

Chemical Bonding

2020 -2021

5254CBFH3Y

Voorbeeld tentamen opgaven

Science Park

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), 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 (Heisenberg Uncertainty principle)

Volgens het Heisenberg onzekerheidsprincipe geldt

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

Δx : onzekerheid in positie;

Δp : onzekerheid in impuls; $p = mv$

$\Delta E = \Delta p^2/2m$: onzekerheid in energie

a_0 : Bohr radius

a) Beschouw nu het waterstofatoom met het elektron in de 1s orbitaal en neem het volgende aan:

Grootte van het waterstof atoom: $2 \times a_0$

i) Bereken nu de onzekerheid in energie van het elektron, ΔE , voor $\Delta x = 2 \times a_0$. Geef ΔE ook in kJ mol^{-1} .

Grootte van de atoomkern: $2 \times a_0/(2.0 \times 10^4)$

ii) Beschouw nu de situatie waarin het elektron zich bevindt in de kern van het waterstofatoom ($\Delta x = 2 \times a_0/(2.0 \times 10^4)$). Bereken nu de onzekerheid in energie van het elektron, ΔE . Geef ΔE ook in kJ mol^{-1} .

Vergelijk het antwoord met het resultaat verkregen bij vraag **a)**.

Opgave 2 (Particle in a box)

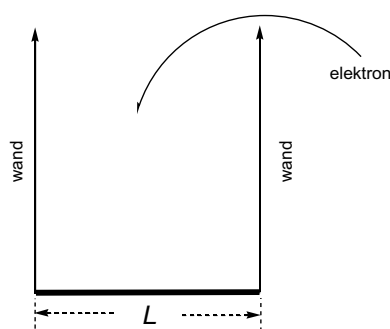
a) Bereken het momentum, p , van een elektron met een snelheid, v , van 1 % van de snelheid van licht, c ($p = m v$ en $v = 0.01 c$).

b) Volgens de Broglie geldt het volgende (λ = golflengte; h = Planck's constante) :

$$\lambda = \frac{h}{p}$$

Bereken nu de golflengte van het elektron met het momentum verkregen bij vraag **a)**.

c) Wij plaatsen nu het elektron met de golflengte verkregen bij vraag **b)** in een kleine 'doos' met de lengte L ;



- i) Kunnen wij de waarde van L willekeurig kiezen?; Licht het antwoord toe;
 ii) Geef de minimale waarde van L van de 'doos'.
 d) Wij verhogen nu de snelheid, v , van het elektron in de doos.
 i) Kunnen wij de snelheid, v , willekeurig kiezen?; Licht het antwoord toe.
 ii) Geef de nieuwe waarde van de snelheid, v , van het elektron in de 'doos'.

Opgave 3 (Wave function and orbitals)

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; $a_0 = 52.9$ pm, r = afstand tot de atoomkern

- a) 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) 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) 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) 2p niveau, en iii) 3d niveau 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) Bereken het verschil in de waarde van $\langle r \rangle$ voor een elektron in het 2p en 1s niveau voor i) H, ii) Li^{2+} en iii) F^{8+} . Licht de antwoorden met het antwoord toe.

Opgave 4 (Electron configuration)

Hieronder is een tabel met de waarden van **i)** de effectieve kernlading, Z_{eff} , **ii)** de 1^e ionisatieenergie, IE, en **iii)** de werkfunctie, Φ , van de elementen, Li, Na, K en Rb.

Element	Z_{eff}	1 ^e IE in kJ mol ⁻¹	Φ
Li	1.279	520	2.9
Na	2.507	496	2.36
K	3.495	419	2.29
Rb	4.985	403	2.26

- a) Geef een beknopte omschrijving van de begrippen: Z_{eff} , 1^e IE en Φ .
 b) Licht de trend in de waarden van Z_{eff} , 1^e IE en Φ toe voor Li, Na, K en Rb.
 c) Teken in een figuur de relatieve energieën van alle niveaus (orbitalen) voor **i)** Li, **ii)** Na, **iii)** K, en **iiii)** Rb. Plaats de elektronen in de niveaus zodat de grondtoestand verkregen wordt van Li, Na, K, Rb.

