

Θεωρία μοριακών τροχιακών

ΣΚΟΠΟΣ

Σκοπός αυτής της ενότητας είναι να γνωρίσουμε τις βασικές αρχές της θεωρίας των μοριακών τροχιακών και πώς αυτή εφαρμόζεται στην ερμηνεία των δεσμών σε απλά μόρια.

Προσδοκώμενα αποτελέσματα

Όταν θα έχετε μελετήσει αυτή την ενότητα, θα μπορείτε να:

- ❖ Αναφέρετε τα βασικά σημεία της θεωρίας των μοριακών τροχιακών (θεωρίας ΜΟ).
- ❖ Περιγράψετε τον σχηματισμό απλών διατομικών ομοπυρηνικών μορίων βάσει της θεωρίας ΜΟ, σχεδιάζοντας τα αντίστοιχα διαγράμματα ΜΟ.
- ❖ Διακρίνετε μεταξύ αμιγών ατομικών, υβριδικών, δεσμικών, αντιδεσμικών και μη δεσμικών μοριακών τροχιακών.
- ❖ Εξάγετε συμπεράσματα από το διάγραμμα ΜΟ ενός διατομικού μορίου σχετικά με την ισχύ του δεσμού και τις μαγνητικές ιδιότητες του μορίου.
- ❖ Χρησιμοποιείτε απεντοπισμένα μοριακά τροχιακά, προκειμένου να ερμηνεύετε π συστήματα δεσμών σε πολυατομικά μόρια, όπως το όζον και το βενζόλιο.

Έννοιες κλειδιά

- ❖ Αντιδεσμικά μοριακά τροχιακά
- ❖ Δεσμικά μοριακά τροχιακά
- ❖ Ετεροπυρηνικά διατομικά μόρια
- ❖ Θεωρία μοριακών τροχιακών
- ❖ Ομοπυρηνικά διατομικά μόρια
- ❖ Τάξη δεσμού

Ebbing – Gammon (Ενότητες)

10.5 Αρχές της θεωρίας μοριακών τροχιακών

10.6 Ηλεκτρονικές δομές διατομικών μορίων των στοιχείων της δεύτερης περιόδου

10.7 Μοριακά τροχιακά και απεντοπισμένοι δεσμοί

Ο παραμαγνητισμός του O_2 και η αδυναμία ερμηνείας του από τη Θεωρία VB (Valence Bond)

Θεωρία VB: κάθε μόριο με άρτιο αριθμό ηλεκτρονίων θα έπρεπε να είναι διαμαγνητικό (να μην έλκεται από μαγνήτη), επειδή τα e είναι συζευγμένα και έχουν αντίθετα spin.



Το O_2 (16 e) είναι παραμαγνητικό!

Το υγρό οξυγόνο, O_2 , που χύνεται ανάμεσα στους πόλους ενός ισχυρού μαγνήτη κολλάει πάνω σ' αυτούς δείχνοντας ότι είναι παραμαγνητικό.

Ο παραμαγνητισμός του οξυγόνου, ο οποίος δεν μπορεί να ερμηνευθεί από τη θεωρία VB, ερμηνεύεται εύκολα από τη θεωρία των μοριακών τροχιακών.⁴

10.5 Θεωρία μοριακών τροχιακών (Θεωρία ΜΟ)

Βασική ιδέα: Τα e ενός μορίου δεν εντοπίζονται στην περιοχή ορισμένων πυρήνων, αλλά είναι αποκεντρωμένα σε όλο τον χώρο γύρω από τους πυρήνες των ατόμων.

