

HEMIJSKI FAKULTET– Univerzitet u Beogradu

ISPIT IZ TEORIJE HEMIJSKE VEZE

Ime i prezime:

Broj indeksa:

Datum: 21. avgust 2017.

1. (5) Nacrtati molekulsko-orbitalni dijagram za CN^- . Koje orbitale su HOMO i LUMO i na kojim atomima se one dominantno nalaze?

2. (4.5) Obeležite sledeće molekulske orbitale molekula AB koristeći σ , π , u i g oznake.

Oznaka orbitalne simetrije	Molekulska orbitala
	$\Phi_{2s}(A) + \Phi_{2s}(B)$
	$\Phi_{2s}(A) - \Phi_{2s}(B)$
	$\Phi_{2p_x}(A) + \Phi_{2p_x}(B)$
	$\Phi_{2p_x}(A) - \Phi_{2p_x}(B)$
	$\Phi_{2p_y}(A) + \Phi_{2p_y}(B)$
	$\Phi_{2p_y}(A) - \Phi_{2p_y}(B)$
	$\Phi_{2p_z}(A) + \Phi_{2p_z}(B)$
	$\Phi_{2p_z}(A) - \Phi_{2p_z}(B)$

3. Koristeći MO teoriju objasniti sledeće trendove u:

a)(2) ravnotežnim dužinama veza N_2 (109.8 pm), N_2^+ (111.6 pm), i N_2^{2-} (122.4 pm)

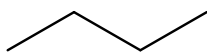
b)(2) energijama disocijacije O_2 (494 kJ/mol), O_2^+ (626 kJ/mol), O_2^- (393 kJ/mol), i O_2^{2-} (138 kJ/mol)

4. (4.5) Nacrtati Lewisove strukturne formule: azotne kiseline, tiosulfatnog jona, fosforaste kiseline i N_2O . Ukoliko se neki molekuli mogu napisati preko nekoliko, bitnih, rezonancionih struktura, napišite ih.

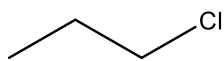
5. (1.5) I_2 je slabo rastvora u vodi za razliku od I_3^- . Zašto?

6. (4p) Poređati sledeće molekule po porastu tačke topljenja:

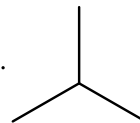
1.



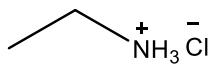
2.



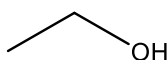
3.



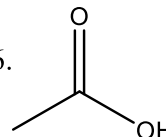
4.



5.



6.



7.(6) Koji molekul ima višu tačku ključanja? Objasniti.

a) SnCl_4 ili SnCl_2

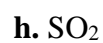
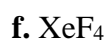
b) $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$ ili CH_3OCH_3

c) toluen ili heptan

d) orto-nitrofenol ili para-nitrofenol

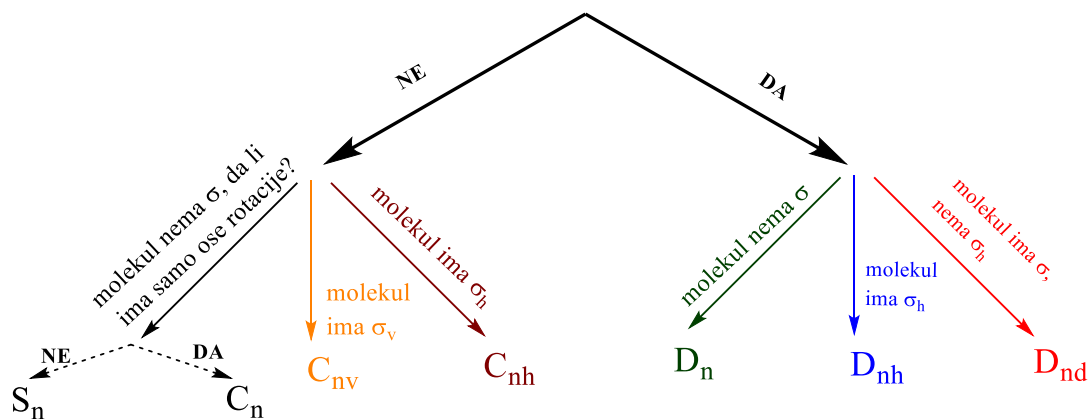
8. (6) Napisati SD za atom Li. Razviti determinantu. Šta se dešava kada zamenimo mesta dva elektrona a šta kada zamenimo mesta tri elektrona?

