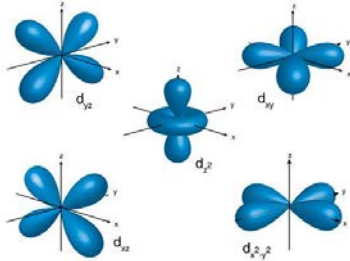


- 1a) $l = 0$
 b) $\Delta l = 1$
 c) $[\text{Ne}] 3s^2 3p^5$

2a) Juist. $[\text{He}] 2s^2 2p^3$, alle 3 elektronen in p ongepaard (Hund's maximum multiplicity rule)
 b) Onjuist.

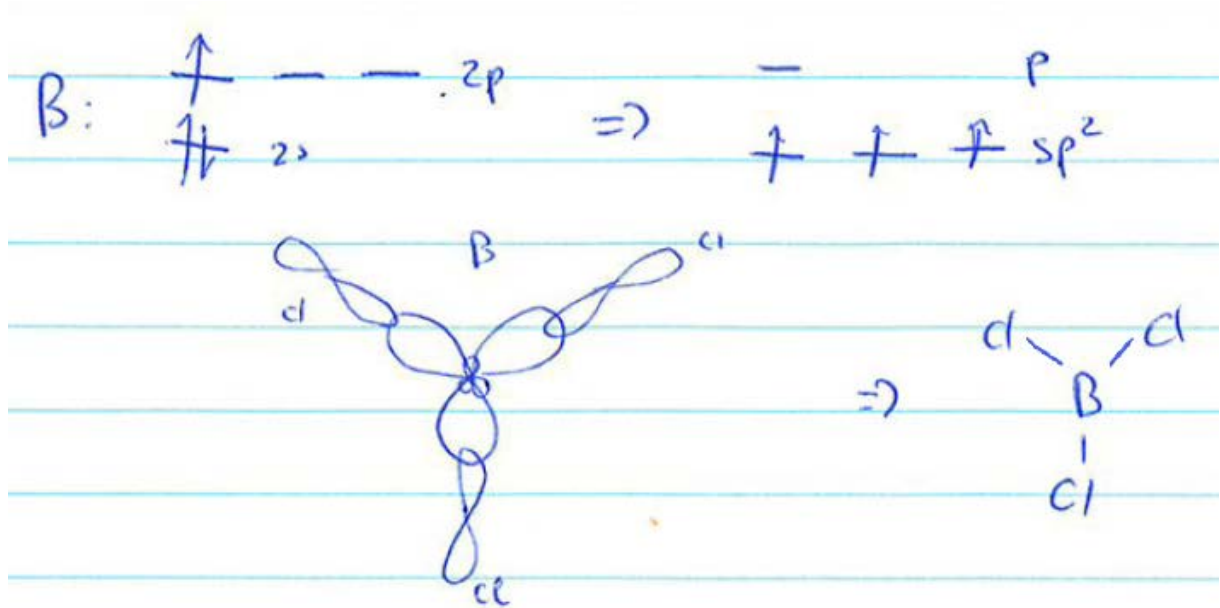


- c) Onjuist. 2s heeft een lagere energie
 d) Onjuist. Door hogere lading zou het juist **moeilijker** moeten zijn om elektron te ioniseren. De reden dat de 3s makkelijker te ioniseren is, is omdat hij is afgeschermd voor de nucleus door de volle L-schil.

