

Chemical Bonding

Tentamen 22-10-20

Uitwerkingen

Online

Canvas assignment

13.00 – 16.00 (16.45 voor studenten met extra tijd)

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

De volgende 6 opgaven dienen gemaakt te worden.

Toegestane hulpmiddelen: het leerboek, aantekeningen, uitwerkingen van opgaven en de huiswerkopgaven, presentaties van het colleges, het periodiek systeem, (grafische) rekenmachine, Excel als rekenprogramma, BiNaS.

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

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

Docent en coördinator: dr S. Ingemann Jørgensen

Opgave 1 (Foto-elektrische effect) (15 pt)

Bestraling van een metaal met fotonen kan leiden tot het uitstoten van elektronen. De kinetische energie van de elektronen is gegeven door:

$$E_{kin}(\text{elektron}) = \frac{1}{2} m v^2 = h \nu - \Phi$$

m_e : massa van het elektron, v , snelheid van het elektron, h : Planck constante; ν = frequentie van het licht en Φ is de werkfunctie van het metaal

a) (3 pt) De werkfunctie is voor Be, Mg en Ca als volgt:

$$\text{Be: } 4.98 \text{ eV} \quad \text{Mg: } 3.66 \text{ eV} \quad \text{Ca: } 2.87 \text{ eV}$$

Licht de trend in de werkfuncties toe.

b) (3 pt) De werkfunctie is voor Pd, Ag en Cd als volgt:

$$\text{Pd: } 5.22 \text{ eV} \quad \text{Ag: } 4.26 \text{ eV} \quad \text{Cd: } 4.08 \text{ eV}$$

Licht de trend in de werkfuncties toe.

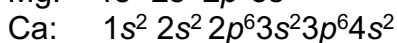
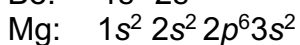
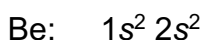
c) (3 pt) i) Bereken de minimale frequentie, ν_0 , van de fotonen die elektronen kunnen verwijderen uit Ag, ii) bereken de maximale golflengte van de fotonen die elektronen verwijderen uit Ag.

d) (3 pt) i) Bereken de kinetische energie van de elektronen die verwijderd worden door Ag te bestralen met fotonen met een golflengte van 200 nm, ii) Bereken de golflengte, λ_e , van de elektronen die uitgestoten worden door Ag te bestralen met licht met een golflengte van 200 nm.

e) (3 pt) Bestraling van Ag met fotonen met een golflengte van 200 nm en een totale energie van 100 μJ leidt tot het verwijderen van elektronen. Bereken de maximale hoeveelheid elektronen die afgestoten kunnen worden door het Ag.

Uitwerking:

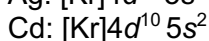
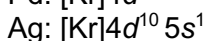
a)



Be \rightarrow Mg: De valentie elektronen in een hoger niveau (3s) in Mg dan Be (2s); minder sterk gebonden \rightarrow lagere werkfunctie voor Mg dan voor Be.

Mg \rightarrow Ca: De valentie elektronen in een hoger niveau (4s) in Ca dan Mg (3s); minder sterk gebonden \rightarrow lagere werkfunctie voor Mg dan voor Be.

b)



Pd → Ag: hogere IE van Pd (8.4 eV) dan voor Ag (7.6 eV); de elektronen zijn sterkere gebonden → de werkfunctie wordt hoger voor Pd dan voor Ag.

Ag → Cd: hogere IE van Ag (7,6 eV) dan voor Cd (5.8 eV); de elektronen zijn sterkere gebonden → de werkfunctie wordt hoger voor Pd dan voor Ag.

c)

i) $\Phi = \nu_0 h \Rightarrow$

$$\nu_0 = \Phi/h = (4.26 \text{ eV} \times 1.60217662 \times 10^{-19} \text{ J/eV}) / (6.62607 \times 10^{-34} \text{ J s}) = \mathbf{1.0300 \times 10^{15} \text{ s}^{-1}}$$

ii) $\lambda \nu_0 = c \Rightarrow \lambda = c/\nu_0 = \mathbf{291 \text{ nm}}$

d)

i) $E_{kin}(\text{elektron}) = h\nu - \Phi = h(c/\lambda) - \Phi = (6.62607 \times 10^{-34} \text{ J s})(2.99792 \times 10^8 \text{ ms}^{-1} / 200 \times 10^{-9} \text{ m}) - (4.26 \text{ eV} \times 1.60217662 \times 10^{-19} \text{ J/eV}) = \mathbf{3.10669 \times 10^{-19} \text{ J}}$

ii) De Broglie:

$$\lambda = h/p = h/m_e v_e$$

$$E_{kin} = \frac{1}{2} m v^2 \Rightarrow v^2 = 2 E_{kin} / m_e \Rightarrow v = 8.258849 \times 10^5 \text{ m s}^{-1}$$

$$\lambda_e = h/(m_e v_e) = \mathbf{8.8074 \times 10^{-10} \text{ m}}$$

e)

