

Oefentamen Quantumchemistry and Modelling deel 2

Opgave 1

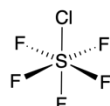
a) Tot welke puntgroepen behoren de volgende ruimtelijke moleculaire structuren?

I.



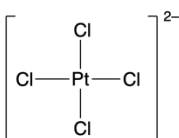
Perfluormethaan

II.



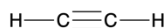
Zwavel chloride pentafluoride

III.



Platinumtetrafluoride (vlak)

IV.



Acetyleen

b) Geef alle symmetrie-operaties van structuur (III).

c) Een molecuul behoort tot de D_{3d} groep. Geef aan of de volgende integralen op grond van symmetrie gelijk aan 0 zijn.

I. $\int \psi_{A_{2g}} \psi_{A_{2g}} d\tau$

II. $\int \psi_{A_{1g}} z \psi_{A_{2u}} d\tau$

III. $\int \psi_{A_{1u}} \psi_{A_{2u}} \psi_{A_{1g}} d\tau$

IV. $\int \psi_{A_{1u}} (x^2 + y^2) \psi_{A_{2g}} d\tau$

Karaktertabel D_{3d} puntgroep.

D_{3d}	E	$2C_3$	$3C_2$	i	$2S_6$	$3\sigma_d$	Funcities
A_{1g}	1	1	1	1	1	1	$(x^2+y^2), z^2$
A_{2g}	1	1	-1	1	1	-1	
E_g	2	-1	0	2	-1	0	$(x^2-y^2), xy, xz, yz$
A_{1u}	1	1	1	-1	-1	-1	
A_{2u}	1	1	-1	-1	-1	1	z
E_u	2	-1	0	-2	1	0	x, y

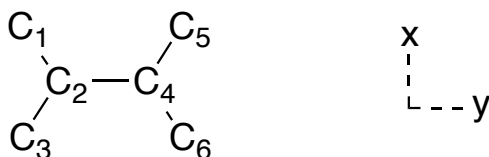
Opgave 2

- Schrijf de Slater determinant voor He op, en bewijs dat deze golffunctie antisymmetrisch is.
- Wat gebeurt er met de Slater determinant golffunctie als we twee elektronen met gelijke spin in eenzelfde orbitaal plaatsen? Bewijs het antwoord.
- Schrijf de Slater determinant voor het Be atoom op.

Opgave 3

- Gegeven is het fictieve vlakke geconjugeerde molecuul, met 6π ($2p_z$) orbitalen en 6 elektronen, in het figuur hieronder. Laat volgens de benadering van Hückel zien dat de energieën E de volgende oplossingen hebben: $\alpha - \beta$, $\alpha - 2\beta$, $\alpha + \beta$, $\alpha + 2\beta$ en α (tweevoudig ontaard). Rangschik de energieën van laag (meest stabiel) naar hoog (minst stabiel).

Maak gebruik van moleculaire symmetrie (*Hint: de 6×6 determinant wordt hierdoor uitgebloeit in twee 2×2 determinanten en twee 1×1 determinanten*), en houdt de weergegeven nummering en het assenstelsel aan.



- Bepaal het moleculaire orbitaal (MO) welke correspondeert met $E = \alpha - 2\beta$.
- Teken de volgende twee ontaarde moleculaire orbitalen MO's:
 - $\psi_{E=\alpha} = 0.50\chi_1 - 0.50\chi_3 + 0.50\chi_5 - 0.50\chi_6$
 - $\psi_{E=\alpha} = 0.50\chi_1 - 0.50\chi_3 - 0.50\chi_5 + 0.50\chi_6$