

Studentnaam:

Wierhorst

Studentnummer:

00937424

Voorblad bij tentamen

(in te vullen door de examinator)

Vaknaam: **Voortgezette Chemische Binding en Elektriciteit & Magnetisme** Vakcode: **6A7X0**

Datum: Vrijdag 8 april 2016

Begintijd: 13:30

Eindtijd: 16:30

Aantal pagina's: 7 (inclusief voorblad, exclusief formulebladen)

Aantal vragen: 5

Aantal te behalen punten/normering per vraag: 31 / 19 / 20 / 21 / 9 zoals aangegeven bij elke vraag, totaal: 100

Wijze van vaststellen eindcijfer: Aantal behaalde punten delen door 10

Wijze van beantwoording vragen: formulering, ordening, onderbouwing, multiple choice: Formuleer en/of bereken en onderbouw

Inzage: In overleg met de docenten.

Overige opmerkingen: **Maak de opgaven voor het deel Chemische Binding (1 t/m 2) en het deel Elektriciteit en Magnetisme (3 t/m 5) op verschillende antwoordvellen.** Vermeld de juiste eenheden bij de berekening van fysische grootheden.

Formulebladen worden door docenten ter beschikking gesteld.

Instructies voor studenten en surveillanten**Toegestane hulpmiddelen (mee te nemen door student):**

- Notebook
- Rekenmachine
- Grafische rekenmachine
- Dictaat/boek
- 1 A4-tje met aantekeningen
- Woordenboek(en). Zo ja, welke: Nee

Let op:

- toiletbezoek is alleen onder begeleiding toegestaan
- binnen 15 minuten na aanvang en 15 minuten voor het einde mag de tentamenruimte niet worden verlaten, tenzij anders aangegeven
- er dient altijd tentamenwerk (volledig ingevuld tentamenpapier: naam, studentnummer e.d.) te worden ingeleverd
- tijdens het tentamen dienen de huisregels in acht te worden genomen
- aanwijzingen van examinatoren en surveillanten dienen opgevolgd te worden
- etui ligt niet op tafel
- onderling worden geen hulpmiddelen geleend/uitgewisseld

Tijdens het maken van schriftelijke tentamens wordt onder (poging tot) fraude in ieder geval verstaan:

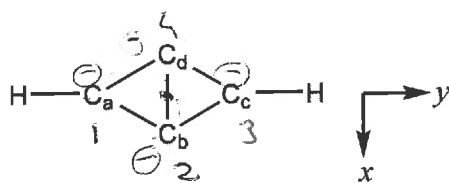
- gebruik van andermans ID-bewijs/campuskaart
- mobiele telefoon of enige andere media dragende devices liggen op tafel of zijn opgeborgen in de kleding
- (poging tot) gebruik van ongeoorloofde bronnen en hulpmiddelen, zoals internet, mobiele telefoon e.d.
- het gebruik van een clicker die niet je eigen clicker is
- ander papier voor handen hebben dan door de TU/e is verstrekt, tenzij anders aangegeven
- toiletbezoek (of naar buiten lopen) zonder toestemming of begeleiding

Eindtoets Voortgezette Chemische Binding en Elektriciteit en Magnetisme (6A7X0)
Vrijdag 8 april 2016, 13.30-16.30 uur

- Maak de opgaven voor het deel Chemische Binding (1 t/m 2) en het deel Elektriciteit en Magnetisme (3 t/m 5) op verschillende antwoordvellen.
- Houd de beantwoording kort en bonding en schrijf duidelijk leesbaar.
- Motiveer steeds je antwoorden.
- Het gebruik van een (grafisch) rekenapparaat is toegestaan.

Opgave 1. Het $C_4H_2^+$ kation (31 punten)

Het $C_4H_2^+$ kation speelt een rol in de vorming van benzeen in de atmosfeer van Titan, de grootste maan van Saturnus. Eén van de mogelijke structuren van dit molecuul is een vlak met een dubbele driering (zie figuur hieronder). We kiezen het molecuul in het x,y -vlak, met de oorsprong van het assenstelsel in het massamiddelpunt van het molecuul; de z -as komt uit het papier naar voren.



