

Tentamen Chemische Binding, MOL056

4 januari 2012, 8:30-11:30, HG 00.068, Dr. ir. Gerrit C. Groenenboom

Vraag 1: Ne-He en Ne-He⁺

De elektronenconfiguratie van He is $1s^2$ en die van Ne is $1s^2 2s^2 2p^6$. De ionisatie-energie van He is 24.6 eV en die van Ne is 21.6 eV. We beschouwen de Ne 1s en 2s atomic orbitals als core-orbitalen.

- 1a. Maak een MO-diagram voor de valentie orbitalen van Ne-He. Geef voor alle MOs de symmetrie-labels en de elektronenbezetting.
- 1b. Leg uit hoe je de informatie over de ionisatie energieën gebruikt hebt.
- 1c. Waar is de binding sterker, in het Ne-He complex, of in het Ne-He⁺ cation? Leg uit.
- 1d. Geef het totale spin quantum getal S , en alle mogelijke waarden van het spin-projectie quantumgetal M_S voor de grondtoestand van het Ne-He⁺ cation.
- 1e. Geef een één-Slater-determinant golf functie voor de grondtoestand van het Ne-He⁺ cation. De core-elektronen kun je ook hier buiten beschouwing laten.

In de volgende vraag nemen we de Ne 2s orbitaal wel expliciet in rekening. De Ne 2s orbitaal ligt lager in energie dan de eerder beschouwde valentie-orbitalen.

- 1f. In een homonucleair diatoom kan een simpel MO model uitgebreid worden door zogenaamde s-p mixing in rekening te nemen. Er is een analoog effect in Ne-He. Welke MOs worden hierdoor beïnvloed, en komen ze door dit effect hoger of lager in energie te liggen?

Vraag 2: Lone-pairs in water

Kies een assenstelsel met het massamiddelpunt van het H₂O molecuul als oorsprong, het O-atoom op de positieve z -as, en de twee H-atomen in het xz -vlak. De lone-pair orbitalen op het O atoom liggen in het yz -vlak.

- 2a.** Construeer voor de lone-pairs hybride orbitalen h_1 en h_2 van de zuurstof 2s en 2p orbitalen, waarbij h_1 in de $(0, 1, 1)$ richting wijst, en h_2 in de $(0, -1, 1)$ richting. Normeer de orbitalen.

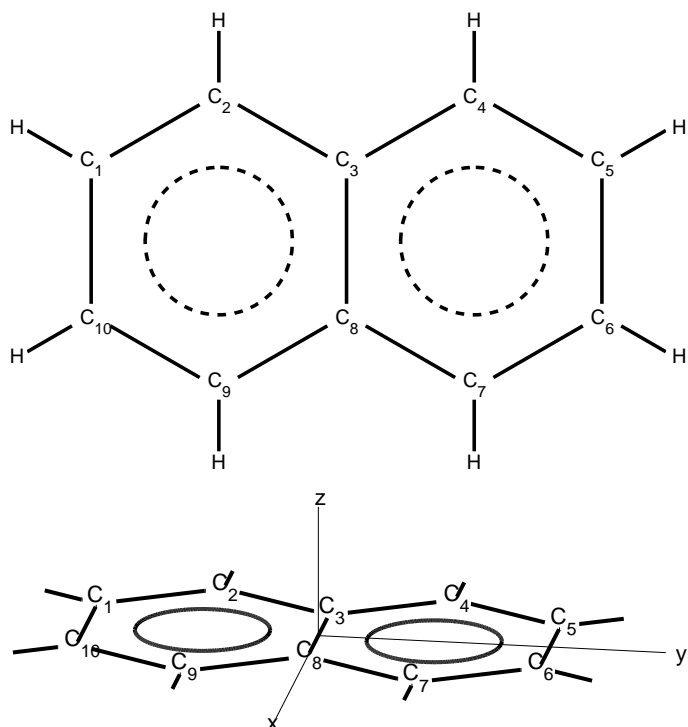
De hybride orbitalen zijn niet aangepast aan de symmetrie van het water molecuul.

- 2b.** Maak een lineaire combinatie van de hybride-orbitalen die symmetrisch is onder spiegeling in het vlak van het molecuul (het xz -vlak). Noem deze functie ϕ_S . Maak ook een anti-symmetrische combinatie (ϕ_A). Normeer beide functies.

De vier lone-pair elektronen kunnen beschreven worden met een 4-elektronen Slater-determinant. Je kunt hierbij zowel de hybride orbitalen (h_1 en h_2), als de symmetrie-aangepaste orbitalen (ϕ_S en ϕ_A) gebruiken.

- 2c.** Schrijf beide mogelijke 4-elektron Slater-determinant golf functies op.
- 2d.** Laat zien dat deze twee vier-elektronen lone-pair golf functies identiek zijn.

Vraag 3: Hückel berekening Naftaleen



In de figuur is het naftaleen molecuul te zien, met de nummering van de koolstof atomen, en een assenstelsel. Het molecuul ligt in the *xy*-vlak, de *x*-as ligt langs de C₃-C₈ binding, en de *z*-as staat loodrecht op het vlak van het molecuul. Noteer een $2p_z$ orbitaal op koolstof atoom *i* als ϕ_i .

- 3a.** Maak een symmetrie aangepaste basis van functies die anti-symmetrisch zijn onder spiegeling in het *xz*-vlak, en symmetrisch onder spiegeling in het *yz* vlak.
- 3b.** Stel de Hückel matrix op in deze symmetrie aangepaste basis.
- 3c.** Bereken de MO energieën.
- 3d.** Bereken de π -orbitalen voor deze symmetrie.
- 3e.** Als je deze berekening herhaalt voor alle mogelijke symmetrieën, hoeveel verschillende MOs zul je dan in totaal vinden? Je hoeft ze niet echt te berekenen - alleen het aantal wordt gevraagd.