3a) B: $[\text{He}] 2s^2 2p^1$ Cl: $[\text{Ne}] 3s^2 3p^5$

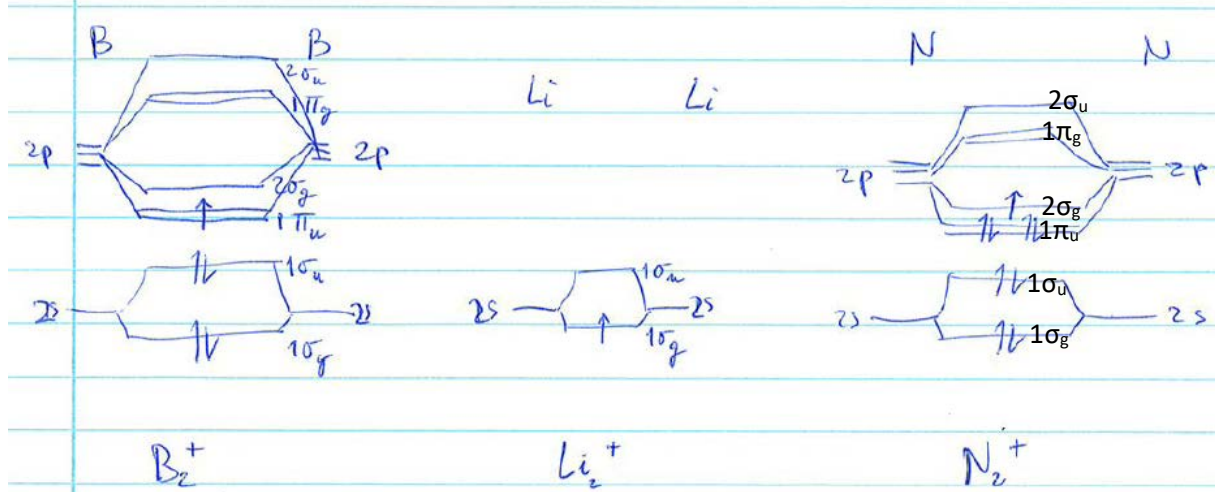
b) sp^2 hybridisatie. Dan liggen alle atomen zo ver mogelijk van elkaar (minimale afstoting) en zijn alle Coulomb krachten in balans (omdat alle bindingshoeken gelijk zijn: 120 graden)

c)



- d) allemaal sigma
 e) bindingen zijn polair (door verschil in elektronegativiteit tussen verschillende elementen), maar door symmetrische vorm heffen alle polaire bindingen elkaar op in het molecuul. Het molecuul is dus niet polair

4a) B: [He] 2s² 2p¹, Li: [He] 2s¹, N: [He] 2s² 2p³



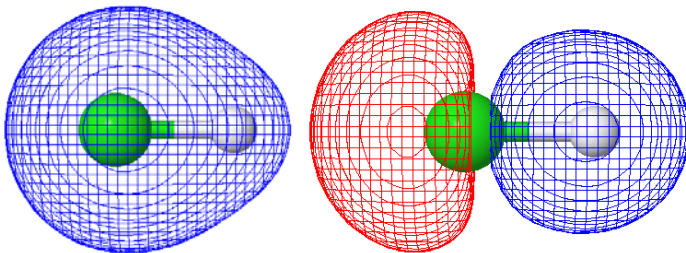
b) Bij B₂ zal het extra elektron in een bonding orbitaal komen: neemt toe

Bij Li₂ zou het in een bonding orbitaal komen: neemt toe

Bij N₂ zou het in een bonding orbitaal komen: neemt toe

c) Bond order N₂ is 3, bond order B₂ is 1. Daarom dissociatie energie N₂ hoger.

5 a)



b) Massa's uit periodiek systeem aflezen.

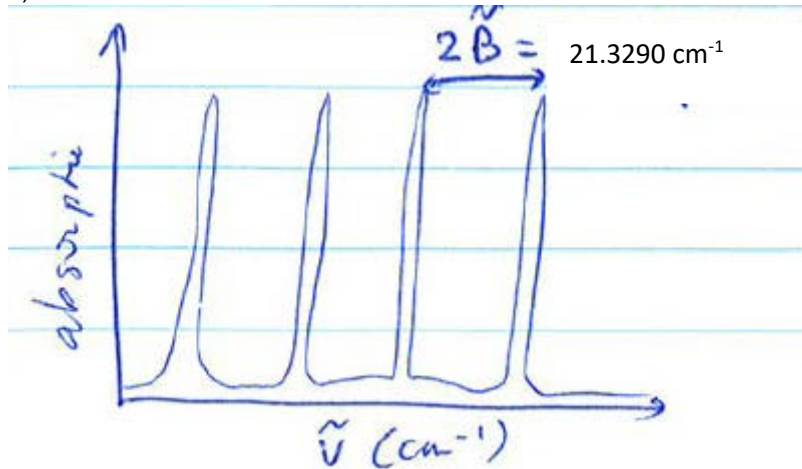
$$\mu = \frac{1,00794 \cdot 35,4527}{1,00794 + 35,4527} = 0,980076 \text{ u.}$$

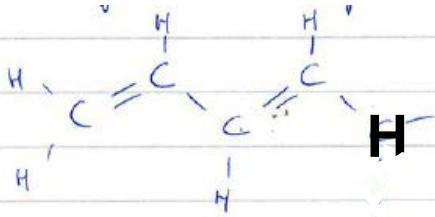
$$0,980076 \cdot 1,660 \cdot 10^{-27} \text{ kg} = 1,62693 \cdot 10^{-27} \text{ kg.}$$

$$I = \mu R^2 = 1,62693 \cdot 10^{-27} \cdot (0,127 \cdot 10^{-9})^2 \text{ kg m}^2 = 2,6241 \cdot 10^{-47} \text{ kg m}^2$$