9.(15) Odrediti molekulsku strukturu pomoću VSEPR modela i naći kojim grupama simetrije pripadaju sledeći molekuli i joni.



Pronaći osu najvišeg reda, C_n . Da li molekul ima n C_2 koje su normalne na C_n ?

(ako je glavna osa C_2 , treba da ima 2 C_2 koje su normalne, ako je glavna osa C_3 , treba da ima 3 C_2 , ...)



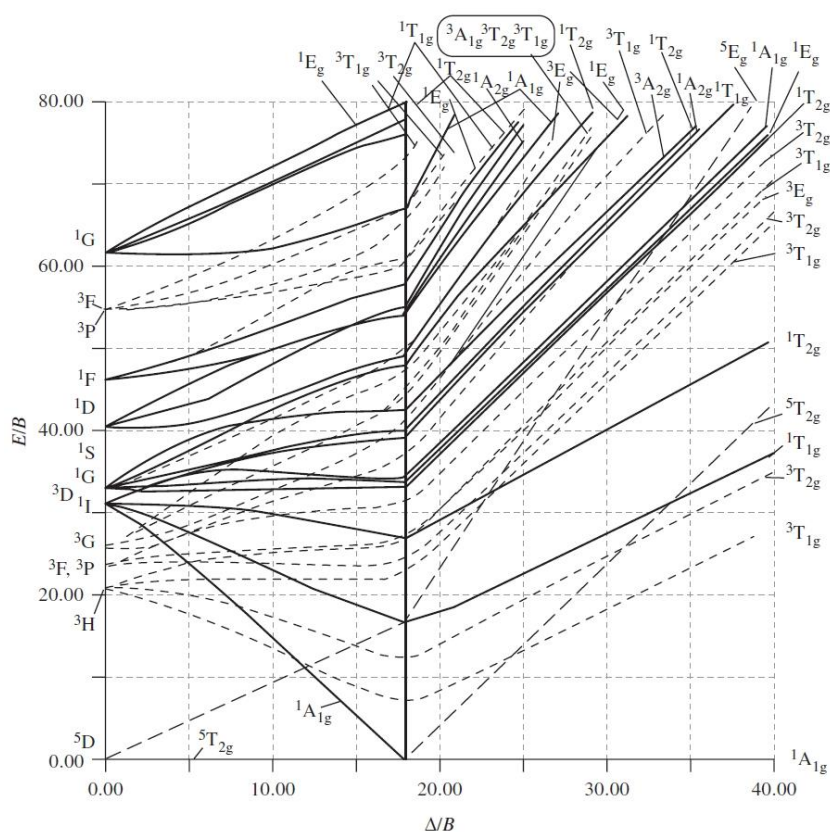
10. (4.5p) Koji ligand ostvaruje jače cepanje ligandnog polja? Objasniti.

a) H_2O ili OH^-

b) NO_2^- ili NO_2^+

c) NH_3 ili S^{2-}

11. (2.5p) Na osnovu Tanabe-Šugano-vog dijagrama odrediti koji je osnovni term slobodnog metalnog jona, kao i u oktaedarskom okruženju za $[\text{CoF}_6]^{3-}$. Nabrojati dozvoljene i zabranjene prelaze.



12. (2.5p) Na osnovu Tanabe-Sugano-vog dijagrama(iz prethodnog zadatka) odrediti koji je osnovni term slobodnog metalnog jona, kao i u oktaedarskom okruženju za $[\text{Co}(\text{NH}_3)_6]^3$. Nabrojati dozvoljene i zabranjene prelaze.

13 . ClO_2 je gas žuto-zelene boje koji je jako oksidaciono sredstvo i koristi se za dezinfekciju vode i kao izbeljivač. Na slici ispod su date osnovna(Stanje I) i neke ekscitovane konfirutacije ClO_2 (Stanja II-VII).

a) (6p) Napisati oznaku ukupnog elektronskog stanja ispod svake konfiguracije.

