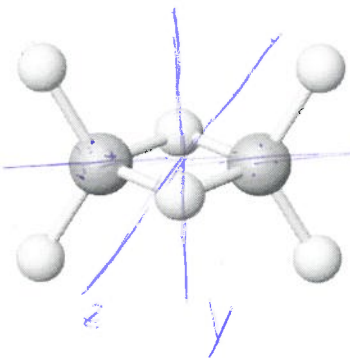


**Eindtoets Voortgezette Chemische Binding en Elektriciteit en Magnetisme (6A7X0)**  
**Vrijdag 11 april 2014, 14.00-17.00 uur**

- **Maak de opgaven voor het deel Chemische Binding (1 t/m 3) en het deel Elektriciteit en Magnetisme (4 t/m 6) op verschillende antwoordvellen.**
- Houd de beantwoording kort en bondig en schrijf duidelijk leesbaar.
- Motiveer steeds je antwoorden.
- Het gebruik van een rekenapparaat is toegestaan.

**Opgave 1. Moleculaire orbitalen**

De figuur hiernaast laat  $B_2H_6$  zien. Dit molecuul heeft  $D_{2h}$  symmetrie. De karaktertabel voor die symmetrie staat hieronder.



Het assenstelsel is zo gekozen dat de x-as parallel aan de lijn door de twee B-atomen ligt, en de y-as parallel aan de lijn door de twee middelste H-atomen. De z-as staat dan loodrecht op het vlak door de twee B-atomen en de twee middelste H-atomen.

*14 0 2 0 0 6 8 2*

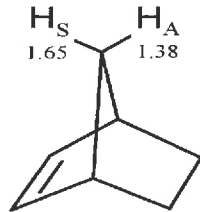
$D_{2h}$	$E$	$C_2(z)$	$C_2(y)$	$C_2(x)$	$i$	$\sigma(xy)$	$\sigma(xz)$	$\sigma(yz)$	$h = 8$	
$A_g$	1	1	1	1	1	1	1	1		$x^2, y^2, z^2$
$B_{1g}$	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	$R_z$	$xy$
$B_{2g}$	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	$R_y$	$xz$
$B_{3g}$	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	$R_x$	$yz$
$A_u$	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1		
$B_{1u}$	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	$z$	
$B_{2u}$	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	$y$	
$B_{3u}$	1	-1	-1	1	-1	1	1	-1	$x$	

Als basis voor de MOs nemen we de  $2s$ -orbitaal en alle  $2p$ -orbitalen van ieder B-aatoom, en de  $1s$ -orbitaal van ieder H-aatoom (14 orbitalen in totaal).

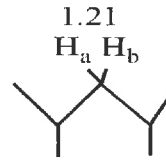
- a. (5 pt) Wat zijn de karakters voor de representatie die verkregen wordt met bovengenoemde basis?
- b. (5 pt) Toon met een duidelijke berekening aan dat bovengenoemde basis resulteert in 4  $A_g$ , 1  $B_{1g}$ , 2  $B_{2g}$ , 2  $B_{1u}$ , 2  $B_{2u}$ , en 3  $B_{3u}$  symmetrieaangepaste lineaire combinaties (SALC's) van atomaire orbitalen (Let op. Je hoeft hier geen SALC's te maken).
- c. (5 pt) Bepaal een MO zonder een seculiere vergelijking op te lossen.
- d. (5 pt) De hoogste bezette orbitaal heeft  $B_{2g}$  symmetrie, de laagste onbezette orbitaal heeft  $B_{1g}$  symmetrie. Wat is de symmetrie van de grondtoestand en wat is de symmetrie van de eerste aangeslagen toestand? Is er een component ( $x$ ,  $y$ , of  $z$ ) van het elektrische veld van elektromagnetische straling die een overgang tussen deze twee toestanden kan veroorzaken? Zo ja, welke component?

### Opgave 3. Kernspinresonantie

De syn- en anti-protonen  $H_S$  and  $H_A$  van de methyleenbrug ( $CH_2$ -brug) in norbornene hebben niet dezelfde chemische verschuiving in het  $^1H$ -NMR spectrum. De  $\delta$ -waarden zijn respectievelijk  $\delta = 1.65$  en  $\delta = 1.38$  ppm.



norbornene

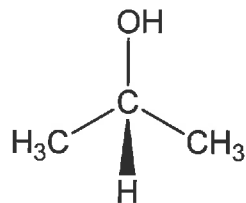


2,4-dimethylpentane

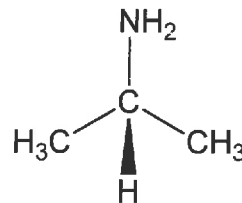
Dit kun je vergelijken met de identieke chemische verschuiving van de methyleenprotonen  $H_a$  en  $H_b$  op C3 positie in 2,4-dimethylpentaan van  $\delta = 1.21$  ppm.

