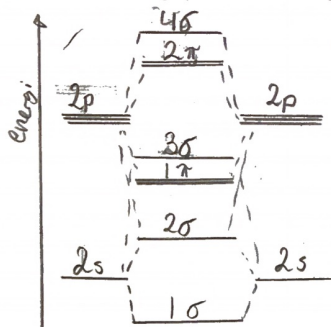


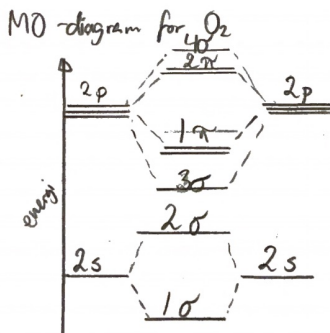
Vis hvordan bindingsorden og magnetiske egenskaper for $B_2(g)$, $N_2(g)$ og $O_2(g)$ kan forklares ut fra MO-teorien.

Oppgave 1: MO-diagram for N_2 og B_2 er like (tilnærmet, forholdene er ulike)



N_2 : Konfig = $1\sigma^2 2\sigma^2 1\pi^4 3\sigma^2$
 5 e⁻ par, 3 bindende
 2 som ikke deltar i bindingen
 $b=3$
 -diamagnetisk, ingen uparede e⁻

B_2 : Konfig = $1\sigma^2 2\sigma^2 1\pi^2$
 3 e⁻ par, 1 par bindende
 det siste er delt i "frie"
 uparede e⁻ på hvert sitt atom
 $b=1$
 -paramagnetisk, 2 uparede e⁻



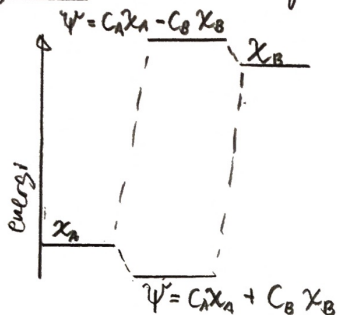
O_2 : Konfig = $1\sigma^2 2\sigma^2 3\sigma^2 1\pi^4 2\pi^2$
 6 e⁻ par, 2 bindende
 1 2π er det 2 uparede e⁻
 $b=2$
 -paramagnetisk, 2 uparede e⁻

Spørsmål 2

10 av 10 poeng

Tegn MO-diagrammet for et heteronukleært molekyl hvor de to atomene har svært ulik elektronegativitet.

Oppgave 2 Generelt diagram for heteronukleært molekyl (distomare)
 (fra boka)



Spørsmål 3

10 av 10 poeng

Diskuter hvordan MO-diagrammet for LiF(g) vil se ut med utgangspunkt i elektronegativiteten til Li og F.

Valgt svar: Det er stor forskjell mellom elektronegativiteten til F og Li. Li vil være mye høyere i energi enn F. Dette gjelder både 2s- og 2p-orbitalene for begge stoff. Vi ender med 4 pi- og 4 sigmamolekylorbitaler mellom molekylene.

Tilbakemelding på respons: [Ingen gitt]

Spørsmål 4

10 av 10 poeng

Forklar hvorfor vi kan bruke MO-diagrammet for N₂ til å beskrive molekylet NO, men at det ikke er mulig å beskrive dette molekylet ved hjelp av MO-diagrammet for O₂ (hint: elektronegativitet).

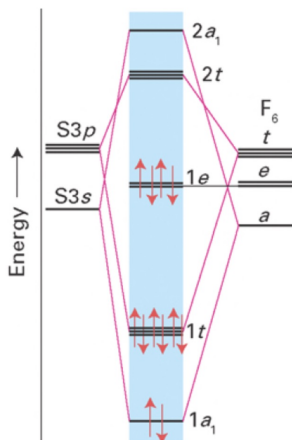
Bruk MO-diagrammet for N₂ til å finn ut om molekylene/ionene NO, NO⁺ og NO⁻ er paramagnetiske eller diamagnetiske.