E per foton:

$$E = h\nu \text{ en } \lambda\nu = c \Rightarrow E = h(c/\lambda) = 9.93322 \times 10^{-19} \text{ J}$$

Aantal fotonen:

$$E_{\text{totaal}} = 100 \mu\text{J} = 100 \times 10^{-6} \text{ J} \Rightarrow \mathbf{\text{maximaal aantal} = 1.0068 \times 10^{14} \text{ elektronen}} \text{ (aannname: 1 foton} \Rightarrow \text{1 elektron).}$$

Opgave 2 (Deeltje in een doos) (15 pt)

De energie, E_n , 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 constant; m_e : massa van het elektron; L : lengte van de doos

a) (3 pt) Wij beschouwen nu een eendimensionale doos met lengte $L = 200$ pm. 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.

De energie, E_n , van een elektron in een tweedimensionale doos met de lengten L_x en L_y is gegeven door onderstaande vergelijking:

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

$n_1 = 1, 2, 3, \dots$ $n_2 = 1, 2, 3, \dots$

b) (6 pt) Beschouw een tweedimensionale doos met $L_x = 200$ pm en $L_y = 200$ pm. Bereken het verschil in energie, ΔE tussen, de energieniveaus:

i) $n_x = 1, n_y = 2$ en $n_x = 1, n_y = 1$

ii) $n_x = 1, n_y = 3$ en $n_x = 1, n_y = 2$ of $n_x = 2, n_y = 1$

De energie, E_n , van een elektron in een driedimensionale doos met de lengten L_x, L_y en L_z is gegeven door onderstaande vergelijking:

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

c) 6 pt) Beschouw een driedimensionale doos met $L_x = 200$ pm, $L_y = 200$ pm en $L_z = 100$ pm. Bereken i) het verschil in energie, ΔE , tussen het tweede energieniveau en het eerste energieniveau en ii) het verschil in energie, ΔE , tussen het derde en het tweede energieniveau van de driedimensionale doos.

Uitwerkingen:

a) Algemene uitdrukking voor $n_1 \rightarrow n_1 + 1$

$$E_{n_1+1} - E_{n_1} = \frac{(n_1+1)^2 h^2}{8m_e L^2} - \frac{(n_1)^2 h^2}{8m_e L^2} = \frac{h^2}{8m_e L^2} (n_1^2 + 1 + 2n_1 - n_1^2)$$

$$E_{n_1+1} - E_{n_1} = \frac{h^2 (2n_1 + 1)}{8m_e L^2}$$

i) van $n_1 = 1$ naar $n_2 = 2$ $E_{1,2} = 4.5185 \times 10^{-18}$ J

ii) van $n_2 = 2$ naar $n_3 = 3$ $E_{2,3} = 7.5321 \times 10^{-18}$ J

b)

i) Van de toestand met $n_x = n_y = 1$ naar de toestand met $n_x = 1$ en $n_y = 2$.

$$E_{1,1} = 3.0123 \times 10^{-18} \text{ J}$$

$$E_{2,1} = 7.5308 \times 10^{-18} \text{ J}$$

$$\text{Verschil: } 4.5185 \times 10^{-18} \text{ J}$$

ii) Van de toestand met $n_x = 1$ en $n_y = 2$ naar de toestand met $n_x = 1$ en $n_y = 3$.

$$E_{2,1} = 7.5308 \times 10^{-18} \text{ J}$$

$$E_{1,3} = 1.5062 \times 10^{-17} \text{ J}$$

$$\text{Verschil: } 7.5312 \times 10^{-18} \text{ J}$$

c)

c)