- a. (5 pt) Welk mechanisme veroorzaakt de het verschil in chemische verschuiving tussen  $H_S$  en  $H_A$ , alsook de deschilding van  $H_S$  en  $H_A$  in norboneen in vergelijking met  $H_a$  and  $H_b$  in 2,4-dimethylpentaan?

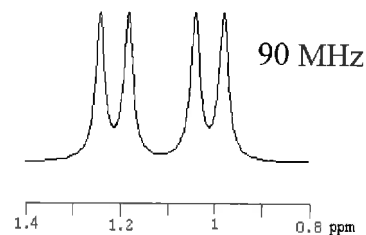
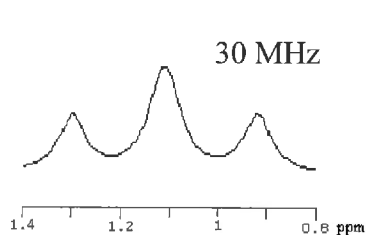
Het deel van het spectrum waar de methylgroepen in het  $^1H$  NMR zichtbaar zijn is hieronder afgebeeld voor een 1:1 mengsel van 2-propanol and 2-propaanamine.



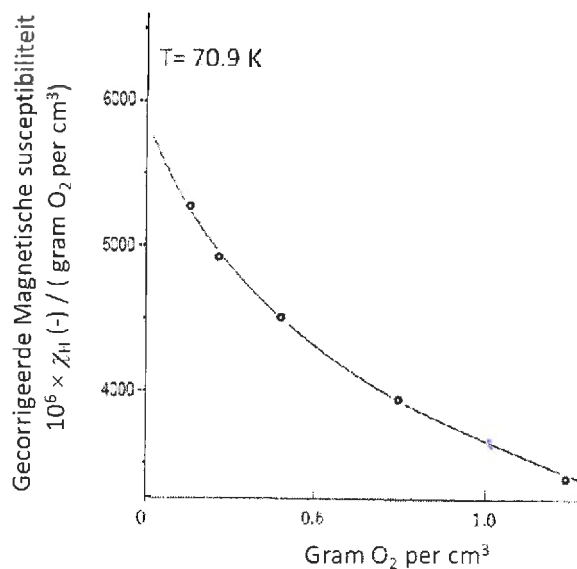
2-propanol



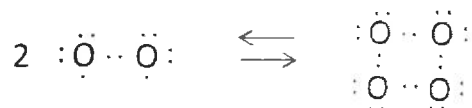
2-propaanamine



- b. (5 pt) Verklaar het verschillend aantal pieken in de beide spectra. Wat is de chemische verschuiving ( $\delta$ -waarde) van de methylsignalen als je aanneemt dat  $OH$  meer elektronegatief is dan  $NH_2$ ? Hoe groot is de scalaire koppeling en van welke protonen is deze afkomstig?



Om te verklaren waarom de gecorrigeerde susceptibiliteit afneemt bij toenemende O<sub>2</sub> concentratie postuleerde Lewis de volgende dimerisatie van O<sub>2</sub> tot O<sub>4</sub>:



- a. (5pt) Is O<sub>2</sub> para- of diamagnetisch? Leg uit waarom de dimerisatie van O<sub>2</sub> tot O<sub>4</sub> zoals voorgesteld door Lewis leidt tot een lagere magnetische susceptibiliteit.

