

## Tehtäväpaketti 2

**Avainaiheet:** Kvanttimekaaninen molekyyli malli, orbitaalit. **Claydenin kappale:** 4.

---

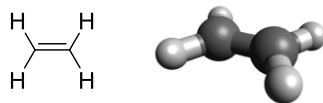
1. Heliumdimeeri  $\text{He}_2$  ei ole pysyvä rakenne, mutta kationi  $\text{He}_2^+$  on, miksi? Täytä alla oleva orbitaalivuorovaikutuskaavio, täytä muodostuvat molekyyliorbitaalit elektroneilla ja katso mihin se johtaa. [Kiinnitä huomiota vaiheeseen ja orbitaalin muotoon]



2. Litiumhydridi LiH on valkoinen jauhe, jota käytetään laboratoriossa emäksenä.
- Mikä on litiumin elektronirakenne?
  - Täytä alla oleva vedyn ja litiumin orbitaalivuorovaikutuskaavio. [Muodosta saman ja eri vaiheen kombinaatiot, huomaa, että vedyn atomiorbitaali on matalammalla energiassa]
  - Piirrä hahmotelmat hajottavan ja sitovan orbitaalin muodoille. [Kiinnitä huomiota vaiheeseen]
  - Orbitaalivuorovaikutusdiagrammin perusteella, onko litiumhydridin vety positiivisesti vai negatiivisesti varautunut?



3. Rakennetaan eteenille valenssisidoskuvaus.

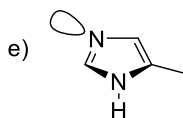
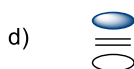
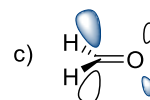
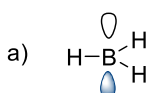


eteeni

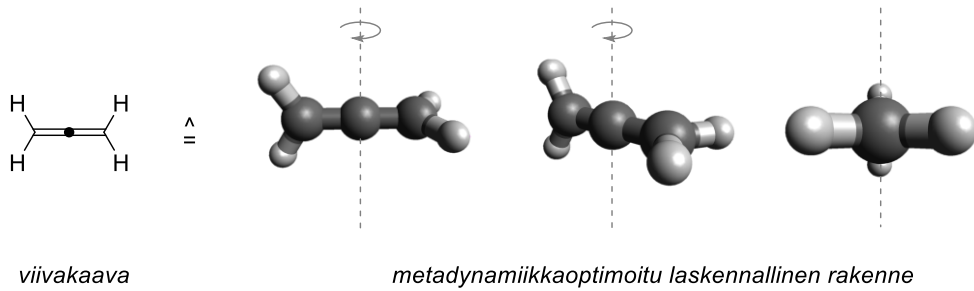
- Muodosta hiilen kahdesta 2p orbitaalista ja yhdestä 2s orbitaalista  $sp^2$ -hybridiorbitaalit. Piirrä muodostuva orbitaalirakenne hiiliatomin ympärille. [Kiinnitä huomiota orbitaalien suuntiin ja vaiheisiin]
- Piirrä kaksi a) kohdan hiiltä niin, että kahden  $sp^2$ -hybridiorbitaalin vuorovaikutuksesta hiilten välille muodostuu  $\sigma$ -sidos. Merkitse  $\sigma$ -sidos piirroksen.
- Täydennä b)-kohdan piirrokseen kahden p-orbitaalin vuorovaikutuksesta syntyvä  $\pi$ -sidos. Merkitse  $\pi$ -sidos piirroksen. [Kiinnitä huomiota orbitaalien suuntiin ja vaiheisiin]
- Täydennä c)-kohdan piirrosta niin, että jäljelle jäävät  $sp^2$ -hybridiorbitaalit vuorovaikuttavat vetyjen 1s-orbitaalien kanssa muodostaen  $\sigma$ -sidokset. Merkitse  $\sigma$ -sidokset piirrokseen.

4. Orgaaninen kemia voidaan esittää *kuuden kanonisen orbitaalien avulla*. Kanonisten orbitaalien tunnistaminen helpottaa viivakaavojen muuttamista orbitaaliesityksiksi.

- Luokittele seuraavat orbitaalit kanonisiin  $\sigma$ ,  $\sigma^*$ ,  $\pi$ ,  $\pi^*$ , p tai n -tyyppisiin ja perustele luokittelu. [n = ei-sidokseen osallistuva miehitetty orbitaali, yleensä e-pari, p = ei-sidokseen osallistuva tyhjä orbitaali, yleensä miehittämätön p-orbitaali]
- Luokittele orbitaalit sitoviksi, hajottaviksi tai ei-sitoviksi, perustele. [Tutki vaihetta ja solmukohtia]
- Oletetaan, että molekyylit ovat matalimman energian tilassa, ovatko orbitaalit täysiä vai tyhjiä?



5. Alleenit ovat yhdisteitä, joissa kaksi kaksoissidosta on ketjuttunut.



Huom: • tarkoittaa hiiliatomia

### alleeni

- Tutki alleenille kvanttikemiallisesti laskettua 3D-rakennetta. Mikä on kahden metyleenin (CH<sub>2</sub>) välinen avaruudellinen riippuvuus? Miten tämä poikkeaa esimerkiksi eteenistä (tehtävä 3)?
- Mikä on paras hybridisaatio kuvaamaan alleenin hiiliatomeja? [Vihje: keskimäinen hiiliatomi on paras sp-hybridisoida]
- Rakenna b)-vastauksen perusteella valenssisidosorbitaalikuvaus alleenille (leimaa  $\pi$ ,  $\sigma$ , n, p, piirrä orbitaalien muodot 3D:nä)