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

$$E_{1,1,1} = 9.0379 \times 10^{-18} \text{ J}$$

$$E_{2,1,1} = 1.3536 \times 10^{-17} \text{ J}$$

$$\text{Verschil: } 4.53185 \times 10^{-18} \text{ J}$$

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

$$E_{2,1,1} = 1.3536 \times 10^{-17} \text{ J}$$

$$E_{1,1,2} = 2.7111 \times 10^{-17} \text{ J}$$

$$\text{Verschil: } 1.3555 \times 10^{-17} \text{ J}$$

ii) van de toestand met $n_x = 2$, $n_y = 1$ en $n_z = 1$ naar de toestand met $n_x = 3$, $n_y = 1$ en $n_z = 1$

$$E_{2,1,1} = 1.3536 \times 10^{-17} \text{ J}$$

$$E_{3,1,1} = 2.1086 \times 10^{-17} \text{ J}$$

$$\text{Verschil: } 7.5303 \times 10^{-18} \text{ J}$$

Opgave 3 (Golffuncties) (15 pt)

Voor de 1s en 2s niveaus van het waterstofatoom zijn golffuncties als volgt:

1s

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

2s

$$\psi(r, \theta, \phi) = \frac{1}{8^{1/2}} \left(\frac{1}{a_0} \right)^{3/2} \left(2 - \frac{1r}{a_0} \right) e^{-r/2a_0} \frac{1}{2\pi^{1/2}}$$

a) (4 pt) Geef de uitdrukkingen van de waarschijnlijkheidsdichtheid, ψ^2 , van de 1s en 2s niveaus van het waterstofatoom.

b) (3 pt) **i)** Schets voor het 1s niveau in een figuur de waarschijnlijkheidsdichtheid als functie van r ; **ii)** Schets voor het 2s niveau in een figuur de waarschijnlijkheidsdichtheid als functie van r .

c) (4 pt) Bereken voor het 1s niveau: **i)** de ratio tussen de waarschijnlijkheidsdichtheden van $r = a_0$ en $r = 0$ en **ii)** de ratio tussen de waarschijnlijkheidsdichtheden van $r = 4a_0$ en $r = 0$.

d) (4 pt) Bereken voor het 2s niveau: **i)** de ratio tussen de waarschijnlijkheidsdichtheden van $r = a_0$ en $r = 0$ en **ii)** de ratio tussen de waarschijnlijkheidsdichtheden van $r = 4a_0$ en $r = 0$.

Uitwerkingen:

a)

1s:

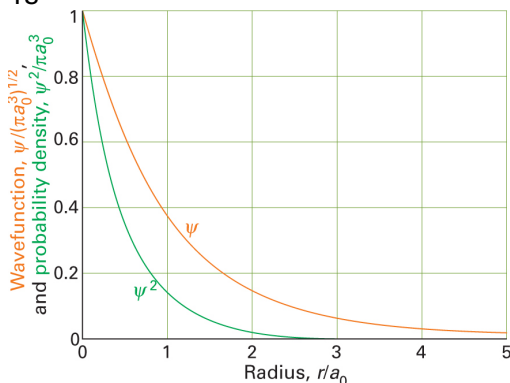
$$\psi^2(r, \theta, \phi) = \frac{1}{\pi a_0^3} e^{-2r/a_0}$$

2s:

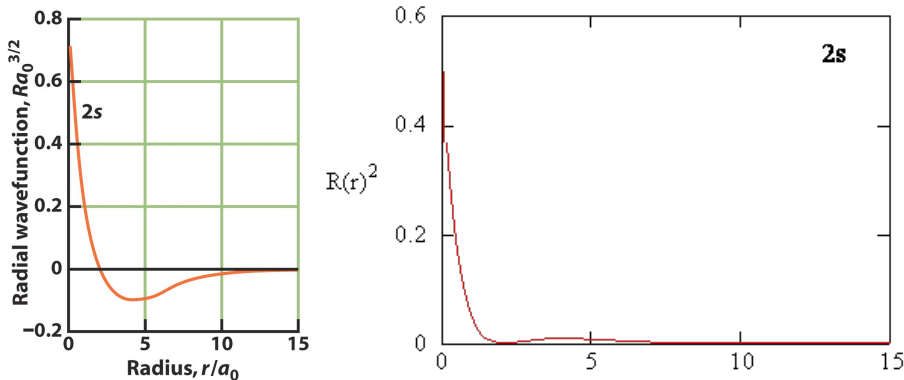
$$\psi^2(r, \theta, \phi) = \frac{1}{32\pi a_0^3} \left(2 - \frac{r}{a_0} \right)^2 e^{-2r/2a_0}$$

b)

1s



2s



c)

