



## 1. Vrij deeltje (13)

Voordat de Schrödinger vergelijking bestond had men op basis van verschillende experimenten al relaties tussen golfkarakteristieken (golflengte, frequentie) en deeltjeskarakteristieken (impuls, energie) van een vrij deeltje geponeerd.

- 2 a) Schrijf deze relaties op.
- 2 b) Gebruik deze relatie(s) om de golflengte van een elektron te berekenen nadat het in een elektronenmicroscop met een spanning van 10000 volt is versneld.

In 1933 kreeg Erwin Schrödinger de Nobel prijs voor “zijn” vergelijking.

- 2 c) Schrijf de tijdsafhankelijke Schrödinger vergelijking voor een vrij deeltje met massa  $m$  op.
- 2 d) Schrijf de tijdsonafhankelijke Schrödinger vergelijking voor een vrij deeltje met massa  $m$  op.
- 2 e) Los de vergelijking in d) op.
- 3 f) De oplossing in e) heeft de eigenschap dat de waarschijnlijkheidsdichtheid overal hetzelfde is. Men weet dus niet waar het deeltje is. Is dit in strijd met de onzekerheidsrelatie van Heisenberg ?

## 2. Atomaire toestanden (10)

De 1s-functie van het H-atoom is

$$\psi_{1s} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left( \frac{1}{a_0} \right)^{3/2} e^{-r/a_0}$$

waarin  $r$  de afstand tot de kern is en  $a_0$  (de straal van Bohr) gelijk is aan 52.9 pm.

- 1 a) In welke eenheid wordt  $\psi_{1s}$  uitgedrukt ?
- 1 b) Geef de uitdrukking voor de bijbehorende kansverdeling (waarschijnlijkheidsdichtheid) van het elektron. Waar is deze maximaal?
- 2 c) Geef de uitdrukking voor de **radiale** kansverdeling (radiale waarschijnlijkheidsdichtheid) van het elektron. Waar is deze maximaal?
- 2 d) Geef in één tekening  $\psi_{1s}$  en  $\psi_{2s}$  als functie van  $r$ ; laat de verschillen duidelijk zien.
- 2 e) Als  $E_{1s}$  gelijk is aan -13.6 eV, hoe groot is dan  $E_{2s}$  en welke waarde heeft de ionisatie-energie van het H-atoom in de 2s-toestand?
- 1 f) Geef de ontardingsgraad van de toestand met  $n=4$ .
- 1 g) Geef de ontardingsgraad van de toestand met  $n=4$  en  $l=2$ .

### 3. Elektronenconfiguraties (15)

De eerste ionisatie-energie van de elementen in het periodiek systeem neemt in de eerste periode toe gaande van Li naar Ne.

2 a) Geef hiervoor een verklaring.

Gaande van Be naar B en van N naar O wordt echter een afname gevonden.

2 b) Geef hiervoor een verklaring.

Beschouw de elementen Cu en Zn

4 c) Geef de elektronenconfiguraties van Cu en Zn alsmede van  $\text{Cu}^{2+}$  en  $\text{Zn}^{2+}$ .

Beschouw nu de moleculen HCN en  $\text{HNO}_3$ .

3 d) Geef voor beide moleculen de Lewis-structuur, de formele ladingen op de atomen en de geometrie.