De atomaire $2p$ -orbitalen van de koolstofatomen die loodrecht op het vlak van het molecuul staan vormen een π -systeem. Je mag aannemen dat alle AO's genormeerd zijn. Overlap tussen de atomaire orbitalen op verschillende atomen mag verwaarloosd worden. Als φ_n de $2p$ -orbitaal is van koolstofatoom n dat loodrecht op het x,y -vlak van het molecuul staat, dan geldt voor de Fock-matrix elementen in de Hückel benadering:

$$\int \varphi_n(\vec{r}) f \varphi_n(\vec{r}) d\vec{r} = \alpha \quad \text{als } n = m,$$

$$\int \varphi_n(\vec{r}) f \varphi_m(\vec{r}) d\vec{r} = \beta \quad \text{als } n \neq m, \text{ en als } n \text{ en } m \text{ buren zijn.}$$

en in alle andere gevallen is de integraal 0.

- (5 ptn) Stel de seculiere determinant op voor dit molecuul zonder gebruik van symmetrie en bepaal het aantal π -elektronen (voor het neutrale molecuul).
- (3 ptn) Tot welke puntgroep behoort dit molecuul?

De karaktertabel van betreffende puntgroep staat hieronder afgebeeld.

$12 + 2 - 6 = 2$

	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	

- c. (7 ptn) Als basis voor de MOs nemen we weer de atomaire $2p$ -orbitalen van de koolstofatomen a t/m d die loodrecht op het vlak van het molecuul staan. Toon met behulp van een duidelijke berekening aan dat de representatie van de symmetrie aangepaste lineaire combinaties (SALCs) van atomaire functies φ_a t/m φ_d voldoet aan: $\Gamma = B_{2g} + B_{3g} + 2B_{1u}$
- d. (8 ptn) Laat nu met een berekening zien dat dit na normalisatie leidt tot de onderstaande vier symmetrie-aangepaste lineaire combinaties. Geef aan tot welke irrep elk van de vier symmetrie-aangepaste lineaire combinaties ψ_1 t/m ψ_4 behoren.

$$\psi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}(\varphi_a - \varphi_c)$$

$$\psi_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}(\varphi_b - \varphi_d)$$

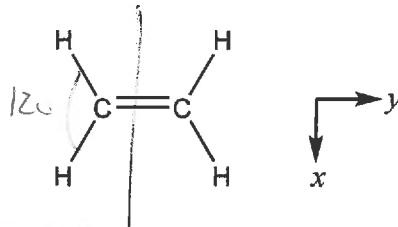
$$\psi_3 = \frac{1}{\sqrt{2}}(\varphi_a + \varphi_c)$$

$$\psi_4 = \frac{1}{\sqrt{2}}(\varphi_b + \varphi_d)$$

- e. (3 ptn) Bereken de energieniveaus van ψ_1 en ψ_2 uitgedrukt in α en β .
- f. (5 ptn) Bepaal de energieniveaus, uitgedrukt in α en β , van de moleculaire orbitalen die je krijgt door het oplossen van de seculiere determinant in een basis van ψ_3 en ψ_4 . Maak nu ook een MO-diagram met daarin de elektronenbezetting voor de grondtoestand van het neutrale molecuul.

Opgave 2. Vibraties van etheen (19 punten)

De molecuulstructuur van etheen staat hieronder afgebeeld. We kiezen het molecuul in het x,y -vlak, met de oorsprong van het assenstelsel in het massamiddelpunt van het molecuul; de z -as komt uit het papier naar voren.

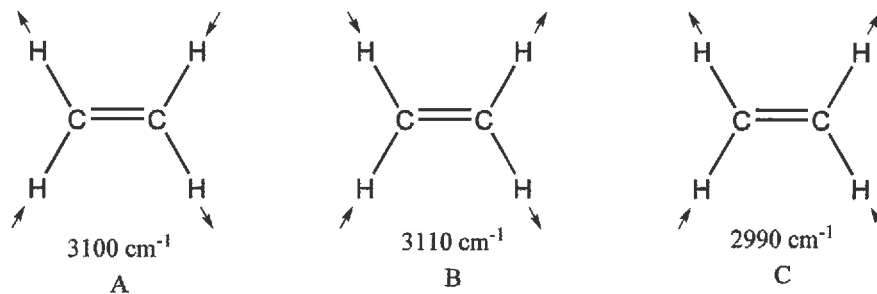


Beantwoord nu de volgende vragen:

- a. (3 ptn) Hoeveel normaalvibraties zijn er voor het etheenmolecuul?
- b. (7 ptn) De karaktertabel van etheen is dezelfde als die in opgave 1 gebruikt. Bepaal met een berekening dat de volledige representatie van de normaalvibraties van etheen (Γ_{vib}) voldoet aan:

$$\Gamma_{\text{vib}} = 3A_g + 2B_{1g} + B_{3g} + A_u + B_{1u} + 2B_{2u} + 2B_{3u}$$

- c. (5 ptn) Welke (van de onder c gevonden) normaalvibraties van etheen zijn infrarood actief en welke zijn Raman actief? Welke modes zijn geheel niet actief?
- d. (4 ptn) In onderstaande tekening is met compressie (\leftarrow) en verlenging (\rightarrow) een drietal IR actieve normaalvibraties van etheen getekend. Welke symmetrielabels (irrep) horen hierbij?



Opgave 3. De wet van Ampère-Maxwell (20 punten)

De wet Ampère-Maxwell luidt:
$$\oint_c \vec{B} \cdot \vec{u}_l \, dl = \mu_0 I_{\text{omsl.}} + \epsilon_0 \mu_0 \frac{d}{dt} \int_{S_c} \vec{E} \cdot \vec{u}_n \, dS$$

Geeft van de volgende termen uit de wet een omschrijving in alleen woorden:

a. (4 ptn) $\oint_c \vec{B} \cdot \vec{u}_l \, dl$

b. (4 ptn) $I_{omsl.}$

c. (4 ptn) $\frac{d}{dt} \int_{S_c} dS \vec{E} \cdot \vec{u}_n$

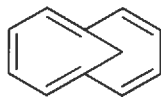
Leg in gewoon Nederlands uit wat het verband is tussen:

d. (4 ptn) De integratiedomeinen c en S_c van de twee integralen.

e. (4 ptn) De vectoren \vec{u}_l en \vec{u}_n .

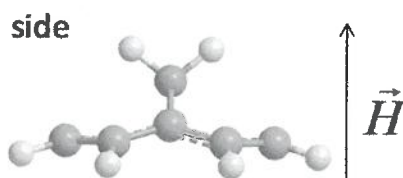
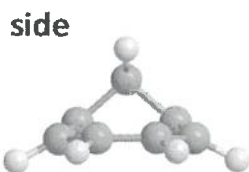
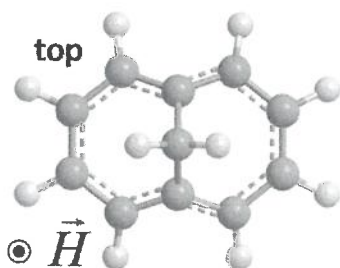
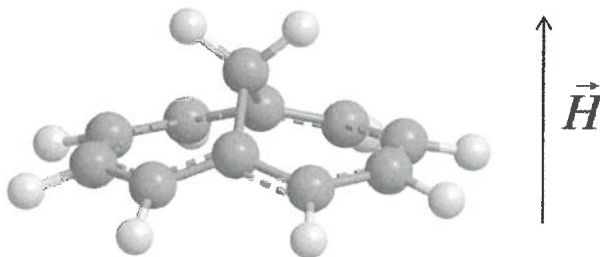
Opgave 4 Vogels annuleen (21 punten)

Emanuel Vogel synthetiseerde de volgende verbinding en bestudeerde de magnetische eigenschappen van dit materiaal met behulp van kernspinresonantie spectroscopie.



Bicyclo[4.4.1]undeca-1,3,5,7,9-pentaene
ook wel 1,6-Methano[10]annulene genoemd

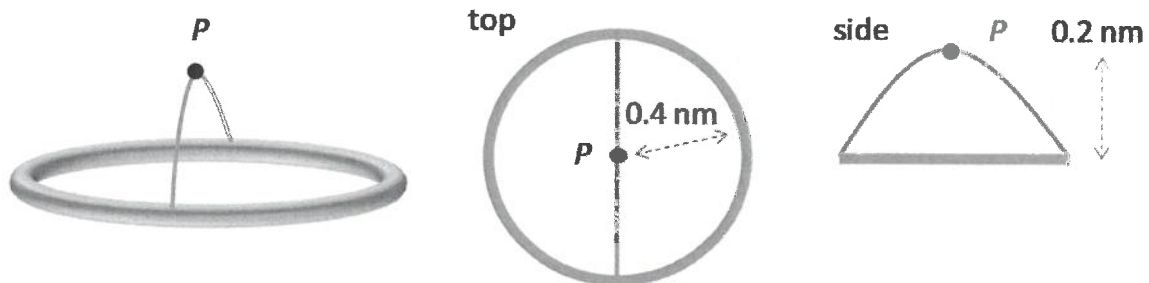
De ruimtelijke structuur van dit molecuul stellen we als volgt voor:



Het kernspinresonantie spectrum van deze aromatische verbinding laat een enkelvoudig signaal zien bij een chemische verschuiving $\delta = -0,45$ ppm dat wordt toegeschreven aan de twee protonen aan de brug. Verder laat het spectrum een groep van signalen zien bij ongeveer $\delta = 7,2$ ppm ten gevolge van de protonen aan de aromatische ring.

- a. (6 ptn) Beredeneer op basis van de chemische verschuivingen of deze verbinding paramagnetisch of diamagnetisch is. Maak hierbij eventueel gebruik van de vergelijking het diamagnetische benzeen, waarvoor een chemische verschuiving van $\delta = 7,26$ ppm gemeten wordt.
- b. (6 ptn) Schets de verdeling van de magnetische veldlijnen rond het molecuul die compatibel is met je antwoord bij deel a). Neem hierbij aan dat het magnetiserende veld H zo georiënteerd is t.o.v. het molecuul als weergegeven hierboven in de figuur van de ruimtelijke structuur van het annuleen.

Het kernspinresonantie spectrum is gemeten bij een magneetveld met een sterkte van 9,4 Tesla. We versimpelen de structuur van het molecuul tot een aan aromatische ring met straal van 0,4 nm met een brug daaroverheen met hoogte van 0,2 nm. We nemen aan dat de twee brug protonen zich bevinden in het punt P precies boven het midden van de aromatische ring:



- c. (9 ptn) Bereken de grootte van de elektrische stroom die in de ring moet lopen om de chemische verschuiving van de brug protonen ($\delta = -0,45$ ppm) te kunnen verklaren voor de gegeven versimpelde geometrie en oriëntatie van het uitwendige veld H .

Opgave 6 Elektromagnetische straling (9 punten)

De International Commission on Non-Ionizing Radiation Protection (ICNIRP) adviseert de World Health Organization (WHO) over de veiligheid van laag frequente elektromagnetische straling. De ICNIRP stelt als richtlijn dat blootstelling aan tijdafhankelijke magneetvelden beperkt zou moeten worden tot veldsterktes lager dan 100×10^{-6} Tesla. We onderzoeken nu of de elektromagnetische straling van een computerbeeldscherm aan deze norm voldoet. Een beeldscherm met afmetingen van $0,33 \text{ m} \times 0,33 \text{ m}$ verbruikt typisch een vermogen van 100 W. De flux dichtheid van energie uit het beeldscherm is dus $\leq 10^3 \text{ W/m}^2$.

Bereken een bovengrens voor de veldsterkte van het magnetische veld van elektromagnetische straling met intensiteit van 10^3 W/m^2 . Leg duidelijk uit welke stappen je volgt in je berekening. Voldoet een computerbeeldscherm aan de richtlijn van de WHO?

EINDE

