

## Opgaven week 5 – Fysische Chemie A1 voor Technische Natuurkunde

### Opdracht 1 – Fundamentele frequentie en eerste overtoon

- (a) De fundamentele spectraallijn van het infrarood spectrum van  $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$  ligt bij  $2143,0\text{ cm}^{-1}$ , en de eerste overtoon bij  $4260,0\text{ cm}^{-1}$ . Geef het vibratie golfgetal  $\tilde{\nu}$  en de anharmonische bijdrage  $\chi_e \tilde{\nu}$ .
- (b) Wat verwacht je van de intensiteit van de eerste overtoon bij vraag (a) ten opzichte van de fundamentele spectraallijn? Leg uit!
- (c) Bereken de fundamentele frequentie en de eerste twee overtonen van  $\text{H}^{35}\text{Cl}$ . Gegeven:  $\tilde{\nu} = 2990,946\text{ cm}^{-1}$  en  $\chi_e \tilde{\nu} = 52,819\text{ cm}^{-1}$

### Opdracht 2 – Infrarood actieve moleculen

Welke van de volgende moleculen kunnen een infrarood absorptie spectrum produceren? Leg uit!

- (a)  $\text{CH}_3\text{CH}_3$
- (b)  $\text{CH}_4$
- (c)  $\text{CH}_3\text{Cl}$
- (d)  $\text{N}_2$

### Opdracht 3 – vrijheidsgraden

Bepaal het aantal translatie, rotatie en vibratie vrijheidsgraden voor de volgende moleculen.

- (a) Xe
- (b) HCl
- (c)  $\text{CS}_2$
- (d) Hemoglobine (bestaande uit 9272 atomen).
- (e) Wat zegt het aantal rotatie vrijheidsgraden over het vibratiespectrum van dat molecuul?

### Opdracht 4 – De Boltzmanverdeling

Met een Boltzmanverdeling kan bepaald worden hoeveel moleculen in een bepaalde kwantumtoestand aanwezig zijn. De Boltzmanverdeling voor vibratie toestanden (onder de aanname dat ze allemaal een degeneracy  $g=1$  hebben) is gegeven door:

$$\frac{N_i}{N_0} = e^{\frac{-\Delta E_i}{kT}}$$

Waar  $N_i$  de populatie van de  $i$ -de toestand is,  $\Delta E_i$  het energieverval tussen de grondtoestand  $E_0$  en de  $i$ -de toestand  $E_i$ ,  $T$  de temperatuur en  $k$  de Boltzman constante.

- (a) HCl absorbeert bij  $2885\text{ cm}^{-1}$ . Bereken de populatieverhouding tussen de eerste twee vibratietoestanden  $N_1/N_0$  bij  $T=25^\circ\text{C}$ .
- (b). Stel, er zijn 2 miljoen HCl moleculen in de laagste vibratietoestand ( $N_0 = 2 \cdot 10^6$ ). Hoeveel moleculen zijn er dan thermisch geëxciteerd in de hogere toestand (oftewel: wat is  $N_1$ ) bij  $T=25^\circ\text{C}$ ?

**\*Opdracht 5 – Infrarood spectrum van  $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$  (5 pt).**

Bij lage resolutie is de sterkste absorptieband van het infrarood absorptie spectrum van  $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$  gecentreerd bij  $2143,26\text{ cm}^{-1}$ . Bij hoge resolutie blijkt dit spectrum in twee banden op te splitsen, elk bestaande uit pieken die erg dicht bij elkaar liggen. De scheiding tussen de twee pieken meteen links en rechts van deze splitsing is  $7,655\text{ cm}^{-1}$ . Neem aan dat het molecuul een harmonische oscillator en een rigide rotor is.

- (a) Wat is het fundamentele vibratie golfgetal van het CO molecuul? (1/2 pt)
- (b) Wat is de zero-point energy van dit molecuul in golfgetallen? (1/2 pt)
- (c) wat is de stijfheid (veerconstante)  $k_f$  voor dit molecuul? (1 pt)
- (d) Wat is de rotatieconstante  $\tilde{B}$  voor dit molecuul? (1 pt)
- (e) wat is de C-O bondlengte? (1pt)
- (f) Wat is de internucleaire verplaatsing bij de vibratie van het CO molecuul in de  $v=1$  vibratie toestand, en hoe staat dit in verhouding met de bondlengte gevonden in (e)? (tip: stel de energie van de vibratie gelijk aan de potentiële veerenergie) (1pt)

**Opdracht 6 – Fundamentele vibratie golfgetal  $^1\text{H}^{35}\text{Cl}$  en  $^2\text{H}^{37}\text{Cl}$**

Bereken het procentuele verschil van het fundamentele vibratie golfgetal voor  $^1\text{H}^{35}\text{Cl}$  en  $^2\text{H}^{37}\text{Cl}$ . Neem aan dat de krachtconstante (veerconstante)  $k$  gelijk is voor beide moleculen.

**\*Opdracht 7 – PQR en PR band profiles in  $\text{BeH}_2$  (5 pt)**

- (a) geef de elektronconfiguratie voor Be. Kan dit atoom bindingen aangaan? (0pt)
- (b) gegeven: Be in  $\text{BeH}_2$  is sp-gehybridiseerd. Schets de molecuulorbitalen en voorspel de molecuulstructuur. (0pt)
- (c) (i) heeft dit molecuul rotatie energie staten?  
(ii) produceert dit molecuul een puur rotatie spectrum? (1 pt)
- (d) Hoeveel normal vibration modes kan dit molecuul ondergaan? Benoem ze. (1 pt)
- (e) Verwacht je in het vibratie-rotatie spectrum van dit molecuul een PR band profiel? Zo ja, met welke vibratie(s) is deze geassocieerd? (1pt)
- (f) Leg uit waarom je bij de vibratie die je in (e) hebt genoemd een PR band profiel krijgt (en dus geen PQR band profiel) (1/2 pt)
- (g) Verwacht je in het vibratie-rotatie spectrum van dit molecuul een PQR band profiel? Zo ja, met welke vibratie(s) is deze geassocieerd? (1pt)
- (h) Leg uit waarom je bij de vibratie die je (g) hebt genoemd een PQR band profiel krijgt (en dus geen PR band profiel) (1/2 pt)