1s

$$r = a_0 \Rightarrow \psi^2 = (1/(\pi a_0^3))(\exp(-2a_0/a_0)) = (1/(\pi a_0^3))(\exp(-2))$$

$$r = 0 \Rightarrow \exp(0) = 1 \text{ en eerste term valt weg} = >$$

$$\text{ratio} = 0.1353$$

$$r = 4a_0 \Rightarrow \psi^2 = (1/(\pi a_0^3))(\exp(-8a_0/a_0)) = (1/(\pi a_0^3))(\exp(-8))$$

$$\text{ratio} = 0.0003$$

2s

$$r = a_0 \Rightarrow \psi^2 = (1/(32\pi a_0^3))(2 - a_0/a_0)^2(\exp(-2a_0/2a_0)) = (1/(32\pi a_0^3))(1)^2(\exp(-1))$$

$$r = 0 \Rightarrow \Rightarrow \psi^2 = (1/(32\pi a_0^3))(2 - 0/a_0)^2(\exp(-0/2a_0)) = (1/(32\pi a_0^3))(4)(\exp(0))$$

$$4 \exp(0) = 4 \text{ en eerste term valt weg} = >$$

$$\text{ratio} = 0.0920$$

$$r = 4a_0 \Rightarrow \psi^2 = (1/(32\pi a_0^3))(2 - 4a_0/a_0)^2(\exp(-8a_0/2a_0)) = (1/(32\pi a_0^3))(-2)^2(\exp(-4))$$

$$r = 0 \Rightarrow \psi^2 = (1/(32\pi a_0^3))(2 - 0/a_0)^2(\exp(0/a_0)) = (1/(32\pi a_0^3))(4)(\exp(0))$$

$$4 \exp(0) = 4 \text{ eerste term valt weg: } \Rightarrow$$

$$\text{ratio} = 0.0183$$

Opgave 4 (Kwantumgetallen en elektronconfiguratie) (15 pt)

a) (4 pt) De elektronconfiguratie 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. $n = 3, l = 2, m_l = 1, m_s = 1/2$

2. $n = 5, l = 1, m_l = 0, m_s = -1/2$

3. $n = 2, l = 1, m_l = 2, m_s = 1/2$

4. $n = 2, l = -1, m_l = 0, m_s = 0$

5. $n = 1, l = 2, m_l = 1, m_s = 1/2$

6. $n = 2, l = 0, m_l = 1, m_s = -1/2$

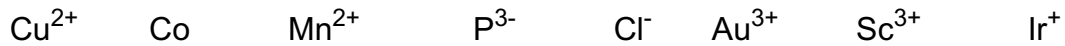
7. $n = 6, l = 2, m_l = -2, m_s = 1/2$

8. $n = 2, l = -2, m_l = -2, m_s = -1/2$

b) (3 pt) Teken in een figuur de relatieve energieën van alle niveaus met $n = 1, 2$ en 3 voor het waterstofatoom. Geef de grondtoestand aan van het waterstofatoom door het elektron in het juiste niveau te plaatsen.

c) (4 pt) Teken in afzonderlijke figuren de relatieve energieën van alle niveaus met $n = 1, 2, 3$ en 4 (niet de $4d$ en $4f$ niveaus) voor **i)** het N atoom, **ii)** het P atoom, en **iii)** het As atoom. Plaats de elektronen in de niveaus zodat de grondtoestand verkregen wordt van N, P en As.

d) (4 pt) Geef aan welk van de onderstaande atomen en ionen dezelfde elektronenconfiguratie hebben en welke niet.



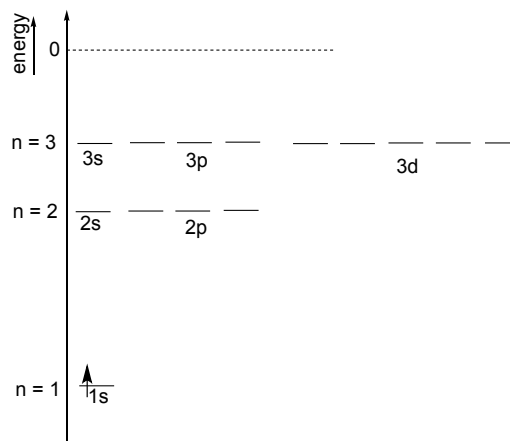
Uitwerkingen:

a)

