

HERTENTAMEN
CHEMISCHE BINDING EN PERIODIEKE SYSTEEM (6H020)
16-08-2002, 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 3e	4 punten voor ieder onderdeel
vraag 4a en 4b	6 punten voor ieder onderdeel
vraag 4c	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 toont het Davisson-Germer experiment aan?
- (b). Geef een voorbeeld van kwantisatie van golven dat begrijpelijk is voor je familie.
- (c). Wat is een knoopvlak van een orbital?
- (d). Wat is het verschil tussen het Pauli-principe en het Pauli-uitsluitingsprincipe?
- (e). Waarom neemt de straal van de atomen af als je in het periodieke systeem van links naar rechts in een periode gaat?
- (f). Waarvoor gebruik je het variatieprincipe?
- (g). Wat is een octet?
- (h). Wat is de relatie tussen de stabilisatie van een bindende orbital en het verschil in energie van de orbitals die de bindende orbitals vormen?
- (i). Wat is een MO-diagram?
- (j). Wat is delocalisatie?

Opgave 2:

De notatie $\text{Ne}@C_{60}$ duidt een neonatoom in een buckybal aan. Deze opgave gaat over de beweging van het neonatoom.

- (a). De kracht F die op het neonatoom uitgeoefend wordt kan geschreven worden als $F = fr$, waarbij r de afstand is tussen het neonatoom en het middelpunt van de buckybal en f is een krachtsconstante. Volgens de klassieke mechanica is een mogelijke baan van het neonatoom een cirkel met als centrum het middelpunt van de buckybal. De kracht op het

neonatoom is dan gelijk aan de middelpuntszoekende kracht: oftewel $mv^2/r = fr$ met m de massa en v de snelheid van het neonatoom. Volgens Bohr moet het hoekmoment gekwantiseerd zijn: d.w.z, $mvr = n\hbar$ met n een positief geheel getal. Laat zien dat volgens Bohr dan de energie van het neonatoom $E = mv^2/2 + fr^2/2$ gelijk aan $n\hbar\omega$ moet zijn met $\omega = \sqrt{f/m}$.

- (b). De massa van het neonatoom is $m = 3.33 \cdot 10^{-26}$ kg. De overgang van $n = 1$ naar $n = 2$ is zichtbaar in het verre infrarood. De krachtsconstante is $f = 47.3$ N/m. Wat is het golfgetal $1/\lambda$ in cm^{-1} ?
- (c). De Schrödinger-vergelijking voor de beweging van het neonatoom kan ook opgelost worden. (Het probleem is dat van een drie-dimensionale harmonische oscillator.) De oplossingen worden gekenmerkt door drie kwantumgetallen n , l , en m . Deze kwantumgetallen hebben dezelfde interpretatie als die voor het elektron in een waterstofatoom, maar de combinaties van waarden die ze kunnen aannemen zijn anders. Voor de energie vind je

$$E_{n,l,m} = \hbar\omega \left[n + \frac{3}{2} \right],$$

waarbij nu $n = 0, 1, 2, \dots$. Wat is de nulpuntsenergie en waarom vind je in de kwantummechanica die energie?

- (d). Voor de andere kwantumgetallen moet gelden $l = n, n - 2, n - 4, \dots$ met $l \geq 0$ en $m = -l, -l + 1, -l + 2, \dots, l - 1, l$. Geef de ontaarding van alle oplossingen van de Schrödinger-vergelijking met een energie kleiner dan $4\hbar\omega$.

Opgave 3:

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

- (a). Alle elektronen op twee na van het atoom worden verwijderd. Die twee elektronen zitten in de $1s$ -orbital. De energie van die orbital is -739.4 eV. De screeningsconstante (=shieldingsconstante) σ is gelijk aan 0.627 . Laat zien dat dit betekent dat het element zuurstof is.
- (b). De energie van O^{6+} is gelijk aan -1608.3 eV. Hoeveel energie kost het om het voorlaatste elektron te verwijderen. (Je mag er niet vanuit gaan dat het Koopmans-theorema geldt. Bereken daarom de energie van O^{7+} .)
- (c). We definiëren de straal van O^{7+} als de elektron-kern afstand waarvoor de radiële distributiefunctie een maximum heeft. Hoe groot is de straal van O^{7+} ?
- (d). Wat is de elektronenconfiguratie van het neutrale atoom.
- (e). Geef de Slater-determinant voor O^+ .

Opgave 4:

- (a). Geef de meest waarschijnlijke Lewis-structuur van cyclisch $\text{C}_4\text{H}_5\text{N}$. (De ring wordt gevormd door de vier koolstof- en het stikstofatoom. Aan ieder van die atomen zit één waterstofatoom.) Geef ook een Lewis-structuur waarbij het stikstofatoom een formele lading van $+1$ heeft.

- (b). $(\text{C}_5\text{H}_5)^-$ is een vlak molecuul en de koolstofatomen vormen een regelmatige vijfhoek. Teken het MO-diagram van het π -systeem. Is het molecuul stabiel? Waarom wel, of waarom niet?
- (c). Geef de hybridisatie op elk koolstof- en het stikstofatoom in $\text{CH}_3 - \text{CH} = \text{CH} - \text{CH} = \text{NH}$. Waarom liggen alle atomen, behalve de waterstofatomen van de CH_3 -groep, in één vlak?

Opgave 5:

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

$$\begin{aligned}\langle 1s|1s\rangle &= \langle 2p_z|2p_z\rangle = 1 \\ \langle 1s|2p_z\rangle &= \langle 2p_z|1s\rangle = -0.3 \\ \langle 1s|F|1s\rangle &= -0.5 \\ \langle 2p_z|F|2p_z\rangle &= -0.3 \\ \langle 1s|F|2p_z\rangle &= \langle 2p_z|F|1s\rangle = 0.6\end{aligned}$$

Je hoeft de MO niet te normeren.

- (b). Een preciezere berekening levert de volgende volledig bezette en genormeerde valentieorbitals.

$$\begin{aligned}0.3681 \cdot 1s + 0.9259 \cdot 2s - 0.0853 \cdot 2p_z \\ 0.5444 \cdot 1s - 0.2842 \cdot 2s - 0.7892 \cdot 2p_z \\ 2p_x \\ 2p_y\end{aligned}$$

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