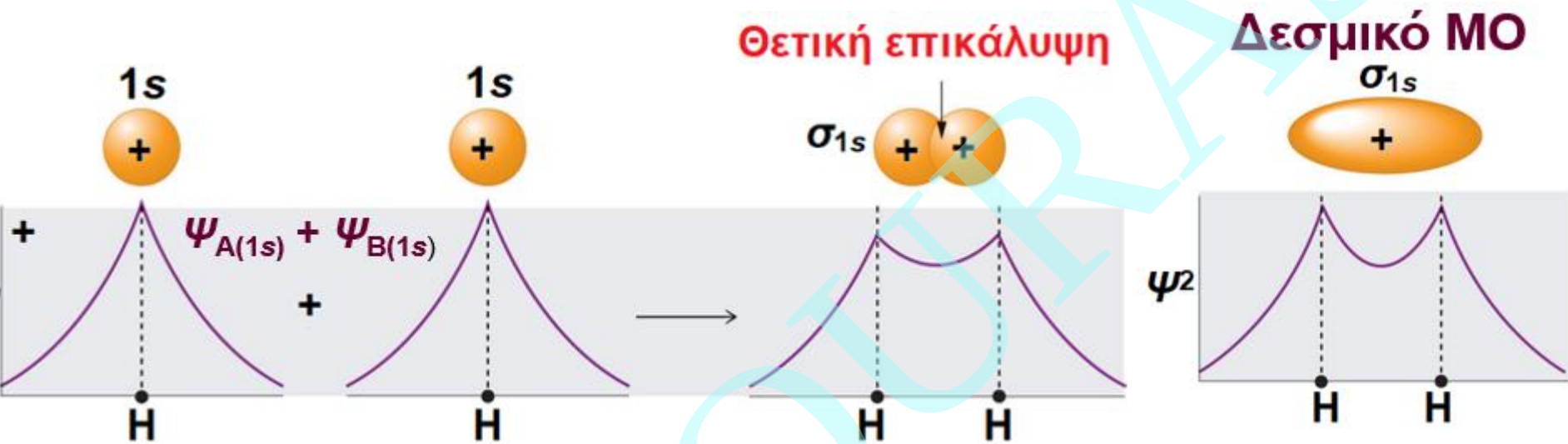
Δηλαδή, τα e δεν βρίσκονται πλέον σε ατομικά τροχιακά που ανήκουν σε συγκεκριμένους πυρήνες, αλλά σε μοριακά τροχιακά (ΜΟ) που εκτείνονται σε ολόκληρο το μόριο.

