

Tentamen Spectroscopie en Kwantumchemie – MLS

Maandag 27 maart, 9:00 – 12:00 uur
David Lloyd Hal3

Lees dit eerst!

Graag op alle papieren die je inlevert je naam en studentnummer vermelden. Geef bij alle antwoorden **een duidelijke toelichting** waarin je aangeeft hoe je tot het antwoord gekomen bent.

Maak de opgaven Spectroscopie en de opgaven Kwantumchemie op aparte vellen!

De opgaven Spectroscopie en Kwantumchemie tellen elk voor de helft mee in het eindcijfer.

Bij enkele opgaven heb je een rekenmachine of geodriehoek nodig. Mocht je die vergeten zijn, dan heeft de surveillant er één beschikbaar. Als je recht hebt op extra tentamentijd, dan kun je tot 12:30 uur doorwerken.

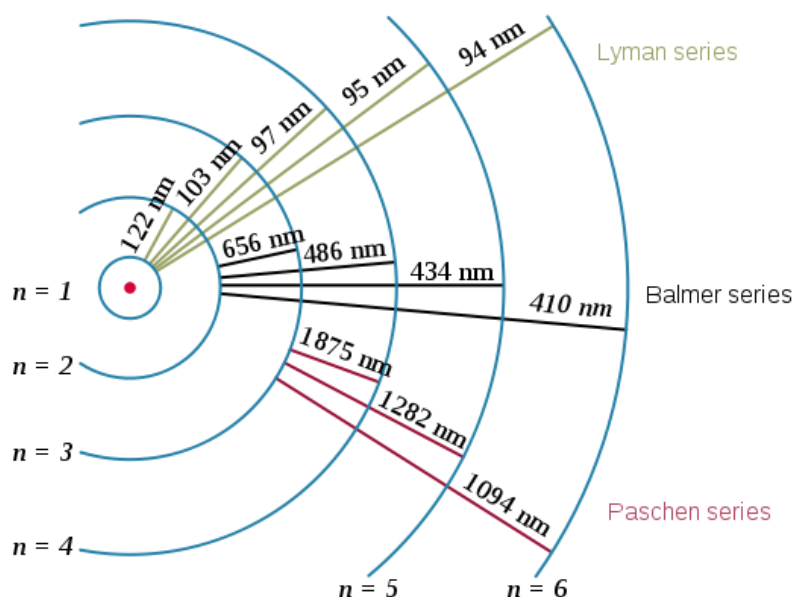
Na afloop mag je de opgaven meenemen. Veel succes!

Opgaven Spectroscopie

Opgave 1

(15)

In de onderstaande figuur zijn voor de Lyman, Balmer en Paschen series de golflengtes gegeven voor diverse overgangen van electronen tussen schillen:



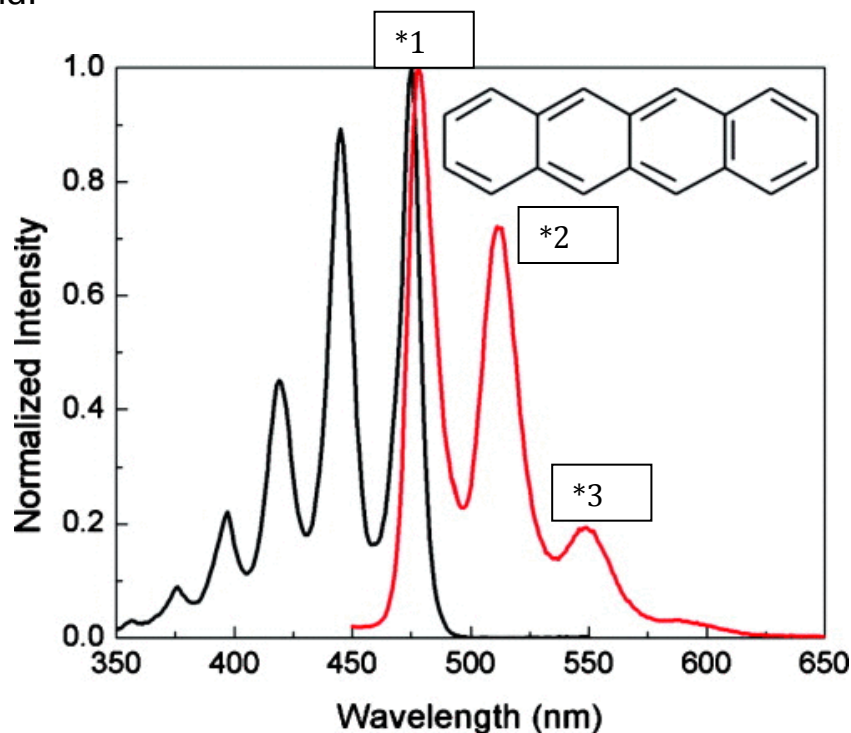
- a) Bereken met behulp van de golflengtes de waarde voor de Rydbergconstante R_H (in cm^{-1})? (5)
- b) Vanuit $n_1 = 4$ zijn ook overgangen naar $n_2=5$ en $n_2=6$ mogelijk. De golflengten hiervan zijn niet gegeven in de figuur. Bepaal voor beide overgangen de golflengte. (5)
- c) He^+ is isoelectronisch met het H-atoom. De Rydbergconstante verschilt. Verklaar het verschil en geef een schatting van de Rydbergconstante voor He^+ . (5)

