NORGES TEKNISK NATURVITENSKAPELIGE UNIVERSITET
INSTITUTT FOR KJEMI

EKSAMEN I KJ 2031 UORGANISK KJEMI VK

Fredag 11. desember 2009

Tid: 09.00 – 13.00

Faglig kontakt under eksamen:

Karina Mathisen, Realfagbygget E2-131, tlf. 73 59 62 18

Institutt for kjemi, NTNU, Gløshaugen

Hjelpemidler: Enkelt periodesystem er vedlagt. Bestemt enkel kalkulator tillatt. Eksamenssettet består av 3 oppgaver på 5 sider inkludert vedlegg. Alle oppgaver skal besvares. Ta med alle resonnementer underveis så du kan få poeng. Oppgavenes vekting er angitt i parentes.

Oppgave 1 (40 poeng)

a) Karaktertabellen for punktgruppe C_{2v} er gitt under. Forklar hvilken informasjon en slik tabell gir, og hvordan man kan bruke den for å si noe om bindingsforholdet på orbitalnivå for litt mer kompliserte molekyl (dvs tre atomer eller mer) (6 poeng).

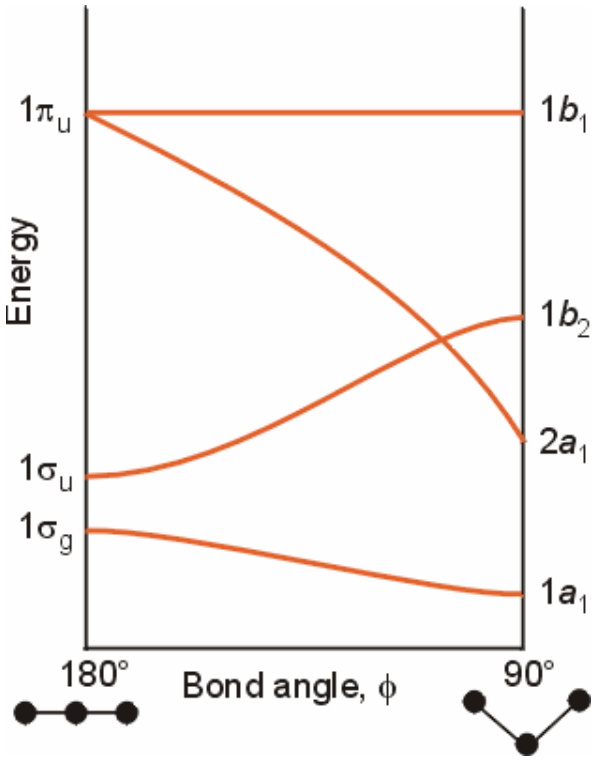
C_{2v}	E	C_2	$\sigma v(xz)$	$\sigma' v(yz)$
A_1	1	1	1	1
A_2	1	1	-1	-1
B_1	1	-1	1	-1
B_2	1	-1	-1	1

b) Anta at vannmolekylet, H_2O, ligger i yz-planet. Vis at vannmolekylet tilhører punktgruppen C_{2v}. Forklar hvilke symmetrityper valensorbitalene på oksygen tilhører, samt de to gruppeorbitalene til H_2. (8 poeng)

c) Skriv opp likningene og tegn alle (bindende, ikke-bindende og anti-bindende) SALC molekylorbitalene til H_2O molekylet. Forklar framgangsmåten. (6 poeng)

d) Tegn molekylorbital (MO) diagrammet for H_2O molekylet med korrekte navn på energinivåene. Gi en energimessig vurdering av MO nivåene. (6 poeng)

e) Walsh diagram for de bindende og ikke-bindende molekylorbitalene i et XH_2 molekyl (hvor X angir et tilfeldig grunnstoff) er gitt under. Forklar diagrammet og angi hvor vannmolekylet vil ligge. (8 poeng)



f) Molekylet karben (også kalt metylen) har formelen CH_2, og er et ustabilt og meget reaktivt mellomprodukt i mange organiske reaksjoner. Strukturen til molekylet var lenge omstridt, men i dag er de fleste enige om at molekylet i er bøyd og sp^2 hybridisert.

   i) Hvorfor er forbindelsen ustabil? Diskuter kort hvor i Walsh diagrammet denne forbindelsen skal plasseres sammenliknet med vann? Stemmer dette overens med det du ville forvente fra VSEPR? (4 poeng)

   ii) Karbener kan klassifiseres som to variasjoner; singlett og triplett. Disse klassene kan skilles da den triplette variasjonen er paramagnetisk og har større bindingsvinkel. Hvordan vil du forklare dette? (2 poeng)