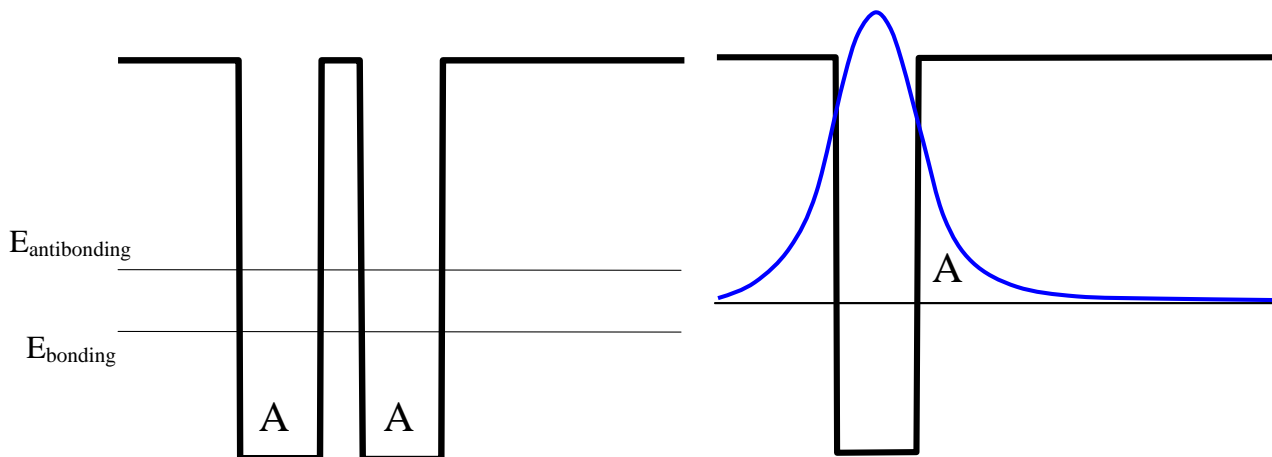
2 e) Geef voor beide moleculen aan voor welke atomen hybridisatie een rol speelt en welke hybridisatie dat is.

In tegenstelling tot de normale vorm van moleculaire zuurstof is de actieve vorm van zuurstof, gewoonlijk 'singulet zuurstof' genoemd, niet paramagnetisch.

2 f) Geef voor beide vormen van  $\text{O}_2$  de elektronenstructuur en de bijbehorende bond order.

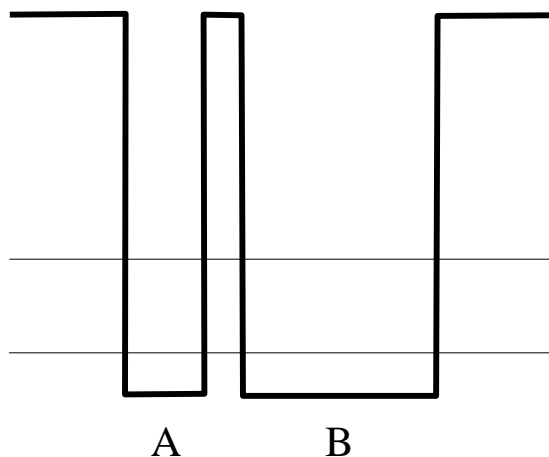
#### 4. Eenvoudig model voor A-A en A-B molecuul-ion (10)

In een molecuul dat uit twee gelijke atomen A bestaat voelt het elektron een symmetrische potentiaal zoals beneden (links onder) getekend. De energieën van de bindende (bonding) en de antibindende (antibonding) toestanden zijn met horizontale lijnen aangegeven.