Κύρια σημεία της θεωρίας ΜΟ

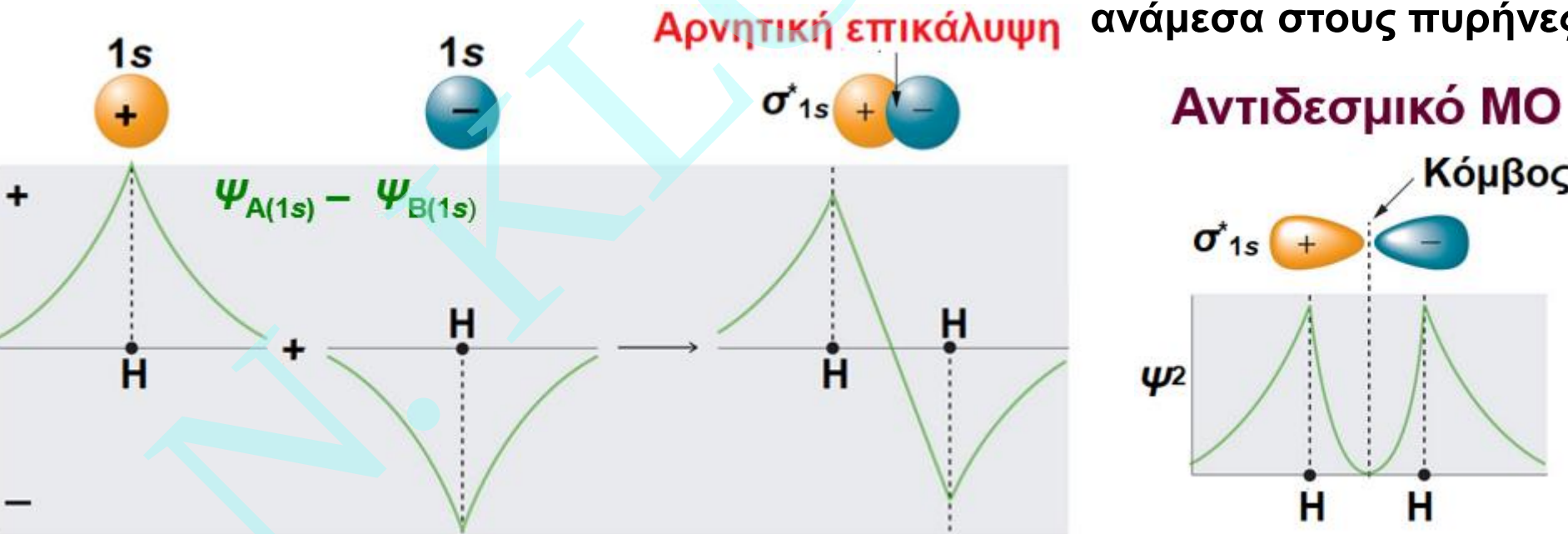
1. Η θεωρία ΜΟ βλέπει την ηλεκτρονική δομή των μορίων με τον ίδιο τρόπο που βλέπει και την ηλεκτρονική δομή των ατόμων.
2. Κάθε μοριακό τροχιακό έχει μια ορισμένη ενέργεια.
3. Για να λάβουμε τη θεμελιώδη κατάσταση ενός μορίου, τοποθετούμε τα ηλεκτρόνια στα χαμηλότερης ενέργειας τροχιακά, ακολουθώντας την απαγορευτική αρχή του Pauli, όπως ακριβώς στα άτομα.
4. Δεσμικά ονομάζουμε τα ΜΟ που είναι πυκνά ανάμεσα στους δύο πυρήνες και τα συμβολίζουμε με σ (σίγμα).
5. Αντιδεσμικά ονομάζουμε τα ΜΟ που είναι πυκνά σε άλλες περιοχές, πλην της περιοχής μεταξύ των δύο πυρήνων. Τα συμβολίζουμε με σ^* .
6. Για τη δημιουργία των δεσμικών και αντιδεσμικών ΜΟ, χρησιμοποιείται η μέθοδος LCAO (Linear Combination of Atomic Orbitals)