Valgt svar: MO diagrammet til N₂ likner mer enn O₂, fra oppgave 1 kan vi se at N₂ og O₂ har forskjellig rekkefølge på MO'ene. Ettersom NO består av to ulike stoffer med ulik elektronegativitet, og et av dem er N, så vil MO til NO se ut som en forskjøvet N₂-diagram. Dette er fordi den laveste degenererte orbitalen fra 2p-orbitalene vil ha 2s-karakter.
NO, 11 e⁻, får et fritt e⁻, paramagnetisk
NO⁺, 10 e⁻, får ingen frie e⁻, diamagnetisk

Spørsmål 5

10 av 10 poeng

MO-diagrammet for SF₆ er vist i figuren under. Hvilke atomorbitaler er benyttet i diagrammet? Gi en begrunnelse for hvilke atomorbitaler for S og F som benyttes. Hva er bindingsordenen for SF₆-molekylet?



Valgt svar:

For Svolet benyttes både 3s og 3p.
For F benyttes 2p-orbital, 2s har lavere energi, 2p ligger nærmere svolet sine orbital, og vil derfor danne bindinger enklere enn 2s.
1a₁ vil være antibindende. To elektron i den.
 $b = 0.5(10-2) = 4$
Bindingsorden er 4

Spørsmål 6

10 av 10 poeng

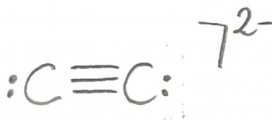
Om alle S-F-bindingene i SF₆ strekkes like mye, hvordan vil dette påvirke energidifferansen mellom LUMO og HOMO for SF₆?

Valgt svar: Overlappen blir mindre, hvilket gjør at bindende MO svekkes. Ikkebindende påvirkes ikke.
HOMO-bindingene vil ikke påvirkes
LUMO-bindingene vil få lavere energi.
Dette fører til at forskjellen mellom dem avtar
Energidifferansen minker.

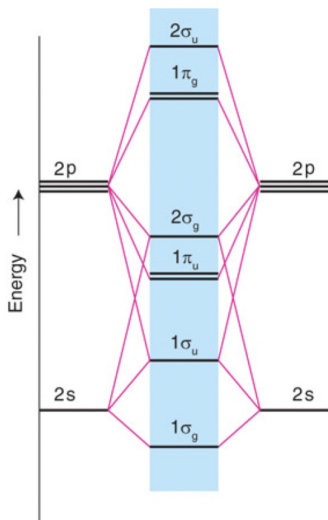
Spørsmål 7

10 av 10 poeng

CaC₂ er et karbid som består av C₂²⁻-ioner. Tegn Lewis-strukturen til C₂²⁻-ionet.



Forklar hvordan MO-diagrammet for C_2^{2-} konstrueres ved å ta utgangspunkt i atomorbitalene til de to karbonatomene som inngår i molekylet (se skisse av MO-diagrammet under). Hva er basissettet som benyttes?



$1\sigma_g$ dannes av $2s$
 $2p_z$ fordi z -aksen er bindingsakse.
 $1\sigma_u$ og $2\sigma_g$ dannes av $2s$ og $2p_z$
 $2\sigma_u$ dannes av $2p_z$
 $1\pi_u$ og $1\pi_g$ dannes av $2p_x$ og $2p_y$

Valgt svar:

Basissett: $2s$ og $2p$ fra begge atomene.

Ved å lineærkombinere atomorbitalene til basissettet. (De som ligger nærmere hverandre) Som på skissen, så vil $2p$ og $2s$ kombinasjonene overlappe hverandre, da $2p$ og $2s$ ligger nærmere hverandre i energi.

Tilbakemelding på respons: Bra, kunne gjerne utdypet litt mer om hvilke atomorbitaler som danner hvilke MOer.

Spørsmål 9

10 av 10 poeng

Hvilke molekylorbitaler er bindende og antibindende for C_2^{2-} -ionet? Hva er elektronkonfigurasjonen for C_2^{2-} -ionet?

Valgt svar:

Bindende: $1\sigma_g$, $2\sigma_g$ og $1\pi_u$

Anti-bindende: $1\sigma_u$, $2\sigma_u$ og $1\pi_g$

Konfigurasjon: $(1\sigma_g)^2(1\sigma_u)^2(1\pi_u)^4(2\sigma_g)^2$

Spørsmål 10

10 av 10 poeng

Hva er bindingsordenen for C_2^{2-} -ionet? Hvordan samsvarer dette med Lewis-strukturen? Beskriv de magnetiske egenskapene til C_2^{2-} -ionet.

Valgt svar:

$b = 0.5(8-2) = 3$

Bindingsorden er 3

Det stemmer med Lewis-strukturen der vi fikk en trippelbinding.

Basert på konfigurasjonen ser vi at det ikke finnes noen uparede elektron, så ionet er diamagnetisk.