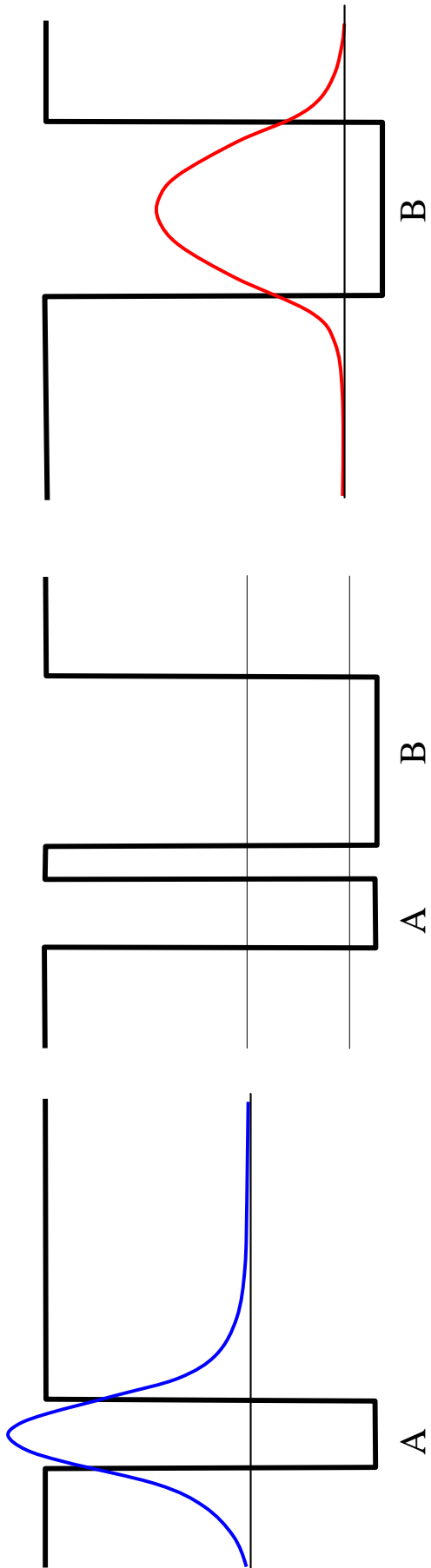


- 4 a) Teken de golffunctie voor de bindende en voor de antibindende toestand wetend dat voor een enkele potentiaalput de golffunctie er uit ziet zoals rechtsboven aangegeven.

In een molecuul dat uit twee verschillende atomen A en B bestaat voelt het elektron een niet-symmetrische potentiaal zoals beneden getekend. De energieën van de bindende (bonding) en de antibindende (antibonding) toestanden zijn met horizontale lijnen aangegeven.



- 6 b) Teken de golffunctie voor de bindende en voor de antibindende toestand wetend dat voor de enkele potentiaalputten A en B de golffuncties er uit zien zoals op de volgende pagina is aangegeven. Voor de gekozen brede potentiaal put is de energie van de eerste aangeslagen toestand nagenoeg gelijk aan die van de grondtoestand in de smalle potentiaal. Leg goed uit hoe jij de golffunctie construeert.



## 5. Analogieën tussen het $H_2^+$ molecuul-ion en een keten van $N$ -protonen (16)

Een  $H_2^+$  molecuul-ion bestaat uit 1 elektron en twee protonen. Als voorbereiding op de beschrijving van vaste stoffen hebben wij 1 elektron in een keten van  $N$ -protonen in het college behandeld. Er zijn analogieën tussen deze twee problemen.

- 2 a) Voor het  $H_2^+$  molecuul-ion is de oplossing van de Schrödinger vergelijking van de vorm  $\Psi(\mathbf{r}) = aL(\mathbf{r}) + bR(\mathbf{r})$  gezocht. Wat zijn  $L(\mathbf{r})$  and  $R(\mathbf{r})$ ? Wat zijn de energieën van de bonding state en de antibonding state in het geval de overlap  $S \cong 0$  en verder de Coulomb integraal gecompenseerd wordt door de proton-proton afstoting?
- 2 b) Voor de keten van  $N$ -protonen is de oplossing van de Schrödinger vergelijking  $\psi_k = \sum_n e^{ikna} \phi(x-na)$ . Wat is de bijbehorende energie  $\varepsilon_k$ ?
- 2 c) Voor welke  $k$ -waarde is de energie  $\varepsilon_k$  het laagst (meest bindende toestand). Teken de waarschijnlijkheidsdichtheid voor deze toestand. Vergeleken met het probleem van het  $H_2^+$  molecuul-ion is er een factor 2 extra in de uitdrukking voor  $\varepsilon_k$ . Waar komt deze factor 2 vandaan?
- 1 d) Voor welke  $k$ -waarde is de energie  $\varepsilon_k$  het hoogst (meest antibindende toestand). Teken de waarschijnlijkheidsdichtheid voor deze toestand.
- 4 e) Teken  $\varepsilon_k$  voor het geval de exchange (resonantie) integraal 1 eV is en de keten (gevouwen in een cirkel) 10 protonen bevat. De onderlinge afstand tussen protonen is 0.314 nm. Hoeveel  $k$ -waardes zijn mogelijk? Waarom is niet elke  $k$ -waarde toelaatbaar?
- 3 f) Neem nu aan dat de keten uit atomen bestaat met 3 valentie elektronen per atoom. De bandenstructuur is zoals beneden aangegeven. Waar ligt de Fermi energie? Is deze stof een metaal?
- 2 g) Bepaal de snelheid van een elektron met een energie gelijk aan de Fermi energie van vraag f) uit de bijstaande grafiek.

