

Opgaven week 2 – Fysische Chemie A1 voor Technische Natuurkunde

Opdracht 1 – σ en π bindingen

- (a) Schets hoe twee p -orbitalen van twee verschillende atomen samen een σ -bond kunnen vormen.
- (b) Schets hoe een π -bond is gevormd uit p -orbitalen.
- (c) Welke is normaal gesproken sterker, een σ of π bond? Leg uit.
- (d) Kunnen twee s -orbitalen samen een π -bond vormen? Leg uit.

***Opdracht 2 – Water molecuul H_2O (10 pt)**

- (a) Geef de elektronenconfiguratie van H ($Z=1$) en O ($Z=8$) (2pt)
 - (b) Schets de orbitalen van de valentie elektronen van de twee H's en (ongehybridiseerd) O in H_2O . Schets hoe deze zouden overlappen met elkaar om een H_2O molecuul te vormen (2pt)
 - (c) Wat zou de H-O-H bindingshoek zijn in deze eerste valence bond theory benadering? (1pt)
- In werkelijkheid hybridiseert het $2s$ orbitaal van zuurstof met de $2p$ orbitalen tot $2sp^3$ orbitalen.
- (d) Schets voor deze situatie hoe de orbitaal overlap tussen de twee H's en de (sp^3 gehybridiseerde) O er uit ziet. (2pt)
 - (e) Hoe heet deze moleculaire geometrie van een sp^3 hybridisatie, en wat is nu H-O-H bindingshoek in deze situatie? (2pt)
 - (f) In werkelijkheid is deze hoek 104.5° . Leg uit waarom "lone pairs" een mogelijke fysische verklaring kunnen geven tussen het verschil met antwoord 1e. (1pt)

Opdracht 3 – C_2H_2 molecuul

- (a) Welke hybridisatie hebben de C's in een C_2H_2 molecuul?
- (b) Schets de (gehybridiseerde?) atoom orbitalen en hoe deze overlappen om de geometrische structuur te achterhalen. Geef daarna m.b.v. een structuurformule de molecuulstructuur weer.
- (c) Geef voor elke chemische binding in dit molecuul aan wat voor type binding het is.

Opdracht 4 – Benzeen molecuul

Benzeen is een cyclisch molecuul met formule C_6H_6 . De C's vormen een zeshoek, en elke C is een covalente binding met een H. Beantwoord alle vragen van opdracht 3 voor dit molecuul

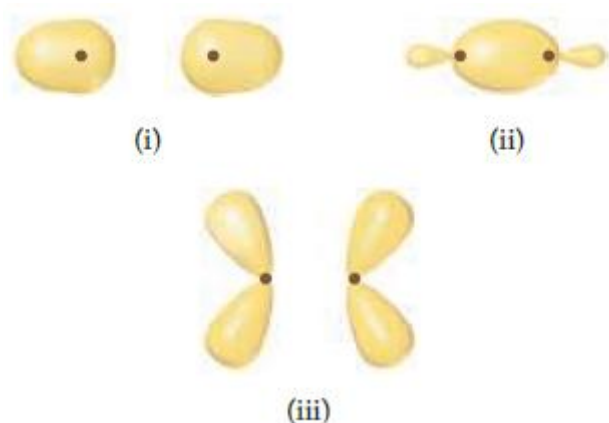
Opdracht 5 – BF_3

- (a) Geef de elektronconfiguratie voor een B ($Z=5$) atoom en voor een B^- ion
- (b) Beantwoord vragen (b) en (c) van opdracht 3 voor een BF_3 molecuul
- (c) Beantwoord vragen (b) en (c) van opdracht 3 voor een BF_4^- anion

Opdracht 6

Voor elk van de onderstaande contour representaties van molecuulorbitalen, indentificeer:

- (a) de atoom orbitalen (s of p) die het MO construeren,
- (b) het type MO (σ of π),
- (c) of het MO bonding of antibonding is.



Opdracht 7 – Hybridisatie

Identificeer de hybridisatie van het centrale atoom in (a) C_2H_2 , (b) AlI_3 , en in O en P in (c) $P(OH)_3$,

Opdracht 8 – Hybridisatie

- (a) Geef de structuurformule voor Chloormethaan (CH_3Cl), Chlooretheen (C_2H_3Cl) en Chloorethyne (C_2HCl).
- (b) Wat is de hybridisatie van de koolstof atomen in elk molecuul?
- (c) Voorspel welke van bovenstaande moleculen planair zijn
- (d) Hoeveel σ en π bonden zijn er in elk molecuul?