Oppgave 2 (40 poeng)

a) Definer symmetrioperasjonen inversjonssenter, *i*. Forklar hvilke av punktgruppene under som innehar denne operasjonen og dermed er sentrosymmetriske (5 poeng):

   i) C_{2h}
   ii) C_{3h}
   iii) C_{4v}
   iv) T_d

b) Tegn opp VSEPR strukturen til BF_3 og PF_3. Finn symmetrioperasjonene og punktgruppene til molekylene. Er noen av forbindelsene polare? (4 poeng)

c) Ta utgangspunkt i den oktaedriske forbindelsen MX_3Y_3 hvor X og Y er forskjellige ligander og M er et transisjonsmetall. Plasser ligandene slik at du får to strukturer med høyest mulig, og lavest mulig symmetri. Finn alle symmetrioperasjonene og punktgruppen i de to tilfellene. (4 poeng)

d) Bruk VSEPR til å tegne strukturen til molekylene under, finn deretter symmetrioperasjoner og punktgruppe for hvert molekyl (3 poeng per oppgave):

   i) CH_3Cl
   ii) CH_2ClBr
   iii) C_2H_6 (staggered)
   iv) C_2H_6 (eclipsed)

e) Definer <u>kort</u> følgende begrep (3 poeng per oppgave):

   i) Schottky defekt
   ii) Jahn Teller effekt
   iii) Zeolitt
   iv) Heterogen katalyse
   v) Sintring

Oppgave 3 (40 poeng)

a) En KJ1030 student kommer til deg og forteller at krystallfeltteorien er helt topp. Tegn opp MO diagrammet for et oktaedrisk ML_6 kompleks etter ligandfeltteorien (karaktertabell for punktgruppe O_h er gitt i vedlegg). Bruk diagrammet til å forklare studenten hvorfor ligandfeltteorien er bedre når man skal diskutere bindingsforholdet i oktaedriske komplekser. (10 poeng)

b) Finn atomgrunntermen til følgende elektronkonfigurasjoner. Forklar framgangsmåten (2 poeng per oppgave).

   i) d^1
   ii) d^2
   iii) d^5

c) Forklar med hjelp i svaret fra a) følgende antall observerte topper i absorbsjonsspektra for oktaedrisk transisjonsmetallkompleks for overgangen $t_{2g}^{n-1}e_g^1 \leftarrow t_{2g}^n$. For d^2 kompleks skal det forklares hvilke d-orbitaler som er okkupert før og etter eksitasjon i de to tilfellene. (8 poeng)

   i) d^1 kompleks : 1 topp
   ii) d^2 kompleks: 2 topper
   iii) d^5 kompleks: 0 topper

d) Forbindelsen $KMnO_4$ har en veldig intens topp i absorbsjonsspektrumet angitt med navnet CT. Hva er opphavet til denne toppen? (6 poeng)

e) Identifiser komplekset med størst krystallfeltsplitting i parene under. Svaret skal begrunnes. (2 poeng per oppgave)

   i) $[Fe(OH_2)_6]^{2+}$ eller $[Fe(OH_2)_6]^{3+}$
   ii) $[Co(NH_3)_6]^{3+}$ eller $[Co(H_2O)_6]^{3+}$
   iii) $[Co(NH_3)_6]^{2+}$ eller $[Co(NH_3)_4]^{2+}$

f) "Kationet Zn^{2+} spiller en viktig strukturell rolle i biologiske systemer, hvilket skyldes en elektronisk preferanse for oktaedrisk over tetraedisk geometri." Er utsagnet fleip eller fakta? Forklar svaret ditt. (4 poeng)

Kandidatene må selv oppsøke sensuroppslagene. Verken eksamenskontoret eller instituttkontoret har kapasitet til å svare på telefonhenvendelser angående eksamenssensur.

Senest sensur; mandag 11.januar 2010

God jul og et fortreffelig nyttår!

Vedlegg:

Karaktertabell.

O_h	E	$8C_3$	$6C_2$	$6C_4$	$3C_2$	i	$6S_4$	$8S_6$	$3\sigma_h$	$6\sigma_d$	
A_{1g}	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	$x^2+y^2+z^2$
A_{2g}	1	1	-1	-1	1	1	-1	1	1	-1	
E_g	2	-1	0	0	2	2	0	-1	2	0	z^2, x^2-y^2
T_{1g}	3	0	-1	1	-1	3	1	0	-1	-1	
T_{2g}	3	0	1	-1	-1	3	-1	0	-1	1	xy, yz, zx
A_{1u}	1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	
A_{2u}	1	1	-1	-1	1	-1	1	-1	-1	1	
E_u	2	-1	0	0	2	-2	0	1	-2	0	
T_{1u}	3	0	-1	1	-1	-3	-1	0	1	1	x,y,z
T_{2u}	3	0	1	-1	-1	-3	1	0	1	-1	

