

Antwoorden op opgave 1

(a) $2 \times 3 = 6$

(b)

$$\hat{H} = \frac{-\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} kx^2$$

(c) Alleen de eerste term is afhankelijk van de gereduceerde massa μ . k is in eerste orde hetzelfde voor verschillende isotoopsamenstellingen. (Geef aftrek voor "de tweede term is ook afhankelijk van de isotoopsamenstelling", mits dit antwoord is voorzien van geldige uitleg. Bijvoorbeeld (1) elektronische energieën zijn (zeer zwak) afhankelijk van de massa van de kern, zoals blijkt uit het waterstof-model, of (2) k volgt uit een Born–Oppenheimer berekening, die meer afwijkt van de werkelijkheid als de kernen lichter zijn.)

(d) De kansverdeling op bindingsafstand x schaalt met $p(x) = \Psi^*(x)\Psi(x) = e^{-\alpha x^2}$. Dus $\sigma = \frac{1}{\sqrt{2\alpha}}$. Invullen van de parameters in α levert op $\sigma = 3.4$ pm.

(e) Het model van het deeltje op de bol veronderstelt dat de afstand tot de oorsprong (oftewel de bindingsafstand in een molecuul) constant is. In werkelijkheid varieert die met een paar procent door de nulpuntsenergie in de vibratie. Dit zorgt voor een fout in de voorspellingen van het model.

Antwoorden op opgave 2

(a)

$$\hat{H} = \frac{-\hbar^2}{2m} \nabla_1^2 + \frac{-\hbar^2}{2m} \nabla_2^2 + \frac{-3e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1} + \frac{-3e^2}{4\pi\epsilon_0 r_2} + \frac{+e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}},$$

waarbij r_1 de afstand is van elektron 1 tot de kern, r_2 de afstand van elektron 2 tot de kern, en r_{12} de afstand tussen de elektronen.

(b) De laatste term die elektron–elektron repulsie beschrijft

(c) Het 1s-orbitaal is dubbel gevuld, eenmaal met spin naar boven (ψ) en eenmaal met spin naar beneden ($\bar{\psi}$). De golf functie moet anti-symmetrisch zijn:

$$\Psi(1,2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi(1)\bar{\psi}(2) - \bar{\psi}(1)\psi(2)]$$

(d)

$$\frac{d\langle E \rangle}{db} = -\frac{2\hbar^2}{mb^3} + \frac{43e^2}{32\pi\epsilon_0 b^2} = 0$$

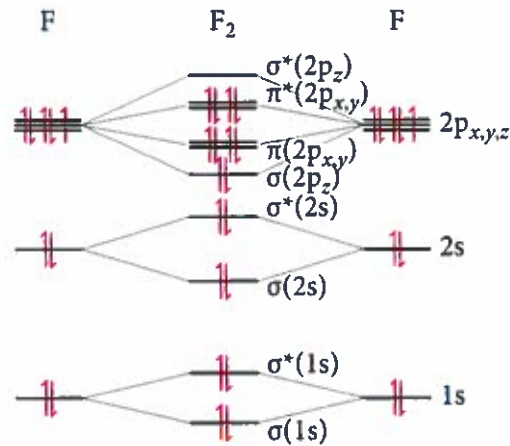
$$b = \frac{64\pi\epsilon_0 \hbar^2}{43e^2 m} = 20 \text{ pm}$$

De bijbehorende energie vinden we deze waarde van b in te vullen in de gegeven uitdrukking: $\langle E \rangle = -3.15 \times 10^{-17} \text{ J} = -197 \text{ eV}$.

- (e) $b < a$ betekent dat het 1s-orbitaal meer samengebond is op de kern in Li^+ dan in neutraal H. Dit is logisch omdat de kernlading $3 \times$ hoger is, dus de 1s-elektronen worden sterker aangetrokken. Daarnaast is er in Li^+ repulsie tussen de twee elektronen, die ontbreekt in H, maar deze is niet voldoende om het effect van de $3 \times$ hogere kernlading te compenseren.

Antwoorden op opgave 3

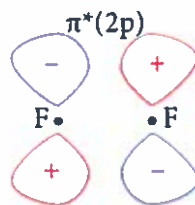
- (a) en (b)



- (c) Het Aufbau-principe en het Pauli-verbod

- (d) Bindingsorde = $5 - 4 = 1$

- (e)



- (f) Het HOMO van Cl_2 is opgebouwd uit 3p-orbitalen, i.p.v. 2p-orbitalen zoals voor F_2 . 3p-orbitalen hebben een radi el knoopvlak. Dit blijft zichtbaar wanneer de AO's worden opgeteld tot MO.