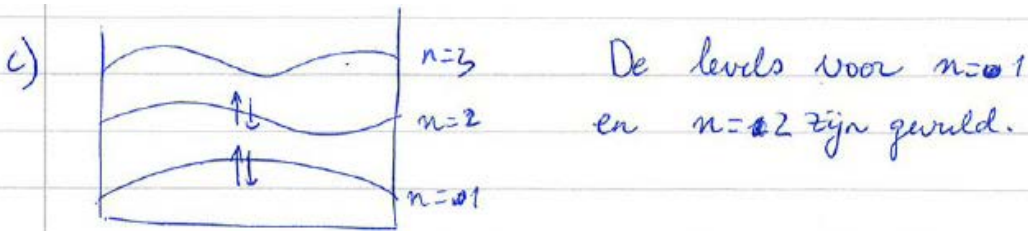
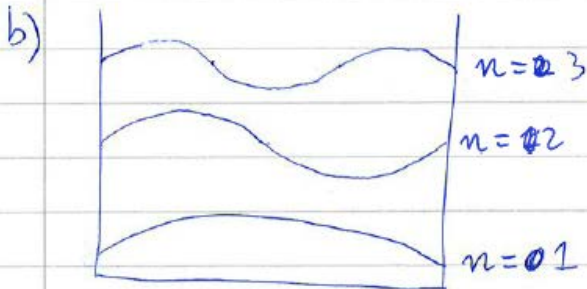
$$\tilde{B} = \frac{h}{4\pi c I_B} = \frac{1,055 \cdot 10^{-34}}{4\pi \cdot 3,00 \cdot 10^{10} \frac{\text{cm}}{\text{s}} \cdot 2,6241 \cdot 10^{-47}} = 10,665 \text{ cm}^{-1}$$

c)





De C's hebben sp^2 hybridisatie, dus elke C heeft 1 p-orbitaal "over" waar elk 1 elektron in zit, oftewel 4 gedelocaliseerde π -elektronen



d) ~~EF~~ Highest Occupied Molecular Orbital = $n=2$
 Lowest Unoccupied Molecular Orbital = $n=3$

$$\Delta E_{\text{HOMO, LUMO}} = E_3 - E_2$$

Voor particle in a box: $E_n = \frac{n^2 h^2}{8m_e L^2}$

$$E_3 - E_2 = \frac{3^2 h^2}{8m_e L^2} - \frac{2^2 h^2}{8m_e L^2} = 5 \left(\frac{h^2}{8m_e L^2} \right)$$

Voor $L = 560 \text{ pm}$ levert $1,921 \cdot 10^{-19} \text{ J} = 5,995 \text{ eV} = 206,8 \text{ nm}$: ultraviolet (niet zichtbaar).

7

a) $\widetilde{\nu}_0 = 0,3169 \text{ eV} = 2556 \text{ cm}^{-1}$ (dit moet je echt zelf kunnen omrekenen!)

$$b) \widetilde{\nu}_0 = \frac{1}{2\pi c} \sqrt{\frac{k_f}{m_{eff}}}$$

$$k_f = 4\pi^2 c^2 m_{eff} \widetilde{\nu}_0^2.$$

$$m_{eff} = \frac{1,00794 \cdot 79,504}{1,00794 + 79,504} \text{ u} = 0,99532 \text{ u} = 1,65277 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$$

$$k_f = 4\pi^2 (3,00 \cdot 10^8)^2 \cdot 1,65277 \cdot 10^{-27} \cdot (2,556 \cdot 10^5)^2.$$

$$k_f = 383,65 \text{ N/m}$$

c) Zie formule energieniveaus, voor $J=0, 1, 2$ etc zijn de energieniveaus $2\tilde{B}, 6\tilde{B}, 12\tilde{B}$, etc.

Met $\Delta J = \pm 1$ zijn de afstanden tussen de absorptielijnen dus altijd $2\tilde{B}$.