Τι είναι και πώς δημιουργούνται τα δεσμικά και αντιδεσμικά ΜΟ

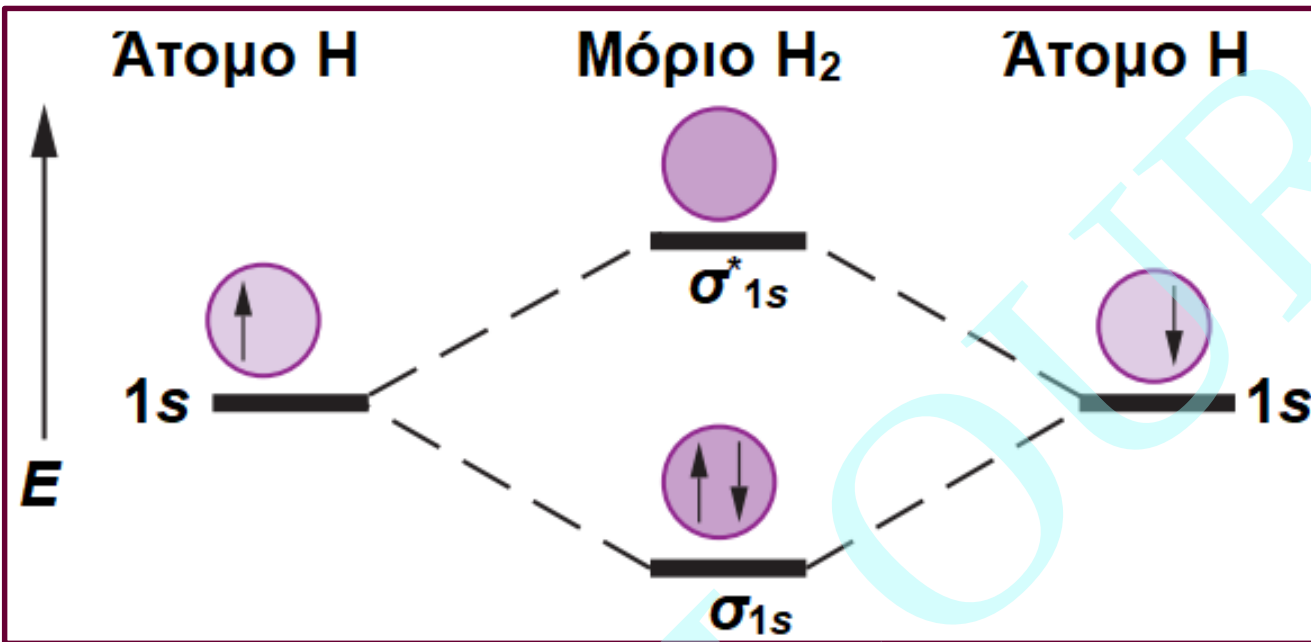
α. Συνδυασμός κυματικών συναρτήσεων για το σ_{1s} του H_2 (Μέθοδος LCAO)



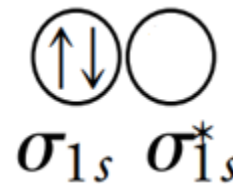
β. Συνδυασμός κυματικών συναρτήσεων για το σ^*_{1s} Ηλεκτρονική πυκνότητα ανάμεσα στους πυρήνες



Τι είναι το διάγραμμα ενεργειακών επιπέδων των μοριακών τροχιακών (διάγραμμα MO). Τάξη δεσμού



Εναλλακτική απεικόνιση του
διαγράμματος MO του H₂



Σχετικές ενέργειες
των τροχιακών 1s
των δύο ατόμων H
και των μοριακών
τροχιακών σ_{1s} και
σ*_{1s} του H₂

Τα δύο βέλη
δηλώνουν κατάληψη
του σ_{1s} από
ηλεκτρόνια στη
θεμελιώδη
κατάσταση του H₂

$$\text{Τάξη δεσμού (τ.δ.)} = \frac{1}{2}(n_b - n_a)$$

n_b = αριθμός δεσμικών ηλεκτρονίων

n_a = αριθμός αντιδεσμικών ηλεκτρονίων

$$\text{τ.δ. (H}_2\text{)} = (2 - 0)/2 = 1 \text{ (απλός δεσμός H-H)}$$

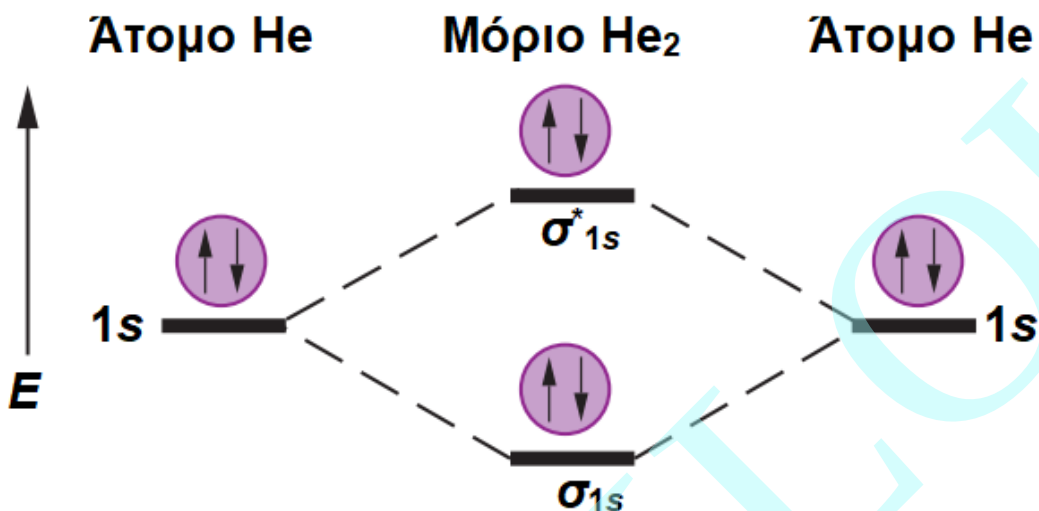
Η τ.δ. δεν χρειάζεται
να είναι ακέραιος
αριθμός!!!

