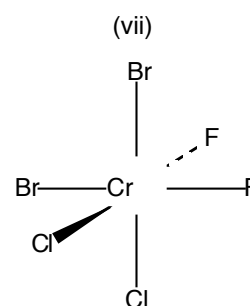
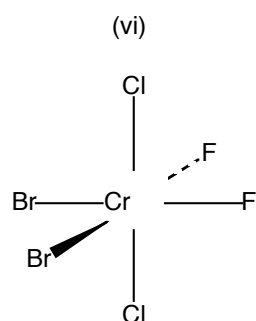
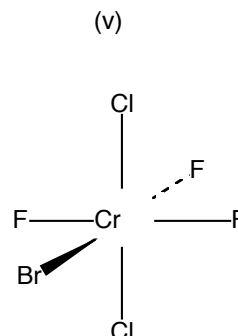
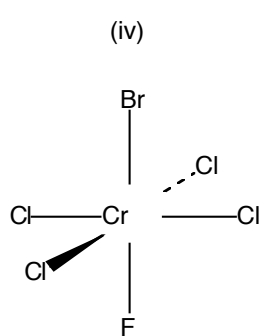
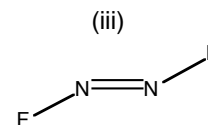
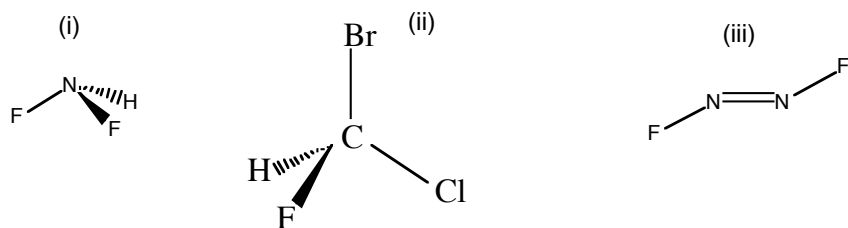


## 4 VOORBEELDTENTAMEN TC 3

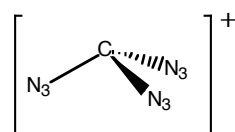
Vergeet niet uw antwoorden goed te motiveren!

### 1. Moleculaire puntgroepen

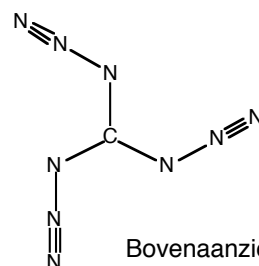
Tot welke puntgroepen behoren de volgende moleculen:



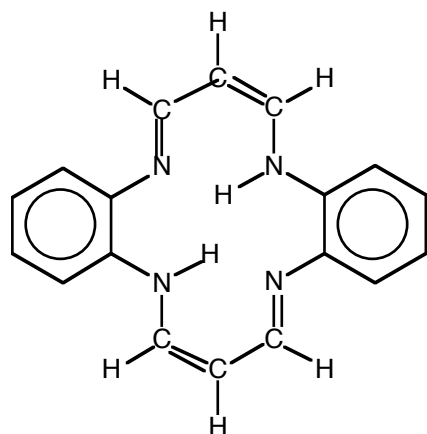
(viii)



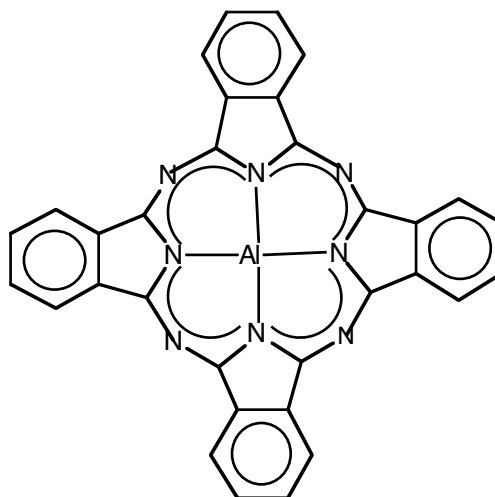
Zijaanzicht



Bovenaanzicht



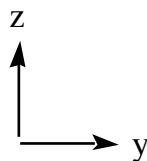
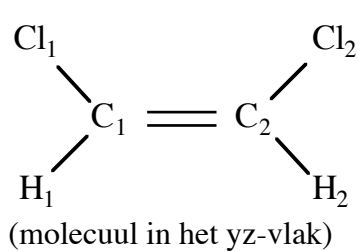
(vlak)