Stanje I	Stanje II	Stanje III	Stanje IV	Stanje V	Stanje VI	Stanje VII

Tablica karaktera grupe C_{2v}

C_{2v}	E	C_2	$\sigma_v(xz)$	$\sigma'_v(yz)$		
A_1	1	1	1	1	z	x^2, y^2, z^2
A_2	1	1	-1	-1	R_z	xy
B_1	1	-1	1	-1	x, R_y	xz
B_2	1	-1	-1	1	y, R_x	yz

b) (6p) Razmotrite prelaze iz osnovnog u stanja II, III, IV, V, VI i VII. Za svaki recite da li **spinski** i **orbitalno** dozvoljen ili zabranjen.

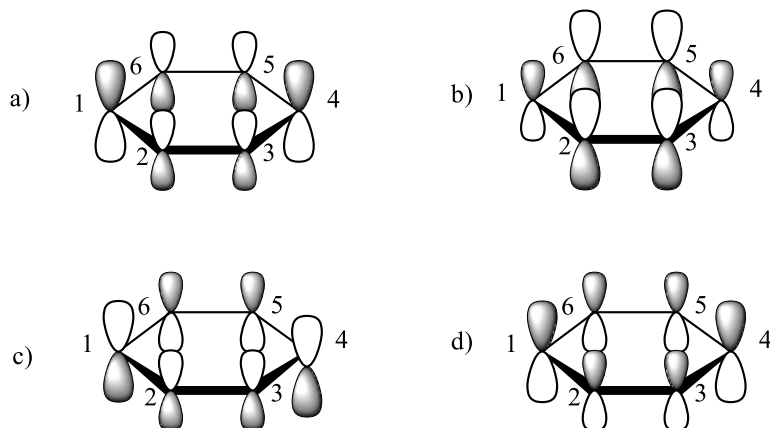
14. (3p) Obajsniti zašto Tb ima nižu četvrtu energiju jonizacije od Gd? Na osnovu trenda u I_4 , za koje atome očekujete da će graditi $4+$ jone??

15. (5p) Popuniti tablicu mikrostanja za p^2 konfiguraciju. Na osnovu nje, pronaći sve termove i odrediti osnovni term.

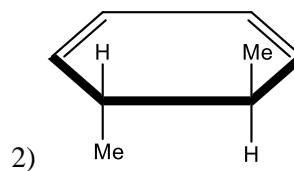
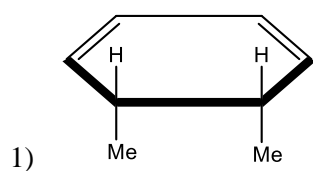
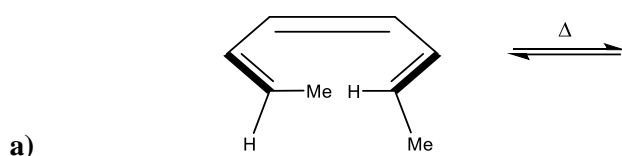
16. (2p) Napisati elektronsku konfiguraciju atoma Cu, i **kratko** objasniti zašto ste se odlučili na taj izbor.

17. (1.5 p) Jedna od MO benzena koja se dobija Huckelovom metodom ima oblik koji je priložen ispod. Koji od predloženih slika odgovara toj orbitali?

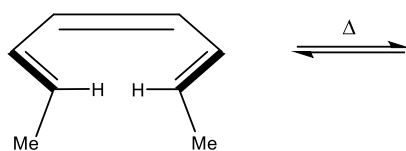
$$\psi_{E_{2u}} = \frac{1}{\sqrt{12}} \begin{bmatrix} 2 \\ 1 \\ 1 \\ 2 \\ -1 \\ -1 \end{bmatrix}$$



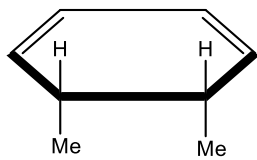
18(4p) Odabrati glavne proizvode sledećih reakcija:



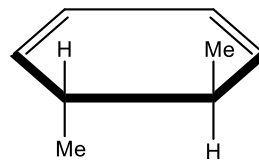
b)



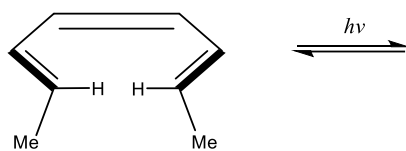
2)



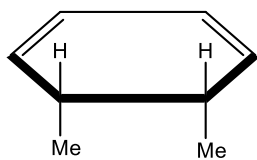
2)



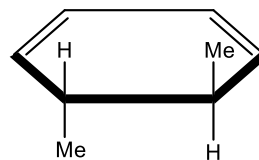
c)