Παράδειγμα 10.8

Διαπίστωση ύπαρξης ή μη, χημικών ειδών βάσει της θεωρίας ΜΟ

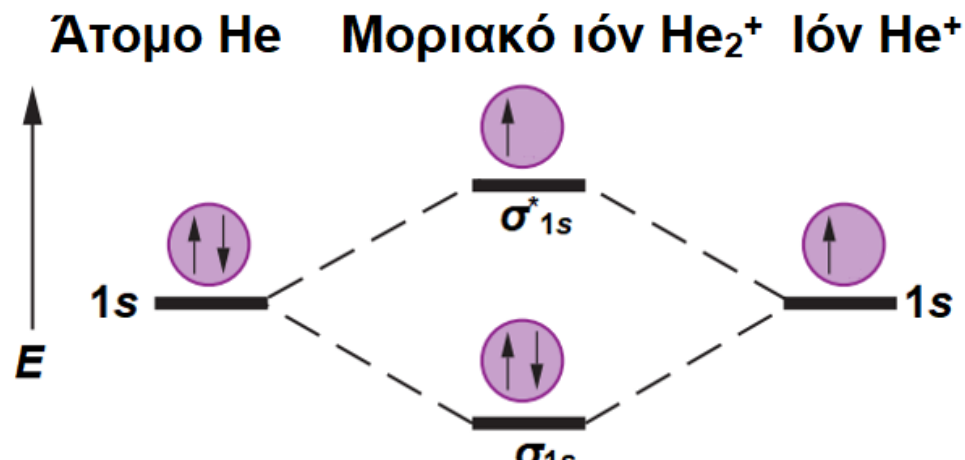
Να δειχθεί, με τη βοήθεια της θεωρίας ΜΟ, ότι η ύπαρξη του μορίου He_2 είναι μη πιθανή, ενώ η ύπαρξη του ιόντος He_2^+ είναι δυνατή.

Απάντηση



Διάγραμμα ΜΟ του $\text{He}_2 \Rightarrow$
τάξη δεσμού = $\frac{1}{2}(2 - 2) = 0$
 $\Rightarrow$ μόριο He_2 ανύπαρκτο.

Διάγραμμα ΜΟ του $\text{He}_2^+ \Rightarrow$
τάξη δεσμού =
 $\frac{1}{2}(2 - 1) = 0,5 (> 0)$
 $\Rightarrow$ ιόν He_2^+ πιθανό.