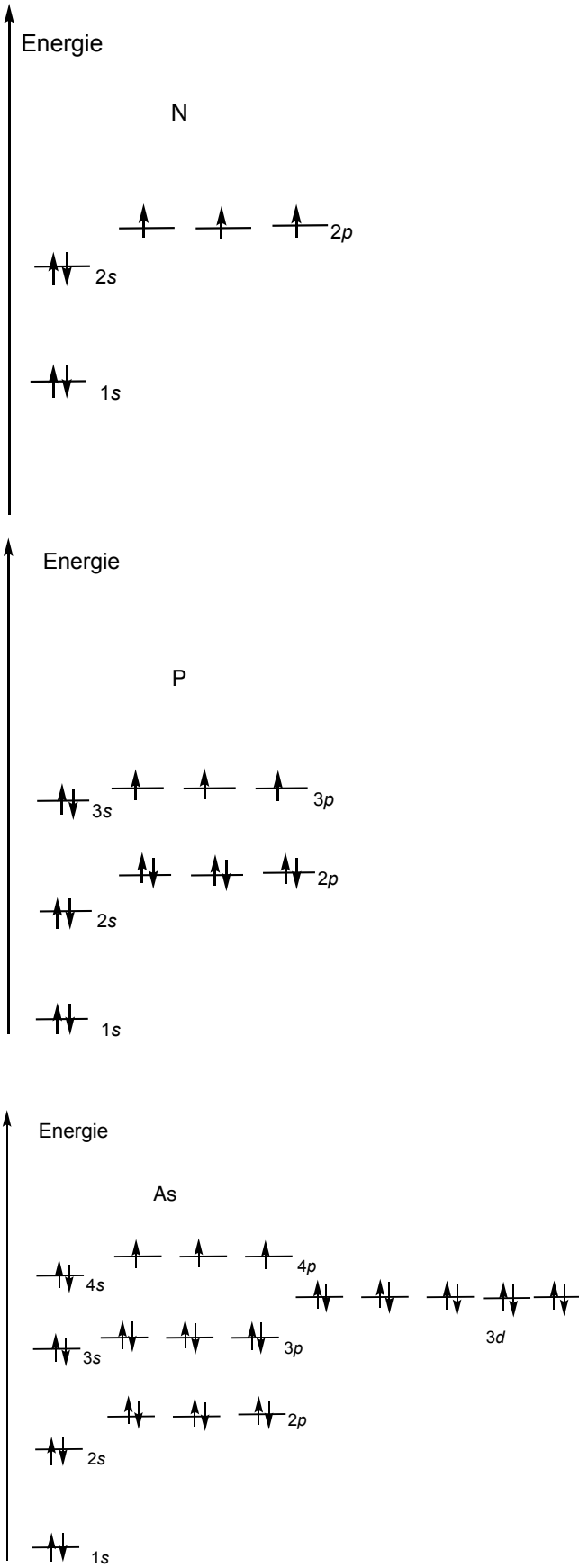
1. Toegestaan
2. Toegestaan
3. Niet toegestaan: m_l kan niet groter zijn dan l
4. Niet toegestaan: l kan niet kleiner zijn dan 0 zijn
5. Niet toegestaan
6. Niet toegestaan: m_l kan niet groter zijn dan l
7. Toegestaan
8. Niet toegestaan: l kan niet kleiner zijn dan 0 zijn

b)

Waterstof



c)



d)

P^{3-} Cl^- Sc^{3+} hebben dezelfde configuratie ($[Ar]$).

Opgave 5 (MO theorie) (20 pt)

a) (5 pt) Teken het MO diagram van: **i)** H_2^{2+} , **ii)** NaH , **iii)** HCl , **iv)** ClF en **v)** ClO^+ . Plaats de elektronen in de diagrammen zodat deze grondtoestand van de **i)** H_2^{2+} , **ii)** NaH , **iii)** HCl **iv)** ClF en **v)** ClO^+ representeren.

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

b) (3 pt) Geef de bindingsorde van **i)** H_2^{2+} , **ii)** NaH , **iii)** HCl **iv)** ClF en **v)** ClO^+ .

c) (5 pt) Teken het MO diagram: **i)** O_2 , **ii)** SO en **iii)** S_2 . Plaats de elektronen in de diagrammen zodat deze de grondtoestand van de **i)** O_2 , **ii)** SO en **iii)** S_2 weergeven.