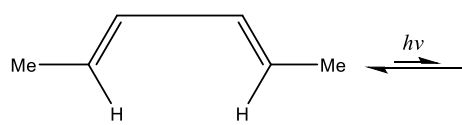
1)



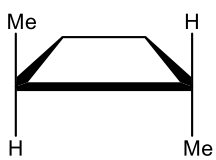
2)



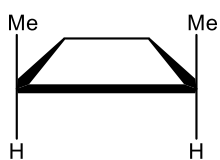
d)



1)



2)



19. Orbitala je:

- a) Deo prostora u kome se sigurno nalazi elektron
- b) Jednoelektronska talasna funkcija
- c) Deo prostora (zapremina) definisan Heisenberg-ovim uslovom $\Delta p \Delta x > h/2\pi$

Dodatni zadaci

1. (9) Naći svojstvene vrednosti ciklopropil katjon Hickelovom metodom. Odrediti dva svojstvena vektora. Nacrtati ih



2. (3) Alkalni metali sa kiseonikom, osim oksida, grade i perokside (O_2^{2-}), superokside (O_2^-) i ozonide (O_3^-). Predvidite magnetne osobine ovih jedinjenja i kratko objasnite vaš odgovor.

3. (1) Komutator x koordinate i komponente impulsa po x osi je $[\hat{x}, \hat{p}_x] = -i\hbar$. To znači da:

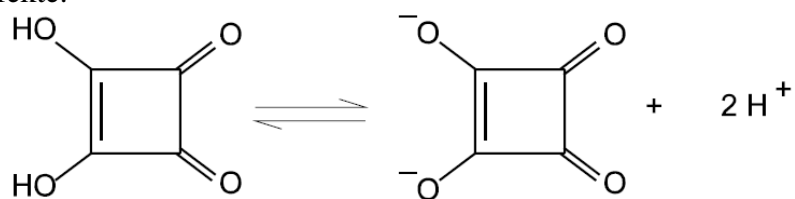
- a) \hat{x} i \hat{p}_x se ne mogu (tačno) izmeriti u isto vreme.
- b) \hat{x} i \hat{p}_x se mogu (tačno) izmeriti u isto vreme.
- c) da je njihov komutator pogodnije posmatrati u sfernom koordinatnom sistemu.

4. (1) Kod višeelektronskih atoma, hamiltonijan ne komutira sa l i s pojedinačnih elektrona već samo sa ukupnim L i S . To znači da su dobri kvantni brojevi za obeležavanje stanja(termova):

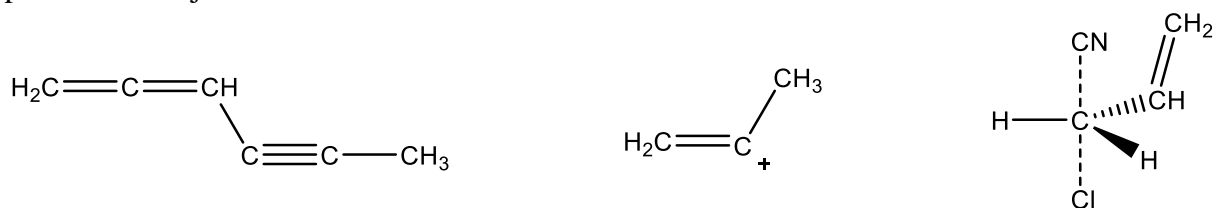
- a) samo l
- b) samo s
- c) L i S
- d) L i l
- e) L i s
- f) S i s

5. (6) Objasnite resenja iz zadatka 23. na osnovu orbitalnih interakcija.

6. (5) Kvadratna kiselina disosuje direktno do dianjona i jača je kiselina od sumporne. Objasnite ove efekte.



7 (3). Kakva je hibridizacija ugljenikovih atoma u sledećim jedinjenjima, intermedijerima i prelaznim stanjima?



8(3). Koja elektronska stanja se javljaju za ekscitovano stanje CH, $1\sigma^2 2\sigma^2 3\sigma^1 1\pi^2$?

9(2). Razmatratei samo valentne (1π) orbitale molekula kiseonika. Predstaviti sigletno i tripletno stanje. Koje ima nizu energiju? Zašto? Da li je neko od njih degenerisano (multideterminantno)?