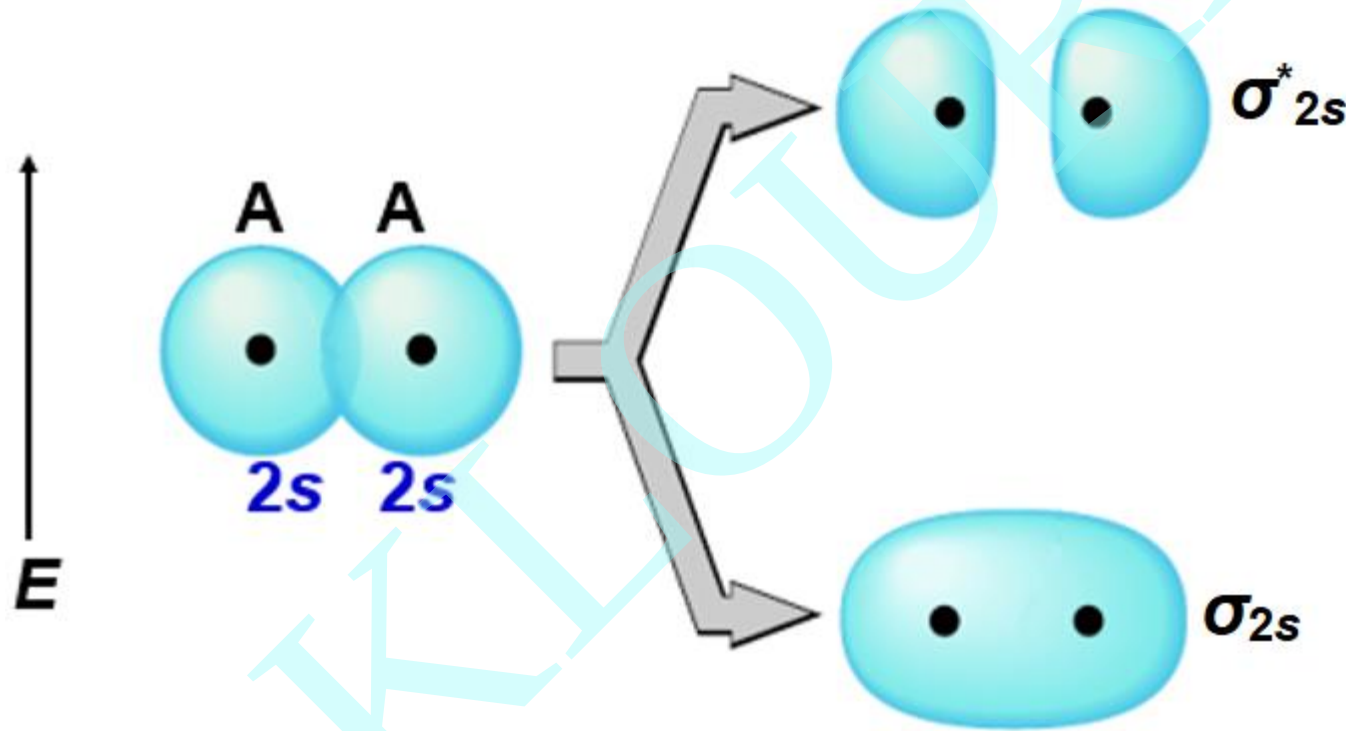
Έξι κανόνες για την κατασκευή διαγραμμάτων ΜΟ για διατομικά μόρια της 2ης περιόδου

1. Ο αριθμός των ΜΟ που σχηματίζονται, ισούται με τον αριθμό των συνδυαζόμενων ατομικών τροχιακών (ΑΟ).
2. Τα ΑΟ συνδυάζονται (επικαλύπτονται) με άλλα τροχιακά παρόμοιας ενέργειας, άσχετα αν τα τροχιακά αυτά περιέχουν ή όχι ηλεκτρόνια και πόσα.
3. Όσο μεγαλύτερη είναι η έκταση της επικάλυψης δύο τροχιακών, τόσο σταθερότερο (δηλαδή χαμηλότερης ενέργειας) είναι το δεσμικό ΜΟ και τόσο ασταθέστερο (δηλαδή υψηλότερης ενέργειας) το αντιδεσμικό ΜΟ.
4. Κάθε ΜΟ μπορεί να δεχθεί το πολύ δυο ηλεκτρόνια με αντίθετα spin (απαγορευτική αρχή του Pauli).
5. Σε ΜΟ της ίδιας ενέργειας (εκφυλισμένα τροχιακά) τα ηλεκτρόνια τοποθετούνται αρχικά ένα-ένα με παράλληλα spin (κανόνας του Hund).
6. Τα ΜΟ σ_{1s} και σ_{1s}^* θα είναι συμπληρωμένα με τέσσερα e και δεν συνεισφέρουν στον σχηματισμό του δεσμού, οπότε δεν τα λαμβάνουμε υπ' όψιν και συγκεντρώνουμε την προσοχή μας στα τροχιακά 2s και 2p του φλοιού σθένους.