De magnetische susceptibiliteit van O<sub>2</sub> kan berekend worden met

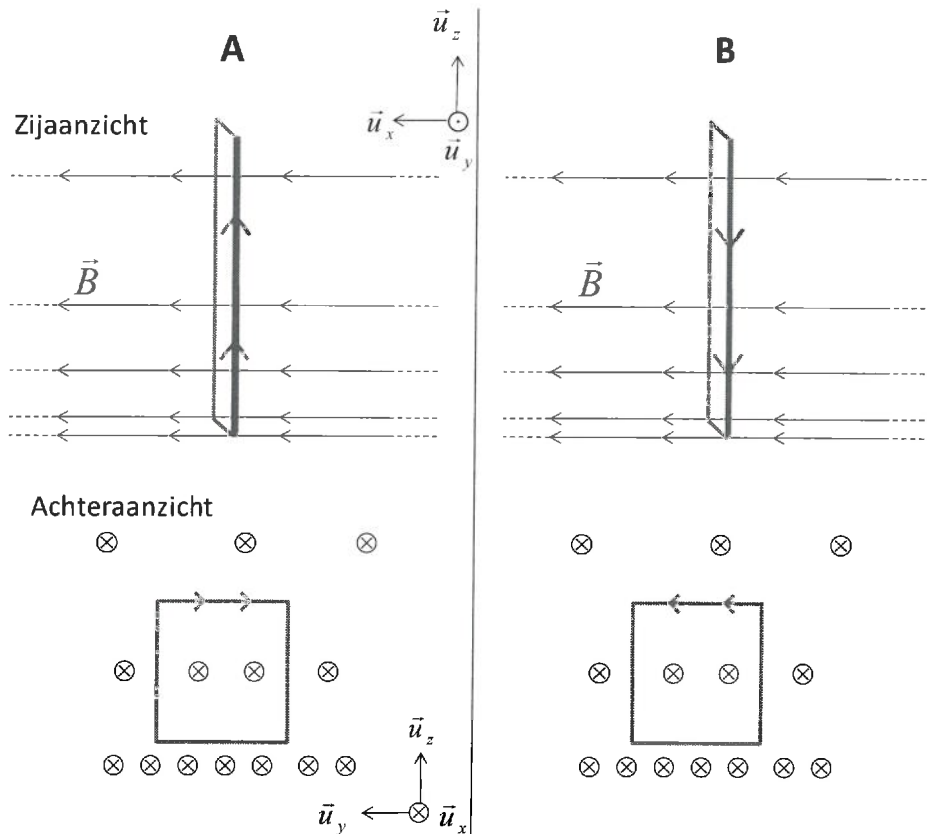
$$\chi_H = \frac{N\mu_0 m^2}{3k_b T} \quad (1)$$

Waarbij  $m$  het magnetische dipoolmoment is en  $N$  het **aantal** magnetische dipolen per volume-eenheid. De dichtheid van vloeibaar O<sub>2</sub> is ongeveer 1.14 g/cm<sup>3</sup>. Het molecuulgewicht van O<sub>2</sub> is 32 g/mol.

- b. (5pt) Maak een schatting van de grootte van het magnetische dipoolmoment van het zuurstofmolecuul op basis van de Lewisstructuur hierboven en druk de grootte van het moment uit in toepasselijke eenheden.
- c. (5pt) Gebruik de relatie (1) om een schatting te maken van de magnetische susceptibiliteit van vloeibaar zuurstof in afwezigheid van dimerisatie. Vergelijk je antwoord met de gecorrigeerde susceptibiliteit van Lewis bij lage O<sub>2</sub> concentratie. Wat concludeer je uit de vergelijking tussen de gemeten en berekende susceptibiliteit ?

- c). (5pt) Leg uit of het ogenschijnlijke gewicht van een **paramagnetisch** monster in de Gouy balans hoger of lager wordt als de stroom door de magneet spoelen wordt verhoogd van nul tot de maximale waarde.

Paramagnetisme kan verklaard worden door magnetische dipolen in een materiaal. Magnetische dipolen bestaan uit een kringstroom. We beschouwen een magnetische dipool bestaande uit een hele kleine vierkante stroomlus. Zie hieronder:



Figuur 6b. Twee mogelijke oriëntaties van een stroomlus in een magnetisch veld  $B$

- d). (5pt) Leg uit welk van de twee oriëntaties van de magnetische dipool, A of B in de tekening hierboven, de meest waarschijnlijke oriëntatie is van de magnetische dipool in het magnetisch veld bij thermisch evenwicht.

Een magneetveld kan weergegeven worden met magnetische veldlijnen.

- e) (5pt). In de figuur 6b hierboven zijn de magneetveldlijnen van de spoelen niet volledig getekend. De stippelijntjes geven aan waar de tekening ophoudt. Beredeneer op basis van de wet van Gauß II voor het magnetische veld hoe de magneetveldlijnen verder moeten lopen. Maak een schets van de veldlijnen met de magneetspoelen van de Gouy balans erbij.

**Einde**