

Opgaven week 3 – Fysische Chemie A1 voor Technische Natuurkunde

Opdracht 1

(a) Geef het Moleculaire Orbitaal energie schema van NO (teken alleen de valentie elektron levels).

Gegeven: volgorde in energieën: $2\sigma_u$, $1\pi_g$, $2\sigma_g$

(b) Geef de valentie elektronenconfiguratie voor NO

(c) Is het NO molecuul para- of diamagnetisch? En een NO^- ion? En een NO^+ ion?

(d) Wat is de bindingsorde van het NO molecuul? Wat zegt dit over het molecuul?

(e) Leg uit of dit molecuul reactief is.

(f) Gegeven in de bijlage is het periodieke systeem met elektron negativiteit. Is NO polair?

Opdracht 2

Hieronder staan de kracht constanten voor een aantal diatomaire moleculen. Is de volgorde wat je verwacht en leg dit uit.

Molecuul	K (Nm^{-1})
B_2	350
C_2	930
N_2	2260
O_2	1140
F_2	450

Opdracht 3

(a) Zet de volgende moleculen op volgorde van bindingslengte: O_2^+ , O_2 , O_2^- , O_2^{2-}

(b) Teken het moleculaire orbitaal energie diagram voor O_2^{4+} . Beoordeel op basis van dit diagram of de covalente binding van dit ion stabiel is (leg uit).

Opdracht 4 – Polariteit en dipoolmoment

(a) Als een covalente binding polair is, betekent dat dan dat een molecuul met deze covalente binding een dipool is?

(b) Geef de elektronconfiguraties van C en O, en schets hoe in CO_2 de orbitalen overlappen om de structuur te achterhalen. Teken de structuurformule van CO_2 .

(c) is de CO binding polair? Is het CO_2 molecuul een dipool?

Opdracht 5

(a) Wat is het verschil tussen een gelocaliseerde of een gedelocaliseerde π bond?

(b) Is de π bond in NO_2^+ gelocaliseerd of gedelocaliseerd? Leg uit of laat zien.

***Opdracht 6 – H_2^+ ion (3pt)**

- (a) Schets de bonding en antibonding MO van het H_2^+ ion en teken het energie level diagram. (½pt)
- (b) Geef de elektronconfiguratie van de molecuul orbitalen van H_2^+ . Wat is de Bond order? (1pt)
- (c) Stel dat het ion geëxciteerd wordt met licht zodat het elektron van een lager energie naar een hoger energie molecuul orbitaal gepromoot wordt. Verwacht je dat het H_2^+ ion in de geëxciteerde staat stabiel is of uiteen valt? Leg uit. (1pt)
- (d) Welk(e) van de volgende statements over de situatie in vraag c is/zijn correct: (½pt)
 - (i) Het licht exciteert het elektron van een bonding naar een antibonding orbitaal.
 - (ii) Het licht exciteert het elektron van een antibonding naar een bonding orbitaal.
 - (iii) In de geëxciteerde staat zijn er meer bonding elektronen dan antibonding elektronen.

Opdracht 7

- (a) Teken het energie diagram van de MO elektronconfiguratie voor B_2^+ , Li_2^+ , N_2^+ .
- (b) Geef voor alle bovenstaande gevallen aan of de bond order toeneemt of afneemt bij het toevoegen van een elektron.
- (c) gebaseerd op de molecuul orbitaal elektronconfiguratie, heeft C_2 of B_2 een hogere bond dissociatie energie?

***Opdracht 8 – vereenvoudiging van een molecuul orbitaal tot particle in a box (7pt)**

In de "Free Electron Molecular Orbital" (FEMO) theorie worden gedelocaliseerde π -elektronen in een molecuul vereenvoudigd tot individuele deeltjes in een box (particle in a box) van lengte L .

- (a) Hoeveel π elektronen zitten er in Butadiene (C_4H_6)? Leg uit. (1pt)
- (b) Schets de eerste 3 oplossingen van de particle in a box (In de FEMO theorie zijn dit dus de 3 molecuul π -orbitalen met de laagste energie). (1pt)
- (c) Welke van de orbitalen in (b) zijn gevuld met π -elektronen in butadiene? (1pt)
- (d) Hoeveel energie kost het om in dit systeem een electron van de HOMO naar de LUMO te exciteren? (tip: zoek de energie eigenwaarden van particle in a box op. Butadiene heeft een lengte L) (1pt)

Het molecuul tetraene: $CH_2=CHCH=CHCH=CHCH=CH_2$ kan worden beschouwd als een box van lengte $8R$ ($R=140$ pm, de C-C bondlengte).

- (e) Schets de HOMO en LUMO voor dit molecuul, en bereken de minimale excitatie energie. Welke kleur licht absorbeert dit materiaal? (3pt totaal)

H 2.1	Pauling Electronegativity Values																He
Li 1.0	Be 1.6											B 2.0	C 2.5	N 3.0	O 3.5	F 4.0	Ne
Na 0.9	Mg 1.3											Al 1.5	Si 1.9	P 2.2	S 2.6	Cl 3.0	Ar
K 0.8	Ca 1.0	Sc 1.4	Ti 1.5	V 1.6	Cr 1.7	Mn 1.5	Fe 1.8	Co 1.9	Ni 1.9	Cu 1.9	Zn 1.6	Ga 1.8	Ge 2.0	As 2.2	Se 2.6	Br 2.8	Kr
Rb 0.8	Sr 0.9	Y 1.2	Zr 1.3	Nb 1.6	Mo 2.2	Tc 1.9	Ru 2.2	Rh 2.3	Pd 2.2	Ag 1.9	Cd 1.7	In 1.8	Sn 2.0	Sb 2.1	Te 2.1	I 2.5	Xe

Charles E. Sundin, University of Wisconsin-Platteville