(vlak)

## 2. Symmetriefuncties

a) Geef de symmetrie-aangepaste combinaties van atomaire orbitalen voor het molecuul:



Alleen de volgende atomaire functies hoeven bekeken te worden:

$H(1s)$ ,  $C(2s)$ ,  $C(2p_x, 2p_y, 2p_z)$ ,  $Cl(3p_x, 3p_y, 3p_z)$ .

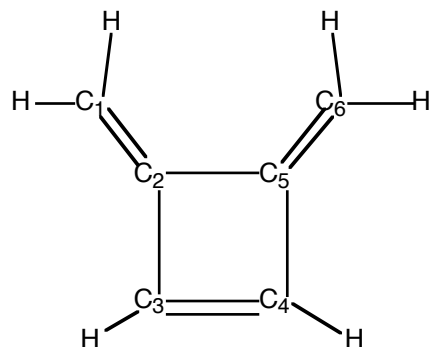
Gegeven is de  $C_{2v}$ -karaktertabel:

	E	$C_2(z)$	$\sigma_v(xz)$	$\sigma_v'(yz)$
A1	1	1	1	1
A2	1	1	-1	-1
B1	1	-1	1	-1
B2	1	-1	-1	1

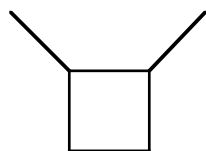
b) Tot welke symmetrie-typen behoren de functies  $x$ ,  $y$  en  $z$ ? Leg aan de hand hiervan uit dat twee componenten van het elektrisch dipoolmoment nul zijn.

### 3. Hückel-theorie

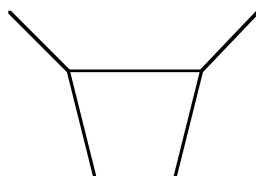
- a) Bereken met de Hückel-methode de energieniveaus en de golf functies van de neutrale vlakke geconjugeerde koolwaterstof (zie hieronder):  
 Hint: Dit is een even alternerende koolwaterstof.  
 Gegeven:  $E = \alpha + 0.55 \beta$  is een oplossing.



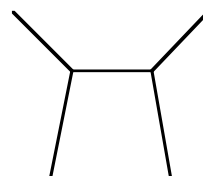
- b) Bereken de  $\pi$ -bindingsordes  $P_{25}$  en  $P_{34}$ .
- c) Wat is op grond hiervan de meest waarschijnlijke structuur voor dit molecuul.



