



Tentamen

Chemical Bonding Premaster Course

Pre-master Chemistry (joint degree)

Tentamen

Datum: 22 October 2020

Tijd: 13-16uur

Aantal pagina's: 5 (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:** Kladdpapier, Rekenmachine (grafisch), Rekenmachine (niet-grafisch), Studieboek of reader, Presentaties van hoorcolleges, leerboek als PDF, aantekeningen, uitwerkingen van opgaven en huiswerk, periodiek systeem, BiNaS, Excel. 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 (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.

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:

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

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

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.

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 $r = 0$.

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

Cu²⁺ Co Mn²⁺ P³⁻ Cl⁻ Au³⁺ Sc³⁺ Ir⁺

Opgave 5 (MO theorie) (20 pt)

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

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

a) (3 pt) Teken de Lewis structuur van het NH_2^* radicaal.

b) (3 pt) Geef de geometrie aan van het NH_2^* radicaal.

c) (3 pt) Geef de hybridisatietoestand van het N atoom in het NH_2^* radicaal.

d) (7 pt) **i)** Teken met behulp van onderstaande figuur een eenvoudig MO diagram van het NH_2^* radicaal, **ii)** geef in het diagram aan welke MO's bindend, niet-bindend en anti-bindend zijn.

e) (4 pt) Hoeveel ongepaarde elektronen zijn er in **i)** NH_2^* , **ii)** NH_2^- en **iii)** NH_2^+ .