The Periodic Table of the Elements

1 **H** Hydrogen 1.00794																	2 **He** Helium 4.003
3 **Li** Lithium 6.941	4 **Be** Beryllium 9.012182											5 **B** Boron 10.811	6 **C** Carbon 12.0107	7 **N** Nitrogen 14.00674	8 **O** Oxygen 15.9994	9 **F** Fluorine 18.9984032	10 **Ne** Neon 20.1797
11 **Na** Sodium 22.989770	12 **Mg** Magnesium 24.3050											13 **Al** Aluminum 26.981538	14 **Si** Silicon 28.0855	15 **P** Phosphorus 30.973761	16 **S** Sulfur 32.066	17 **Cl** Chlorine 35.4527	18 **Ar** Argon 39.948
19 **K** Potassium 39.0983	20 **Ca** Calcium 40.078	21 **Sc** Scandium 44.955910	22 **Ti** Titanium 47.867	23 **V** Vanadium 50.9415	24 **Cr** Chromium 51.9961	25 **Mn** Manganese 54.938049	26 **Fe** Iron 55.845	27 **Co** Cobalt 58.933200	28 **Ni** Nickel 58.6934	29 **Cu** Copper 63.546	30 **Zn** Zinc 65.39	31 **Ga** Gallium 69.723	32 **Ge** Germanium 72.61	33 **As** Arsenic 74.92160	34 **Se** Selenium 78.96	35 **Br** Bromine 79.904	36 **Kr** Krypton 83.80
37 **Rb** Rubidium 85.4678	38 **Sr** Strontium 87.62	39 **Y** Yttrium 88.90585	40 **Zr** Zirconium 91.224	41 **Nb** Niobium 92.90638	42 **Mo** Molybdenum 95.94	43 **Tc** Technetium (98)	44 **Ru** Ruthenium 101.07	45 **Rh** Rhodium 102.90550	46 **Pd** Palladium 106.42	47 **Ag** Silver 107.8682	48 **Cd** Cadmium 112.411	49 **In** Indium 114.818	50 **Sn** Tin 118.710	51 **Sb** Antimony 121.760	52 **Te** Tellurium 127.60	53 **I** Iodine 126.90447	54 **Xe** Xenon 131.29
55 **Cs** Cesium 132.90545	56 **Ba** Barium 137.327	57 **La** Lanthanum 138.9055	72 **Hf** Hafnium 178.49	73 **Ta** Tantalum 180.9479	74 **W** Tungsten 183.84	75 **Re** Rhenium 186.207	76 **Os** Osmium 190.23	77 **Ir** Iridium 192.217	78 **Pt** Platinum 195.078	79 **Au** Gold 196.96655	80 **Hg** Mercury 200.59	81 **Tl** Thallium 204.3833	82 **Pb** Lead 207.2	83 **Bi** Bismuth 208.98038	84 **Po** Polonium (209)	85 **At** Astatine (210)	86 **Rn** Radon (222)
87 **Fr** Francium (223)	88 **Ra** Radium (226)	89 **Ac** Actinium (227)	104 **Rf** Rutherfordium (261)	105 **Db** Dubnium (262)	106 **Sg** Seaborgium (263)	107 **Bh** Bohrium (262)	108 **Hs** Hassium (265)	109 **Mt** Meitnerium (266)	110 (269)	111 (272)	112 (277)	113	114				

58 **Ce** Cerium 140.116	59 **Pr** Praseodymium 140.90765	60 **Nd** Neodymium 144.24	61 **Pm** Promethium (145)	62 **Sm** Samarium 150.36	63 **Eu** Europium 151.964	64 **Gd** Gadolinium 157.25	65 **Tb** Terbium 158.92534	66 **Dy** Dysprosium 162.50	67 **Ho** Holmium 164.93032	68 **Er** Erbium 167.26	69 **Tm** Thulium 168.93421	70 **Yb** Ytterbium 173.04	71 **Lu** Lutetium 174.967
90 **Th** Thorium 232.0381	91 **Pa** Protactinium 231.03588	92 **U** Uranium 238.0289	93 **Np** Neptunium (237)	94 **Pu** Plutonium (244)	95 **Am** Americium (243)	96 **Cm** Curium (247)	97 **Bk** Berkelium (247)	98 **Cf** Californium (251)	99 **Es** Einsteinium (252)	100 **Fm** Fermium (257)	101 **Md** Mendelevium (258)	102 **No** Nobelium (259)	103 **Lr** Lawrencium (262)