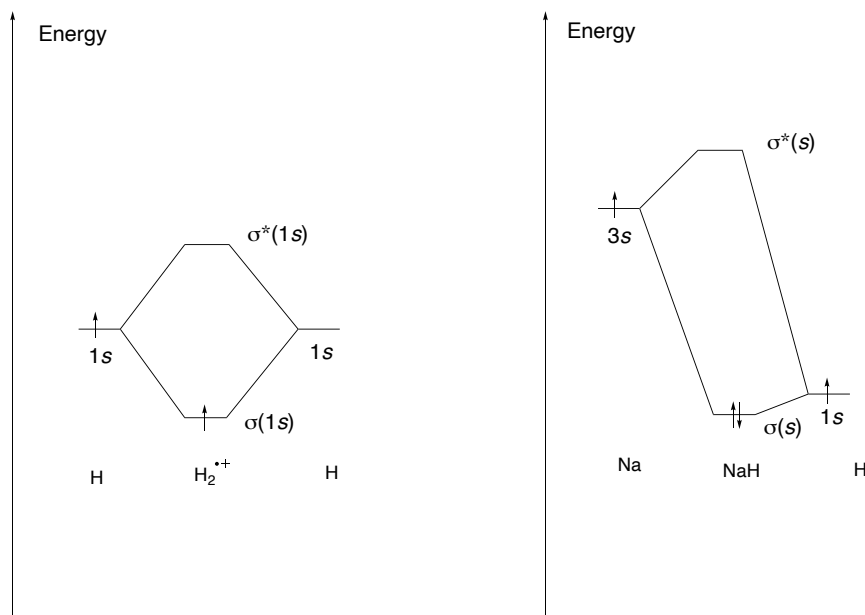
d) (3 pt) Geef de bindingsorde van de volgende deeltjes: **i)** O_2 , **ii)** SO , **iii)** S_2

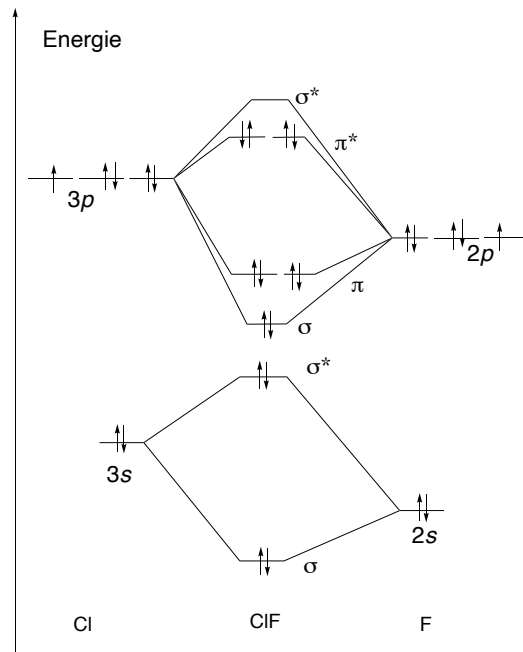
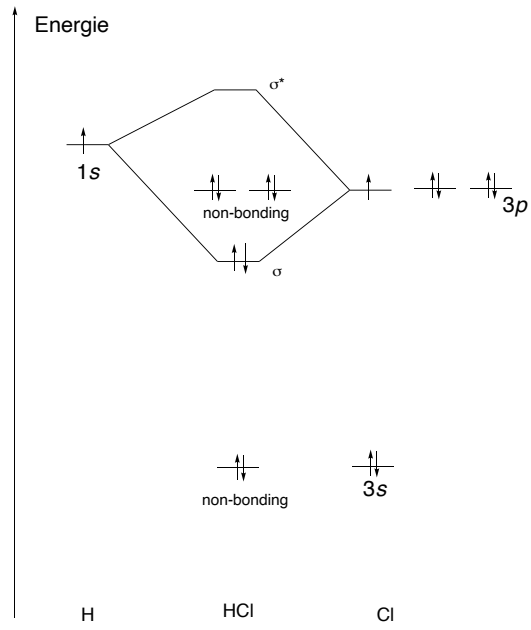
e) (4 pt) Geef een verklaring voor de volgende feiten:

