

Tentamen

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

Hertentamen

Datum: 1 December 2020

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), Studieboek of reader, aantekeningen, uitwerking van opgaven en de huiswerkopgave, presentaties van de colleges, het periodiek systeem, Excel en BiNaS. Overige hulpmiddelen zijn niet toegestaan.

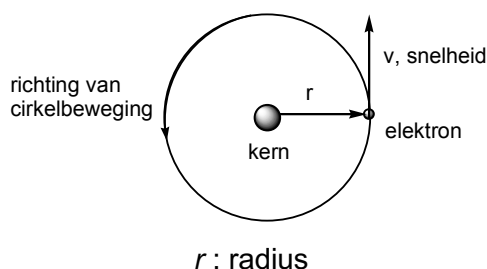
HUISHOUDELIJKE MEDEDELINGEN

- 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 (Atoommodellen en het onzekerheidsprincipe) (16 pt)

Het waterstofatoom kan beschouwd worden als een elektron die een cirkelbaan beschrijft omheen de kern



a) (5 pt) Leid onderstaande vergelijking af voor de snelheid, v , van het elektron in een waterstofatoom. Gebruik hierbij de onderstaande vergelijkingen voor de Coulomb kracht en de centripetale kracht.

$$v = \frac{e^2}{2\varepsilon_0 h n}$$

e : elementaire lading ε_0 ; elektrische veldconstante (vacuum permittivity), h ; Planck constante,
 $n = 1, 2, 3 \dots$

De Coulombkracht, $f(\text{Coulomb})$, is gegeven door:

$$f(\text{Coulomb}) = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r^2}$$

De centripetale kracht, $f(\text{centripetaal})$, is gegeven door:

$$f(\text{centripetaal}) = \frac{m_e v^2}{r}$$

b) (5 pt) Bereken de snelheid van het elektron voor $n = 1, 2$ en 3 .

c) 6 pt) Volgens het Heisenberg onzekerheidsprincipe geldt:

$$\Delta p \Delta x \geq \frac{1}{2} (h/2\pi) \quad p = m_e v$$

p : impuls, m_e : massa van het elektron v : snelheid

Bereken nu de onzekerheid in de positie, Δx , van een elektron voor $n = 1, 2$ en 3 met de aanname dat de onzekerheid in de snelheid van het elektron Δv is gelijk aan $0.1 \times v$.

Hoe verhouden de resultaten zich tot de van der Waals diameter van een waterstofatoom, 74 pm.

Opgave 2 (Particle in a box) (18 pt)

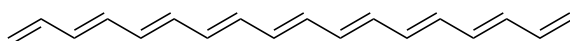
De energie, E_n , van een elektron in een één-dimensionale doos is gegeven door onderstaande vergelijking:

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

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

a) (3 pt) Geef de uitdrukking voor het energieverval tussen twee opeenvolgende energieniveaus van het elektron in de één-dimensionale doos (van n_1 naar het volgende niveau $n_2 = n_1 + 1$).

b) (3pt) Wij beschouwen nu het onderstaande molecuul $C_{18}H_{20}$ als een hypothetische één-dimensionale doos.

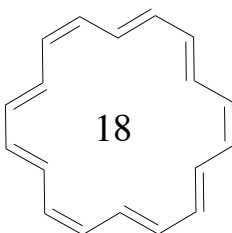


De afstand tussen de koolstofatomen is ongeveer 140 pm. Geef de totale lengte van de hypothetische één-dimensionale doos.

c) (6 pt) Er zijn 9 C=C dubbele bindingen in de getekende structuur. De grondtoestand correspondeert met $n_9 = 9$ en de 1e geëxciteerde toestand met $n_{10} = 10$.

Bereken **i)** de energie die nodig is om een elektron van $n_9 = 9$ te brengen naar de toestand met $n_{10} = 10$ en **ii)** de golflengte van het licht dat uitgezonden wordt wanneer de 1e geëxciteerde toestand verval naar de grondtoestand.

d) (6 pt) Wij beschouwen nu het onderstaande cyclische molecuul, $C_{18}H_{18}$ ([18]-annuleen) als een hypothetische twee-dimensionale doos. De lengte van de doos is bij benadering: $L_x = 840$ pm en $L_y = 840$ pm.



Bereken **i)** de energie die nodig is om een elektron van de grondtoestand met $n_x = 4$ en $n_y = 5$ te brengen naar de 1^e geëxciteerde toestand met $n_x = 5$ en $n_y = 5$, en **ii)** de golflengte van het licht dat uitgezonden wordt wanneer het 1e geëxciteerde toestand verval naar de grondtoestand. Vergelijk de waarden met de resultaten verkregen bij vraag **c)**.

