Bouwstenen van de Chemie

Schriftelijke tentamen

23-10-2013

9.00 – 12.00 uur

Zaal SP Tentamenzaal USC Sporthal 2

Schrijf duidelijk en vermeld je naam en collegekaartnummer boven aan elk vel papier.

De volgende 6 opgaven dienen gemaakt te worden.

Toegestane hulpmiddelen: het periodiek systeem (uitgereikt), lijst met fysische constanten (uitgereikt) en een rekenmachine.

$$1\ J = 1\ kg\ m^2\ s^{-2}$$

Vakcode CH111026

Docenten: dr S. Ingemann Jørgensen, drs A. C. Newton en dr R. M. Williams

Opgave 1 (Golffunctie) (18 punten)

Een golffunctie, Ψ, kan beschouwd worden als samengesteld uit een radiële functie en een hoekafhankelijke functie:

$$\Psi(r, \theta, \phi) = R(r)\, Y(\theta, \phi)$$

(r, θ, ϕ zijn de bolcoördinaten; r is de afstand tot de atoomkern)

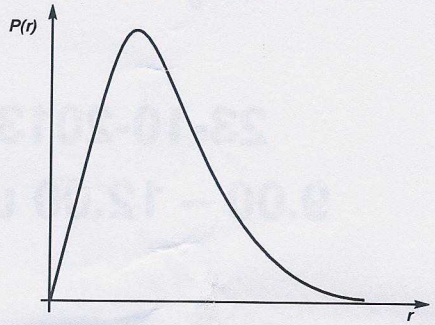
Voor het waterstofatoom is de golffunctie van de $1s$ orbitaal gegeven door (a_o = 53 pm, Bohr radius):

$$\psi(r,\theta,\phi) = R(r) \times Y(\theta,\phi) = 2\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} e^{-Zr/a_0} \times \left(\frac{1}{4\pi}\right)^{1/2}$$

a) (3 pt) De radiale verdelingsfunctie, $P(r)$, is gedefinieerd als:

$$P(r) = r^2 R^2(r)$$

Hieronder is een tekening van de $P(r)$ functie voor het waterstofatoom in de grondtoestand. Omschrijf in eigen worden de betekenis van de $P(r)$ functie.



b) (4 pt) De afgeleide van $P(r)$ voor het waterstofatoom in de grondtoestand is:

$$\frac{dP}{dr} = \frac{4Z^3}{a_0^3}(2r - \frac{2Zr^2}{a_0})e^{-2Zr/a_0}$$

Laat nu zien dat de meest waarschijnlijke afstand, r^*, van het elektron in de grondtoestand van het waterstofatoom als volgt is:

$$r^* = a_0/Z$$

c) (4 pt) De gemiddelde afstand $\langle r \rangle$ tot de atoomkern van het elektron in de grondtoestand van het waterstofatoom is als volgt:

$$\langle r \rangle = \frac{3a_0}{2Z}$$

Geef in de tekening van de $P(r)$ functie de waarden van r^* en $\langle r \rangle$ aan; licht het verschil toe.

e) (4 pt) Voor het waterstofatoom is de golffunctie van de $2s$ orbitaal gegeven door:

$$\psi(r,\theta,\phi) = \frac{1}{2\sqrt{2}}\left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2}\left(2 - \frac{1r}{a_0}\right)e^{-r/2a_0}\frac{1}{2\pi^{1/2}}$$

Geef de uitdrukking van *de* $P(r)$ functie voor het elektron in de $2s$ toestand van het waterstofatoom.

f) (3 pt) Schets in een figuur de $P(r)$ functie voor het elektron in de $2s$ toestand van het waterstofatoom. Vergelijk de tekening met bovenstaande tekening van het elektron in de grondtoestand van het waterstofatoom