10.6 Ομοπυρηνικά διατομικά μόρια της 2ης περιόδου

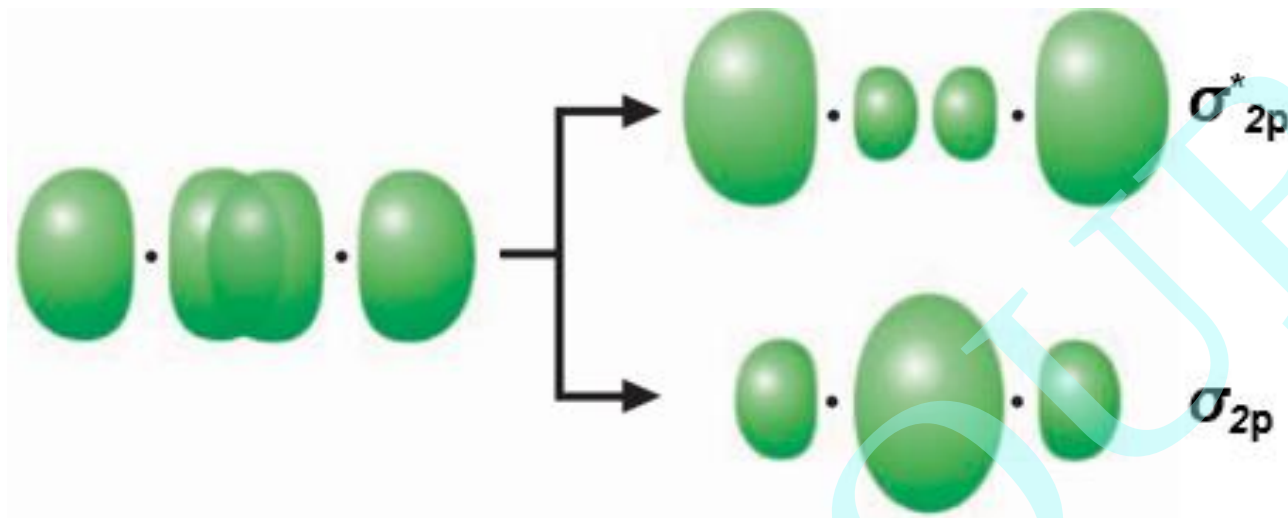
Τροχιακά σθένους: ένα $2s$ και τρία $2p$

