

TENTAMEN
CHEMISCHE BINDING EN PERIODIEKE SYSTEEM (6H020)
01-07-2002, 14.00-17.00 uur

Voorzie elk vel dat je inlevert van je naam en je identiteitsnummer. Begin elke opgave op een nieuwe bladzijde. De puntenwaardering is als volgt.

vraag 1a t/m 1j	3 punten voor ieder onderdeel
vraag 2a t/m 2d	5 punten voor ieder onderdeel
vraag 3a t/m 3c en 3f	3 punten voor ieder onderdeel
vraag 3d en 3e	4 punten voor ieder onderdeel
vraag 4a en 4c	6 punten voor ieder onderdeel
vraag 4b	8 punten
vraag 5a	15 punten
vraag 5b	5 punten

Je kunt maximaal 110 punten halen. Het eindcijfer wordt bepaald door het minimum van 100 en je puntenaantal door 10 te delen en af te ronden.

Veel succes

Opgave 1:

- (a). Wat is een Bohrse baan?
- (b). Wat is de Kopenhagen-interpretatie van een golffunctie?
- (c). Wat is de Born-Oppenheimer-benadering?
- (d). Wat is een orbital?
- (e). Door welke elektronenconfiguratie worden de atomen in groep III van het periodieke systeem gekarakteriseerd?
- (f). Wat is resonantie in de Lewis-theorie?
- (g). Wat is de LCAO-benadering?
- (h). Hoe kun je aan een MO zien of je te maken hebt met een covalente of een ionogene binding?
- (i). Wat is hybridisatie?
- (j). Waarom is de bindingshoek in H₂O niet 180°?

Opgave 2:

De potentiaal die een proton of neutron in de kern van een atoom voelt kan goed benaderd worden met een drie-dimensionale doos. De energieën die uit de oplossingen van de Schrödinger-vergelijking volgen zijn dan

$$E_{n_x, n_y, n_z} = \frac{h^2}{8mL^2} [n_x^2 + n_y^2 + n_z^2],$$

waarbij L de afmeting van de kern is, m de massa van het proton of neutron, en $n_x, n_y, n_z = 1, 2, 3, \dots$

(a). Bereken het verschil in energie van de grondtoestand en de eerste aangeslagen toestand als $L = 10^{-15}$ m en $m = 1.67 \cdot 10^{-27}$ kg. Waarom is dit zoveel groter dan de excitatie-energie voor elektronen in een atoom (in de orde van 1 eV)?

(b). Geef de ontaarding van de niveaus met een energie lager dan $10h^2/(8mL^2)$.

Kernen van atomen stoten elkaar af (Coulomb-repulsie). Het probleem van kernfusie is het overkomen van die afstoting, opdat kernen kunnen botsen en fuseren. In een vorm van koude kernfusie die echt werkt worden de elektronen die de kernen omringen vervangen door muonen. Muonen hebben dezelfde negatieve lading als een elektron, maar zijn 207 keer zo zwaar.

(c). Hoe verhoudt zich de straal van een normaal waterstofatoom met die van een waterstofatoom waarbij het elektron is vervangen door een muon? Hoe verhouden zich de energieën? Waarom denk je dat muonen kernfusie bevorderen? (Je mag aannemen dat de Born-Oppenheimer-benadering geldt. Je mag uitgaan van de Schrödinger-vergelijking of het model van Bohr.)

(d). Een positron is het antideeltje van het elektron. Dat wil zeggen het heeft dezelfde eigenschappen, behalve dat de lading tegengesteld is. Als een deeltje en zijn antideeltje op elkaar botsen, vernietigen ze elkaar. Als je in een normaal waterstofatoom het proton vervangt door een positron, krijg je positronium. Waarom is positronium niet stabiel in een s -orbital, maar wel in een andere orbital (p, d, f , enz.)?

Opgave 3:

Alle onderdelen van deze opgave gaan over een atoom/ion van hetzelfde element.

(a). Alle elektronen op één na van het atoom worden verwijderd. Dit ene elektron zit in een $1s$ -orbital. Het kost 666.4 eV om het laatste elektron te verwijderen. Laat zien dat dit betekent dat het element stikstof is.

(b). We definiëren de straal van het ion uit (a) als de elektron-kern afstand waarvoor de radiële distributiefunctie een maximum heeft. Hoe groot is die straal?

(c). Bereken de golflengte en de frequentie van het licht dat uitgezonden wordt als het elektron in het ion van onderdeel (a) een overgang van $n = 3$ naar $n = 1$ maakt.

(d). Wat is de elektronenconfiguratie van het neutrale atoom.

(e). In het neutrale atoom heeft de $1s$ -orbital een energie van -416.16 eV. Wat is de screeningsconstante (=shieldsconstante)?

(f). Geef de Slater-determinant voor N^{4+} .

Opgave 4:

Deze opgave gaat over nitrobenzeen $C_6H_5 - NO_2$.

- (a). Geef de meest waarschijnlijke Lewis-structuur/structuren. Geef ook de formele ladingen van de atomen.
- (b). Nitrobenzeen is een vlak molecuul en het heeft een spiegelvlak dat loodrecht op het vlak van het molecuul staat en dat door twee koolstof- en het stikstofatoom gaat. Geef de hybridisatie op elk atoom (afgezien van de waterstofatomen), en geef een verklaring waarom het molecuul vlak is.
- (c). Hoeveel valentie-elektronen vormen de σ -bindingen, hoeveel het π -systeem, en hoeveel zitten er in de lone-pair-orbitals?

Opgave 5:

- (a). De binding in LiH wordt voornamelijk gevormd uit de $1s$ -orbital van H and de $2s$ -orbital van Li. Stel de seculiere vergelijking op en bepaal de bindende MO. Er is gegeven (in atomaire eenheden)

$$\begin{aligned}\langle 1s_{\text{H}} | 1s_{\text{H}} \rangle &= \langle 2s_{\text{Li}} | 2s_{\text{Li}} \rangle = 1 \\ \langle 1s_{\text{H}} | 2s_{\text{Li}} \rangle &= \langle 2s_{\text{Li}} | 1s_{\text{H}} \rangle = 0.4 \\ \langle 1s_{\text{H}} | F | 1s_{\text{H}} \rangle &= -0.2 \\ \langle 2s_{\text{Li}} | F | 2s_{\text{Li}} \rangle &= -0.3 \\ \langle 1s_{\text{H}} | F | 2s_{\text{Li}} \rangle &= \langle 2s_{\text{Li}} | F | 1s_{\text{H}} \rangle = -0.3\end{aligned}$$

Je hoeft de MO niet te normeren.

- (b). Een precieze berekening levert de volgende volledig bezette en genormeerde valentie-orbitals.

$$\begin{aligned}0.0393 \cdot 1s_{\text{H}} + 0.9876 \cdot 1s_{\text{Li}} + 0.1515 \cdot 2s_{\text{Li}} + 0.0080 \cdot 2p_{z\text{Li}} \\ 0.7015 \cdot 1s_{\text{H}} - 0.1041 \cdot 1s_{\text{Li}} + 0.5215 \cdot 2s_{\text{Li}} - 0.4747 \cdot 2p_{z\text{Li}}\end{aligned}$$

Bereken de (partiële) ladingen van Li en H. Je mag de overlap tussen de atomaire orbitals verwaarlozen.