teken een eenvoudig MO-diagram dat de “Be-H-Be” interactie kan beschrijven; **ii)** laat zien dat de bindingsorde van de “Be-H-Be” binding 1 is.