Aanwijzing: $E(\text{cm}^{-1}) = R_H (1/n_1^2 - 1/n_2^2)$

Opgave 2

(15)

In de onderstaande figuur zijn het absorptie- en emissiespectrum gegeven van het butaceen molecuul dat rechtsboven de spectra is getekend.

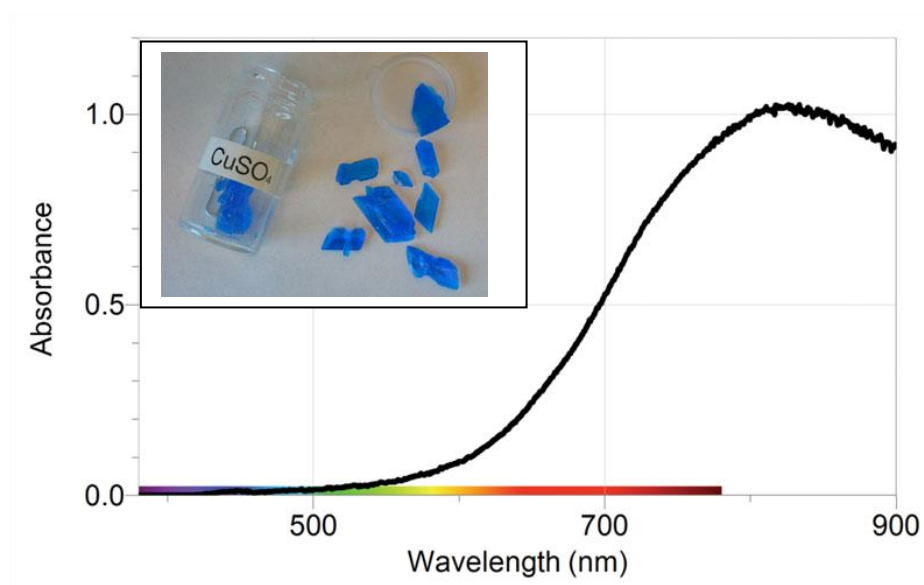


- a) In de absorptie- en emissiespectra is fraaie structuur zichtbaar. Verklaar met het tekenen van een parabolenplaatje de waargenomen structuur en teken daarin ook met pijlen de overgangen die horen bij pieken gelabeld met *1, *2 en *3 in de bovenstaande figuur. (5)
- b) Bepaal, indien mogelijk, de energie van vibraties in i) de grondtoestand en ii) de aangeslagen toestand van het butaceenmolecuul. Laat duidelijk zien hoe u de energie berekent. (5)
- c) Is de emissie (het rode spectrum) fluorescentie of fosforescentie? Motiveer uw antwoord en geef ook een schatting voor de levensduur van de emissie. (5)

Opgave 3

(15)

Een oplossing van kopersulfaat in water is blauw gekleurd door een brede absorptieband met een maximum bij 810 nm. De absorptieband is afkomstig van het Cu^{2+} ($3d^9$) ion.



- a) Beschrijf de overgang die verantwoordelijk is voor de absorptieband (en teken daarbij de elektronenconfiguratie in de grondtoestand en aangeslagen toestand). (5)
- b) Hoe groot is de kristalveldsplitting voor Cu^{2+} in water? (5)
- c) Aan de oplossing wordt geconcentreerd ammonia toegevoegd. Beschrijf welke invloed dit heeft op het absorptiespectrum. (5)

Ga verder met Kwantumchemie op een nieuw blad!

**Tentamen SK-BSPAN Deeltoets-A MLS Kwantum 27
maart 2017 09:00 uur.**

Constanten

Lichtsnelheid:

$$c = 2.99792458 \times 10^8 \text{ m / s}$$

Planck constanten:

$$h = 6.62606957 \times 10^{-34} \text{ Js}$$

$$\hbar = h/2\pi$$

Massa electron:

$$m_e = 9.10938215 \times 10^{-31} \text{ kg}$$

Massa proton:

$$m_p = 1.67262178 \times 10^{-27} \text{ kg} \quad (\text{massa proton})$$

Lading elektron:

$$e = 1.60217662 \times 10^{-19} \text{ C}$$

Permutiviteit vacuum:

$$\epsilon_0 = 8.854187818 \times 10^{-12} \text{ C}^2 \text{ s}^2 / \text{ kg m}^3$$

Formules

De Broglie:

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

De Planck-Einstein:

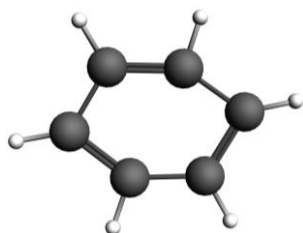
$$E = h\nu$$

Kinetische energie:

$$E_k = \frac{1}{2}mv^2$$

Vraag 1

- Wat is het Heisenberg onzekerheidsprincipe?
- Het waterstof molecuul heeft een ionisatie energie van 2.5×10^{-18} J. We schijnen licht van een golflengte $\lambda = 5.0$ nm en een intensiteit van I op een gas van waterstof molekulen. Hiermee bevrijden we n elektronen uit de molekulen in gas. Bereken de snelheid van deze elektronen.
- Wat verandert er als we de intensiteit van het licht vergroten? Leg uit.
- Je wilt het UV-VIS spectrum van benzeen reproducere. Eerst maak je een schatting van de coördinaten van de nucleï (Figuur 1). Wat moet je doen voordat je de excitatie energieën kunt berekenen? Leg uit.



Figuur 1. Eerste schatting benzeen coördinaten.

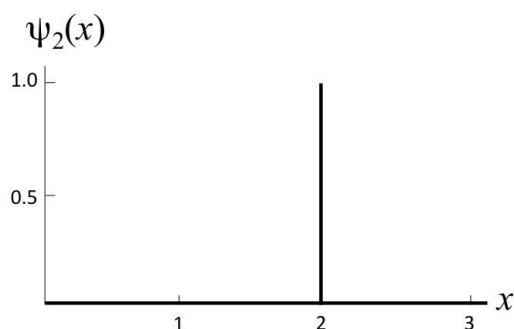
Vraag 2

- Wat is het uitsluitingsprincipe van Pauli?
- Een elektron wordt beschreven door de golffunctie in Vgl. (1).

$$y_1(x) = \begin{cases} 0 & \text{als } x \notin 1 \\ \sqrt{x-1} & \text{als } 1 < x \notin 2 \\ \sqrt{-x+3} & \text{als } 2 < x \notin 3 \\ 0 & \text{als } x > 3 \end{cases} \quad (1)$$

Maak een schematische tekening van deze golffunctie.

- Normaliseer de golffunctie in Vgl. (1).
- Een deeltje wordt beschreven door de 1-dimensionale golffunctie in Figuur 2.



Figuur 2. Een 1-dimensionale golffunctie.

In een zeer nauwkeurig experiment wordt de positie van dit deeltje 10 keer gemeten. Hoeveel verschillende waarden zullen er gevonden worden? Leg uit.

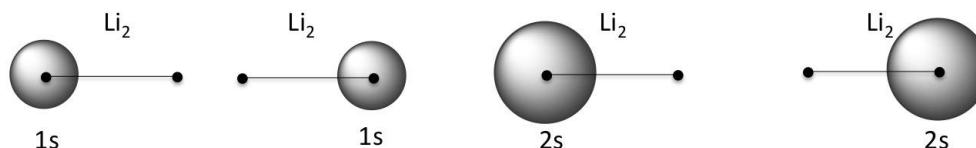
- Welke van de twee golffuncties tot nu toe genoemd (Vgl. (1) en Figuur 2) geeft een betere beschrijving van een macroscopisch (niet kwantum mechanisch) deeltje? Leg uit.
- In Vgl. (2) is een Hamiltoniaan uitgedrukt.

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{d^2}{dx_1^2} - \frac{\hbar^2}{2m_p} \frac{d^2}{dx_2^2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |x_1 - x_2|} \quad (2)$$

Leg de termen van de Hamiltoniaan uit. Wat voor systeem wordt hiermee beschreven?

Vraag 3

- Wanneer je de MOs van een molecuul hebt berekend met de bijbehorende energieën, hoe bereken je dan de totale energie van het molecuul?
- In een Li_2 molecuul zijn er vier belangrijke AOs die bijdragen aan de MOs: 2 x 1s en 2 x 2s (Figuur 3).



Figuur 3. De relevante atomaire orbitalen in een Li_2 molecuul.

Vanwege het energie verschil tussen de 1s en de 2s AOs zullen deze nooit allebei bijdragen aan dezelfde MOs. We kunnen dus naar de situatie kijken als twee gescheiden LCAO interacties: (i) De twee 1s AOs vormen samen 2 MOs. (ii) De twee 2s AOs vormen samen twee andere MOs. Voor welke van die twee interacties zal de energie van de MOs het meest verschillen van die van de desbetreffende AOs? Leg uit.

- Zijn de AOs op het ene Li atoom orthogonaal met de AOs op het andere Li atoom? Hoe weet je dat?
- Schrijf de Hamiltoniaan op die je zou gebruiken om de Schrödinger vergelijking voor Li_2 op te lossen. Houdt hierbij rekening met de benaderingen die gebruikt moeten worden.