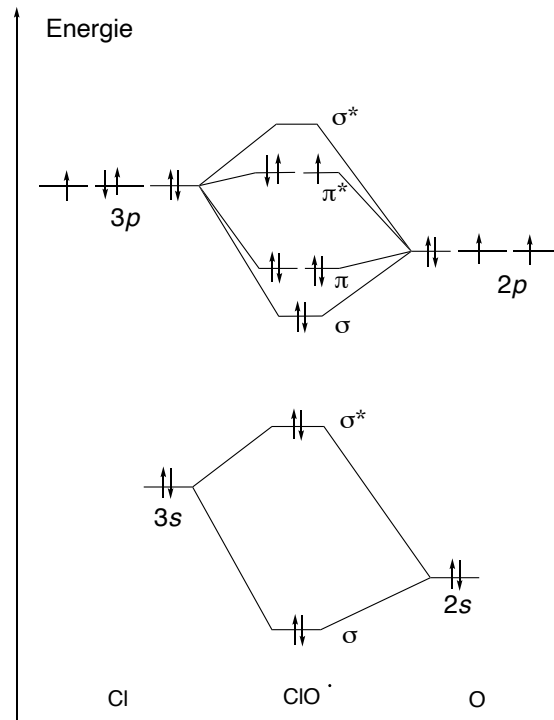
	O_2	SO	S_2
Bond length	121 pm	148 pm	189 pm
Bond strength	498 kJ mol^{-1}	onbekend	265 kJ mol^{-1}

Uitwerkingen:

a)







b)

H₂⁺ BO = 0.5

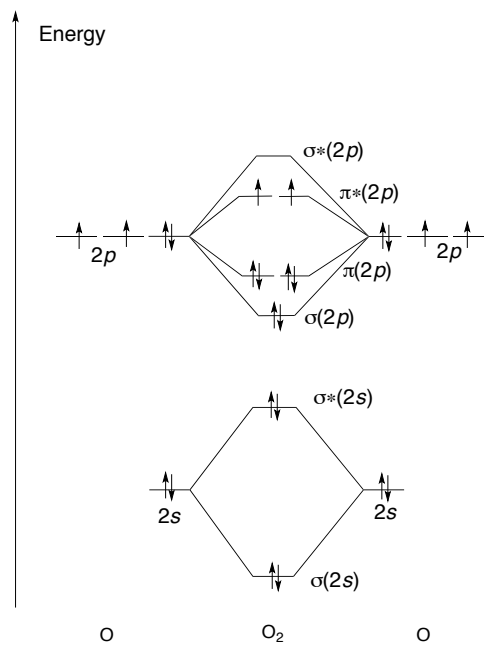
NaH BO = 1

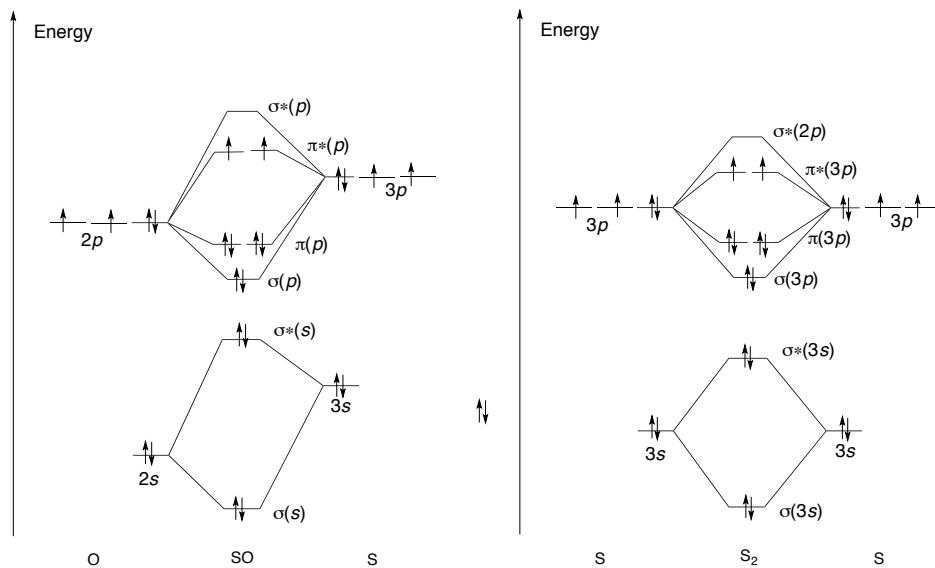
HCl BO = 1

ClF BO = 1

ClO[•] BO = 1.5

c)

Zuurstof, O₂:



d)

$$\text{BO}(\text{O}_2) = 2 \quad \text{BO}(\text{SO}) = 2 \quad \text{BO}(\text{S}_2) = 2$$