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

Opgave 3 (Golffuncties) (16 pt)

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

1s niveau

$$R(r) = 2 \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} e^{-Zr/a_0}$$

2s niveau

$$R(r) = \frac{1}{2\sqrt{2}} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} \left(2 - \frac{Zr}{a_0} \right) e^{-Zr/2a_0}$$

Z = atoomnummer; a_0 (Bohr constante) = 52.9 pm, r = afstand tot de atoomkern

a) (4 pt) **i)** Geef voor het 1s niveau de waarde van de functie $R(r)$ bij $r = 0$, **ii)** Schets voor het 1s niveau in een figuur $R(r)$ als functie van r .

b) (4 pt) **i)** Geef voor het 2s niveau de waarde van de functie $R(r)$ bij $r = 0$, **ii)** Geef voor het 2s niveau aan bij welke waarde van r is de functie $R(r)$ gelijk aan nul is, **iii)** Schets voor het 2s niveau in een figuur $R(r)$ als functie van r .

c) (4 pt) De algemene uitdrukking van de gemiddelde afstand tot de atoomkern, $\langle r \rangle$, van een orbitaal is als volgt (n : hoofdkwantumgetal en l : nevenkwantumgetal).

$$\langle r \rangle = n^2 \left\{ 1 + \frac{1}{2} \left(1 - \frac{l(l+1)}{n^2} \right) \right\} \frac{a_0}{Z}$$

n : hoofdkwantumgetal, l : nevenkwantumgetal.

Bereken nu $\langle r \rangle$ voor een elektron in het **i)** 1s niveau, **ii)** 2s niveau, **iii)** 3s niveau, **iv)** 2p, **v)** 3p en **vi)** 3d voor het waterstof atoom. Licht de trend in de $\langle r \rangle$ waarden toe in eigen woorden (hint: geef $\langle r \rangle$ in termen van a_0 / Z).

d) (4 pt) Bereken het verschil in de waarde van $\langle r \rangle$ voor een elektron in het 2p en 3p niveau voor **i)** H, **ii)** Be^{3+} en **iii)** N^{6+} . Licht de trend in de antwoorden toe (hint: geef $\langle r \rangle$ in termen van a_0 / Z).

Opgave 4 (Ionisatie en elektronconfiguratie) (16 pt)

De ionisatie-energieën, IE, van de elementen, B, C, N, O, F en Ne zijn hieronder weergegeven. Het gaat hier om ionisatie vanuit het 2s of het 2p niveau.

Element	IE in eV – 2s niveau	IE in eV – 2p niveau
B	14.0	8.3
C	19.5	10.7
N	25.5	13.1
O	32.3	15.9
F	48.5	18.7

- a)** (4 pt) Geef een toelichting op de trend in de waarden van de IE vanuit het 2p niveau voor B, C, N, O, F.
- b)** (4 pt) Geef een toelichting op het verschil tussen de IE waarden voor de 2s en 2p niveaus in de reeks B, C, N, O, F.
- c)** (4 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.
- d)** (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 O atoom, **ii)** het P atoom, en **iii)** het Se atoom. Plaats de elektronen in de niveaus zodat de grondtoestand verkregen wordt van C, Se en

Opgave 5 (Valentiebindingstheorie en MO theorie) (20 pt)

Covalente bindingen kunnen beschreven worden met behulp van de zogenaamde "Valence bond theory".

a) (2 pt) Geef een beknopte omschrijving van **i)** een σ binding en **ii)** een π binding.

b) (2 pt) Geef de hybridisatietoestand aan van het C of de C atomen in onderstaande stoffen.



c) (2 pt) Geef de hybridisatietoestand aan van het centrale atoom in onderstaande stoffen.



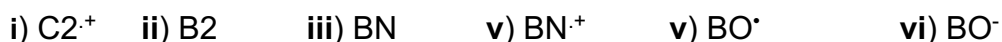
De bindingen in moleculen kunnen ook beschreven worden met behulp van de "Molecular orbital theory".

d) (2 pt) Teken het MO diagram van: **i)** B_2 , **ii)** C_2 en **iii)** O_2 . Plaats de elektronen in de diagrammen zodat deze grondtoestand van de **i)** B_2 , **ii)** C_2 en **iii)** O_2 representeren.

e) (4 pt) **i)** Teken het MO diagram BN en laats de elektronen in het diagram zodat deze grondtoestand van BN weergeeft, **ii)** Is BN diamagnetisch of paramagnetisch.

f) (4 pt) **i)** Teken het MO diagram BO^* en laats de elektronen in het diagram zodat deze grondtoestand van BO^* weergeeft, **ii)** Is BO^* diamagnetisch of paramagnetisch.

g) (4 pt) Geef de bindingsorde, B. O., van



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

Opgave 6 (Valentiebindingstheorie en MO theorie) (14 pt)

Carbene, CH_2 , is een heel reactief molecuul.

- (3 pt) Teken en Lewis structuur van CH_2 .
- (3 pt) Geef de geometrie aan van CH_2 .
- (3 pt) Geef de hybridisatietoestand van het C atoom in CH_2 .

In de meest stabiele toestand heeft CH_2 twee ongepaarde elektronen, het is een zogenaamde triplet.

- (5 pt) Geef met behulp van een eenvoudig MO diagram een verklaring voor het feit dat CH_2 in de grondtoestand een triplet is.

Hulp:

