Werkcollege Chemische Binding

19 mei 2004

Opgave 15

Opgave 15.1 Maak twee *sp* hybride orbitals die in de richting van de positieve, respectievelijk de negatieve z-as wijzen. Zorg ervoor dat de orbitals genormeerd en onderling orthogonaal zijn.

Opgave 15.2 Maak drie sp^2 hybride orbitals waarvan er één langs de positieve x-as ligt en de andere twee in het xy-vlak met onderlinge hoeken van 120°. Maak opnieuw de orbitalen orthonormaal. Leg uit hoe orbitalen orthogonaal kunnen zijn terwijl ze een hoek van 120° maken.

Opgave 15.3 Beschouw een hypothetische (niet-stationaire) toestand van het waterstof atoom waarbij het elektron zich in een sp^2 hybride orbital bevindt dat in de richting $(-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\sqrt{3}, 0)$ wijst. Bereken de verwachtingwaarden van de drie componenten van de dipool-operator voor deze toestand. Vermeld welke symmetrie operatoren je gebruikt hebt om vast te stellen dat bepaalde integralen nul zijn. Als het goed is komt in je eindantwoord één onbekende integraal voor. Is deze positief of negatief?

Opgave 16

Veronderstel dat het molecuul H_2O een H–O–H bindingshoek θ heeft van 106°. Dan geldt precies

$$\cos\frac{1}{2}\theta = 0.6 \qquad\qquad \sin\frac{1}{2}\theta = 0.8$$

We leggen het molecuul in het xy-vlak met de tweetallige symmetrie-as (de bisectrice van de H–O–H hoek) langs de x-as.

Opgave 16.1 De beide bindingselektronen van het zuurstof atoom bevinden zich in twee *equivalente* hybride orbitals die onderling orthogonaal zijn. Reken de (ongenormeerde) golffuncties uit van deze hybride orbitals.

Opgave 16.2 Veronderstel dat beide lone pairs op het zuurstof atoom in twee *equivalente* hybriden zitten (gelegen in het xz-vlak). Deze hybriden zijn orthogonaal op de hybriden uit opgave 16.1 en ook onderling orthogonaal. Bereken de (ongenormeerde) hybride orbitals van de lone pairs.