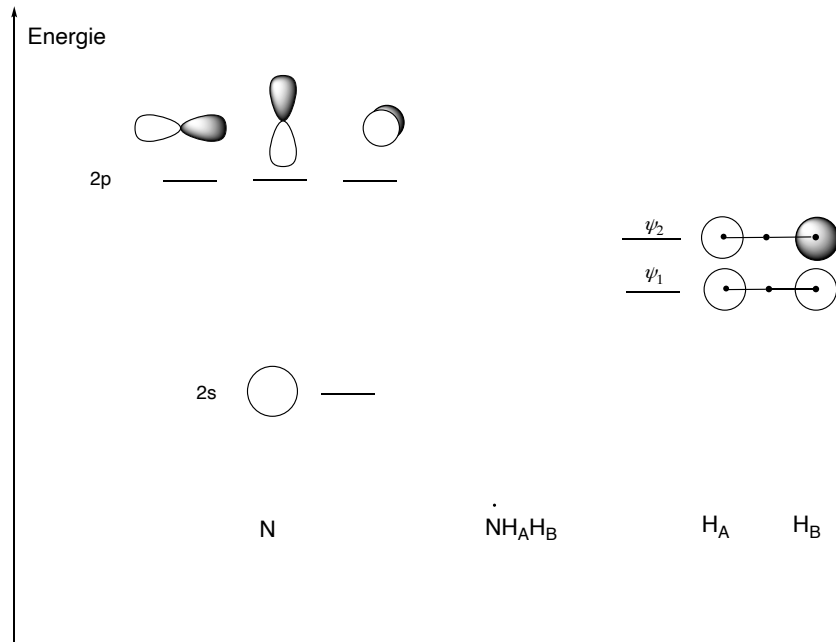
e)

O ($r = 73 \text{ pm}$) is kleiner dan S ($r = 104 \text{ pm}$); ook wordt de s-binding in O₂ gevormd door overlap van $2p_z$ orbitalen, in SO door overlap van de $3p_z$ van S en de $2p_z$ van O en in S₂ door overlap van de twee $3p_z$ orbitalen.

De bindingsafstand wordt groter naarmate de atomen groter worden, hierdoor wordt de binding ook zwakker d.w.z. de bindingssterke neemt af in de reeks O₂, SO en S₂.

Opgave 6 (Valentiebindingstheorie en MO theorie) (20 pt)

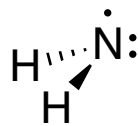
- (3 pt) Teken de Lewis structuur van het NH₂[•] radicaal.
- (3 pt) Geef de geometrie aan van het NH₂[•] radicaal.
- (3 pt) Geef de hybridisatietoestand van het N atoom in het NH₂[•] radicaal.
- (7 pt) i) Teken met behulp van onderstaande figuur een eenvoudig MO diagram van het NH₂[•] radicaal, ii) geef in het diagram aan welke MO's bindend, niet-bindend en anti-bindend zijn.
- (4 pt) Hoeveel ongepaarde elektronen zijn er in i) NH₂[•], ii) NH₂⁻ en iii) NH₂⁺.



Uitwerkingen

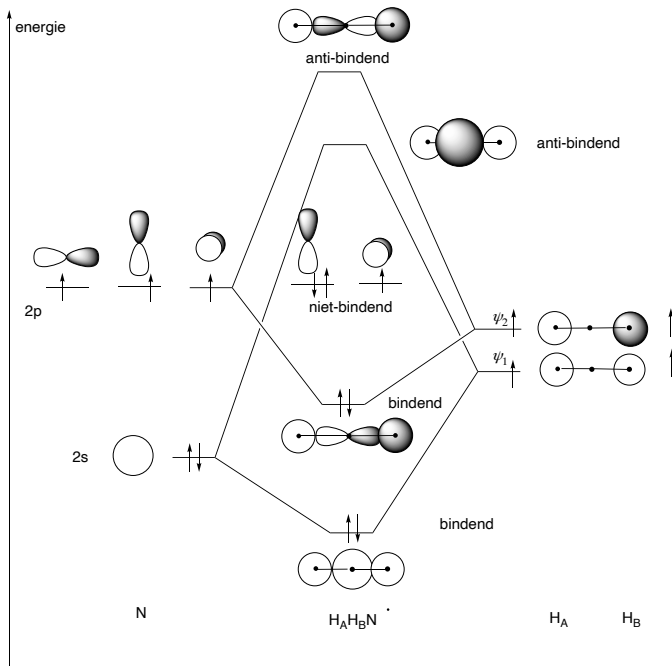
a) b)

Het NH_2^\cdot radicaal is gebogen:



c) De hybridisatie van het N atoom is sp^3 .

d)



e)

i) NH_2 . 2

ii) NH_2^- . 2

iii) NH_2^+ . 2