A

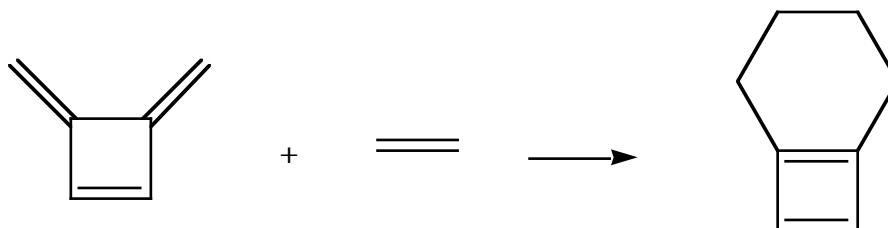


B



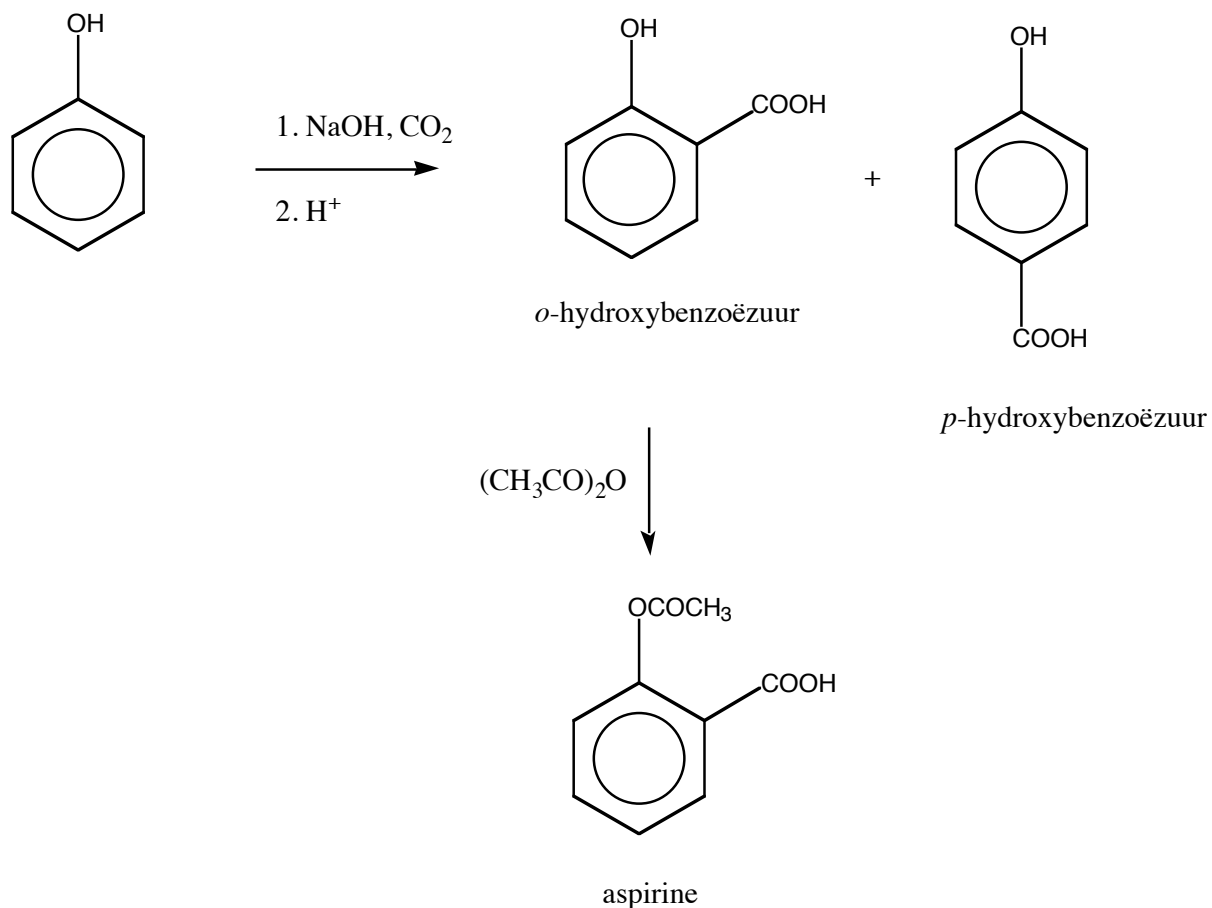
C

- d) Leg in detail uit met behulp van frontier orbital theorie of de onderstaande ringsluitingsreactie thermisch dan wel fotochemisch zal plaatsvinden.



#### 4. Reactiviteit

De eerste stap in de hieronder weergegeven synthese van aspirine is een electrofiële substitutie van  $\text{CO}_2$  aan fenol.



Leg uit met behulp van moleculaire orbital theorie waarom bij de bovenstaande reactie het *m*-hydroxybenzoëzuur niet ontstaat.