Dit is gegeven in opdracht: $2\tilde{B} = 0,0014 \text{ eV}$ dus $\tilde{B} = 0,00070 \text{ eV}$ ($= 5,65 \text{ cm}^{-1}$)

$$d) \tilde{B} = \frac{\hbar}{4\pi c I_b} \text{ dus } I_b = \frac{\hbar}{4\pi c \tilde{B}} = \frac{1,055 \cdot 10^{-34}}{4\pi \cdot 3,00 \cdot 10^{10} \cdot 5,65} = 4,956 \cdot 10^{-47} \text{ kg m}^2$$

$$I = \mu R^2$$

met $\mu = 1,65277 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$ (zie vraag b) levert $R = \sqrt{(4,956 \cdot 10^{-47} / 1,65277 \cdot 10^{-27})} \text{ m} = 0,173 \text{ nm}$

8a) Onjuist. Er mag juist geen discontinuïteit in de golf functie zijn. Om de discontinuïteit te voorkomen moet een randconditie geïntroduceerd worden, waardoor de rotatie energieën zijn gekwantiseerd

b) juist

c) Juist. Voor $M_J = 0, \pm 1, \pm J$. Dus voor $J=3$ 7 mogelijkheden voor M_J

9a) Juist. De hot band is de $v=1$ naar $v=2$ overgang. Door de anharmonische correctie, is de separatie van vibratie energieën steeds kleiner als je naar hogere energieën gaat. Dus de fundamentele band, veroorzaakt door de $v=0$ naar $v=1$ overgang is bij iets hogere energie (en dus golfgetal). De 1st overtone is de $v=0$ naar $v=2$ overgang, dus hoger golfgetal. 2nd overtone nóg hoger golfgetal ($v=0$ naar $v=3$ transitie)

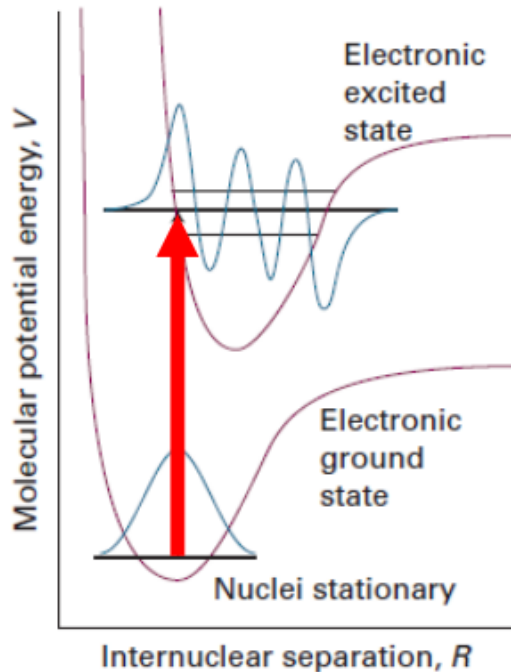
b) Juist. CO_2 heeft namelijk symmetric en asymmetric stretch (dat zijn parallele banden. De symmetric stretch heeft geen veranderend dipool dus geen vibratiespectrum. De asymmetric stretch wel, dus die veroorzaakt een PR bandprofiel (profiel) en een bending mode (dat is een perpendicular band, die een PQR profiel veroorzaakt)

c) onjuist. Wordt veroorzaakt door $J \rightarrow J+1$ transities

Opdracht 10 a

Atomen vibreren niet, en hebben dus ook geen vibratoire overgangen: lijnenspectrum.

Moleculen vibreren wél. In een elektronische overgang, moet bij het aanslaan naar een hogere elektronische toestand rekening worden gehouden met het Franck-Condon principe: in een elektronische transitie bewegen de atomen niet (want ze zijn veel zwaarder dan elektronen) dus in een moleculaire potentiaal curve vindt een verticale transitie omhoog plaats:



Doordat je dan tegen de 'rand' van de hogere elektronische staat zit, móet je daar wel een vibratie toestand aanslaan. Maar, er is overlap met méerdere vibratie toestanden, die allemaal tot absorptie leiden. Hierdoor ontstaat een brede band in plaats van een smalle lijn in het spectrum.

- b) d's hebben dezelfde pariteit, dus verboden transitie. Door een asymmetrische vibratie toch (lichtelijk) toegestaan (vibronic transition)
- c) Nuclei bewegen veel langzamer dan elektronen. Je kunt dus niet tijdens een elektronische transitie over de x-as (wat bondlengte R als eenheid heeft) begeven (Frank-Condon principle)
- d) Dan wordt de selectieregel $\Delta S=0$ geschonden.



- e) CT groot dipool moment dus deze is typisch heel intens.