

**NORGES TEKNISK NATURVITENSKAPELIGE UNIVERSITET
INSTITUTT FOR KJEMI**

EKSAMEN I KJ 2031 UORGANISK KJEMI VK

Mandag 31. mai 2010

Tid: 09.00 – 13.00

Faglig kontakt under eksamen:

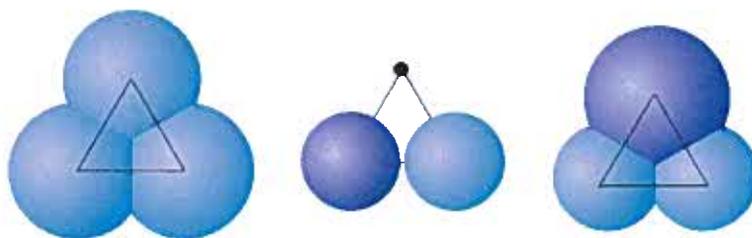
Karina Mathisen, Realfagbygget E2-131, tlf. 73 59 62 18

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 forklaringer underveis så du kan få poeng. Oppgavenes vektning er angitt i parentes.

Oppgave 1 (34 poeng)

- a) Hva er egentlig definisjonen på en symmetrioperasjon, og hvordan henger dette sammen med subskriften n i C_n ? (4 poeng)
- a) Bruk molekylet benzen (C_6H_6) til å forklare de tre typene speilplan vi kan ha. (4 poeng)
- b) Bruk karaktertabellen (i vedlegg) til å forklare hvilken symmetri type orbitalene på sentralatomet B i BH_3 molekylet, samt de tre gruppeorbitalene til H_3 (vist under) tilhører. Svaret skal forklares. (6 poeng)



- c) Skriv opp de generelle likningene for SALC orbitalene til BH_3 molekylet og skisser alle kombinasjonene du vil lage. (4 poeng)

- d) Diskuter SALCene laget under c) utifra energimessige forhold og tegn opp molekylorbitaldiagrammet til BH_3 . Fyll inn elektronene og gi navn til molekylorbitalene. (6 poeng)
- e) Definer begrepene LUMO og HOMO og angi hvilke orbitaler dette er i diagrammet. Hva skjer dersom LUMO fylles? (4 poeng)
- f) Skisser et Walsh diagram for de bindende og ikke-bindende molekylorbitalene mellom et trigonalt pyramidalt og et plant XH_3 molekyl (hvor X angir et tilfeldig grunnstoff). Forklar energiforskjellene og angi hvilken struktur du ville forvente for H_3O^+ molekylet. (6 poeng)

Oppgave 2 (34 poeng)

- a) Definer symmetrioperasjonen inversjonssenter, i . Forklar hvilke av punktgruppene under som innehar denne operasjonen og dermed er sentrosymmetriske (6 poeng):
- i) C_{2h}
 - ii) C_{3h}
 - iii) C_{4v}
 - iv) T_d
- a) Mens nitrogen kun danner trihalogenider, som for eksempel NCl_3 , kan fosfor, som ligger under nitrogen i gruppe 15, danne forbindelser som PCl_5 . Hvordan kan dette forklares, og hva er den betegnelsen for dette? Tegn opp molekylet PCl_5 ut fra VSEPR teori og forklar hvilken struktur dette er. Forklar hvilke symmetrielementer som gjelder for dette molekylet og bestem punktgruppen. (8 poeng)
- b) To av kloratomene i PCl_5 byttes ut med to fluoratomer (F). Forklar at strukturen som gir høyest symmetriorden også er den som er mest energetisk gunstig. Finn symmetrielementene og punktgruppe til denne strukturen. (4 poeng)
- c) Ett av kloratomene i PCl_5 byttes ut med ett jodatome (I). Tegn opp molekylet i sin mest stabile form og forklar plasseringen. Finn symmetrielementene og punktgruppe. (4 poeng)
- b) Definer kort følgende begrep (3 poeng per oppgave):
- i) Punktdefekt
 - ii) Jahn Teller effekt
 - iii) Zeolitt
 - iv) Tetteste kulepakning

Oppgave 3 (34 poeng)

- a) Dersom vi også tar hensyn til π -bindinger vil MO-diagrammet for ML_6 kompleks bli noe mer komplisert. Tegn opp et MO diagram med σ og π bindinger for en π -akseptor ligand. Energinivåene skal forklares, samt hvilke orbitaler som deltar i binding. Bruk MO diagrammet til å forklare den såkalte "18 elektron regelen" for organometallkomplekser. (10 poeng)
- b) Forklaringen av energiforskjellen mellom nivåene E_g og T_{2g} er forskjellig i krystallfeltteorien og i ligandfelt teorien (MO-teori). Hva er forskjellene? (6 poeng)
- c) Finn atomgrunntermen til følgende elektronkonfigurasjoner. Forklar framgangsmåten (2 poeng per oppgave).
- d^1
 - d^2
 - d^5
- d) Forklar med hjelp i svaret fra c) følgende antall observerte topper i absorpsjonsspektra 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)
- d^1 kompleks : 1 topp
 - d^2 kompleks: 2 topper
 - d^5 kompleks: 0 topper
- e) Bruk MO diagrammet til CO til å forklare π -backbonding til transisjonsmetaller. (4 poeng)

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

Senest sensur; mandag 21.juni 2010

Vedlegg:

Karaktertabeller.

C_{3v}	E	$2C_3$	$3\sigma_v$	
A_1	1	1	1	z, x^2+y^2, z^2
A_2	1	1	-1	
E	2	-1	0	x, y

D_{3h}	E	$2C_3$	$3C_2$	σ_h	$2S_3$	$3\sigma_v$	
A_1'	1	1	1	1	1	1	x^2+y^2, z^2
A_2'	1	1	-1	1	1	-1	
E'	2	-1	0	2	-1	0	x, y
A_1''	1	1	1	-1	-1	-1	
A_2''	1	1	-1	-1	-1	1	z
E''	2	-1	0	-2	1	0	

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 192.2217	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)				