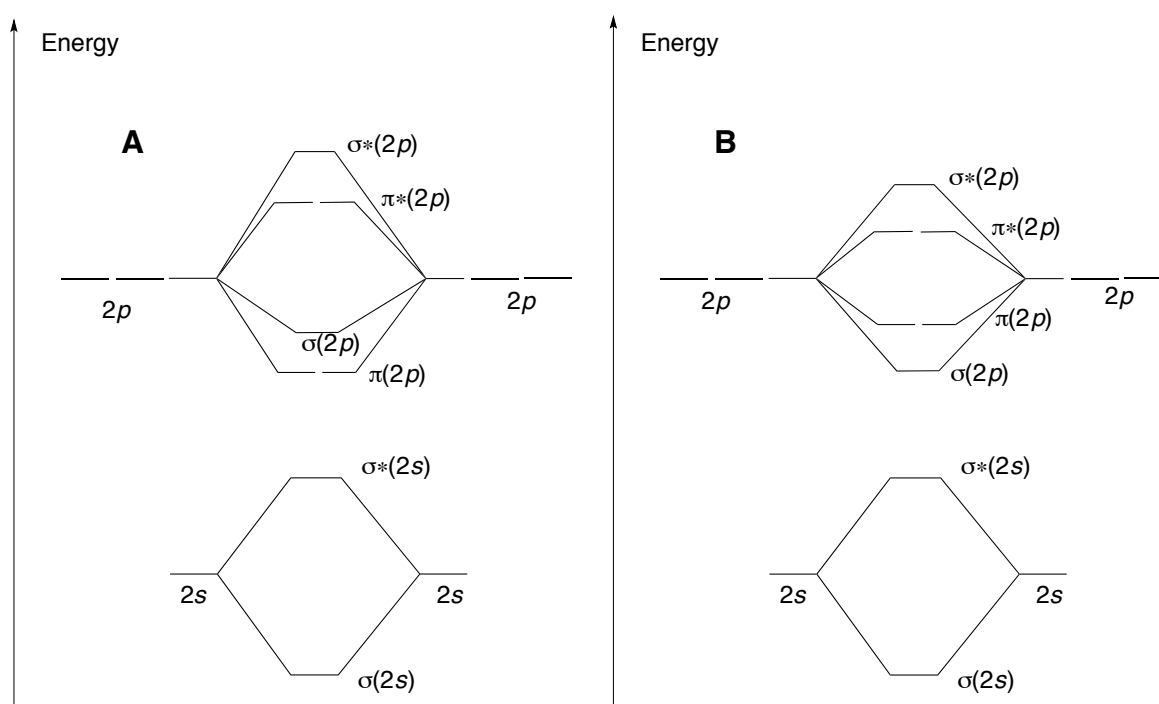
Opgave 5 (MO theory)

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

- a) Omschrijf het begrip: Molecuul orbitaal.
 b) Teken **i)** het MO diagram van H₂; **ii)** het MO diagram van Li₂ en **iii)** het MO diagram van LiH.
 c) Geef met behulp van de MO diagrammen (vraag a) een verklaring voor:
 i) De binding tussen de twee lithium atomen in Li₂ is veel zwakker dan de binding tussen de twee waterstofatomen in H₂;
 ii) De binding in LiH kan beter omschreven worden als Li⁺H⁻ dan Li⁺H⁺.
 d) Teken een eenvoudig MO diagram van NO[•]. Geef met behulp van het MO diagram een verklaring voor het feit dat de bindingslengte in NO[•] korter is dan in het NO⁻ anion.

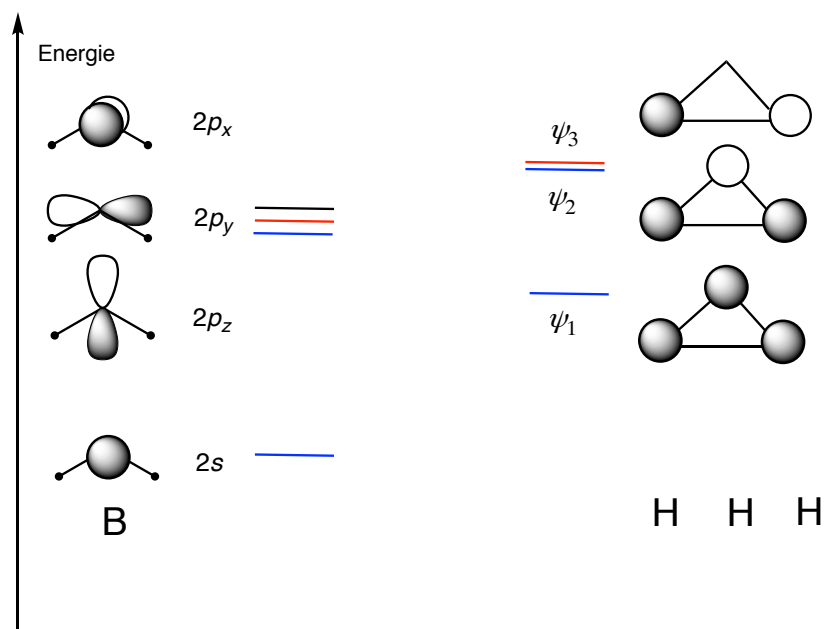
B.O. = $\frac{1}{2} (N - N^*)$, N = aantal elektronen in bindende MO's en N* aantal elektronen in anti-bindende MO's).

Hulp: **A** is van toepassing voor B₂, C₂ en N₂ en **B** is van toepassing voor O₂ en F₂.



Opgave 6 (MO theorie) (16 pt)

- a) Teken de Lewis structuur van BH_3 .
 b) Geef de geometrie van BH_3 .
 c) Geef de hybridisatietoestand van het B atoom in BH_3 .
 d) Teken met behulp van onderstaande een eenvoudig MO diagram van BH_3 . Plaats de elektronen in de MO's zodat de grondtoestand van het BH_3 molecuul weergegeven wordt.



- e) Geef aan welke MO's i) bindend zijn; ii) niet-bindend zijn en iii) anti-bindend zijn.
 f) BH_3 komt voor als een dimeer, B_2H_6 , met onderstaande structuur. i) Geeft de geometrie rondom een B atoom aan en ii) de hybridisatietoestand van de B atomen.