(α) Επικάλυψη ή αλληλεπίδραση των τροχιακών σθένους $2s$

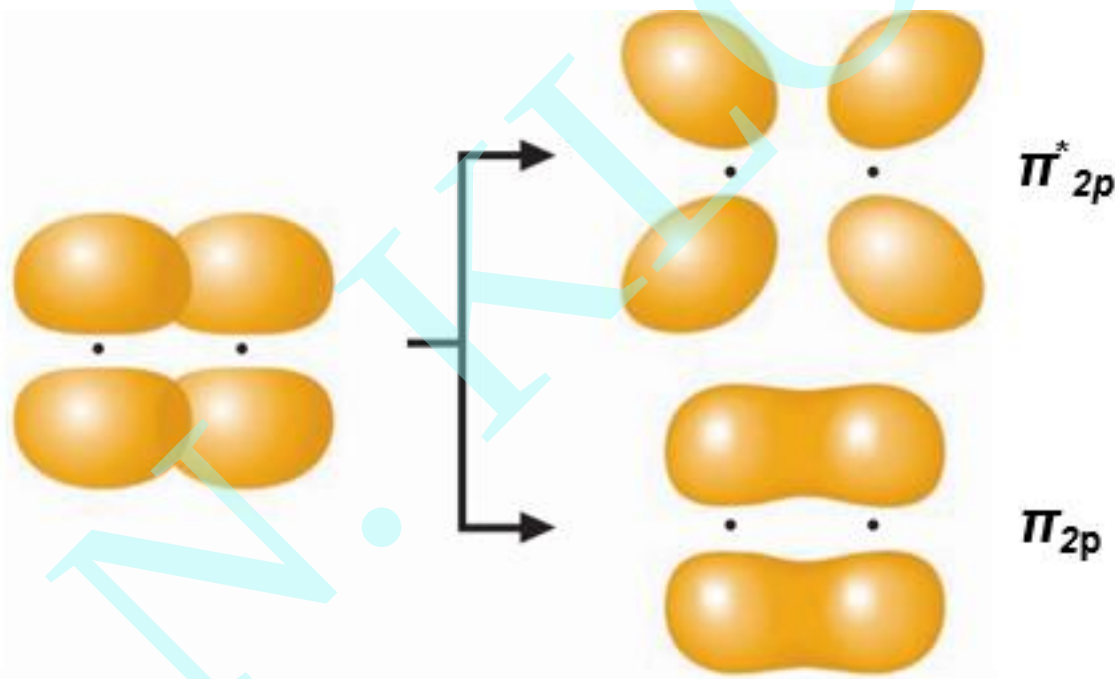


Τα τροχιακά $2s$ των δύο ατόμων A συνδυάζονται, όπως ακριβώς και τα $1s$ που είδαμε στον σχηματισμό του μορίου του υδρογόνου, και δίνουν ένα δεσμικό MO σ_{2s} και ένα αντιδεσμικό σ_{2s}^* .

(β) Οι δύο διαφορετικοί τρόποι με τους οποίους
μπορούν να αλληλεπιδράσουν τα τροχιακά $2p$

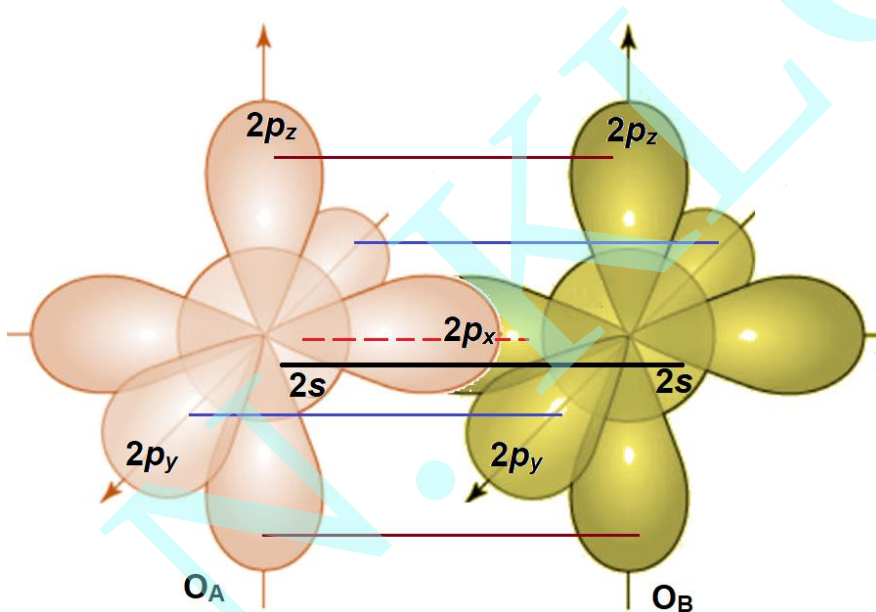
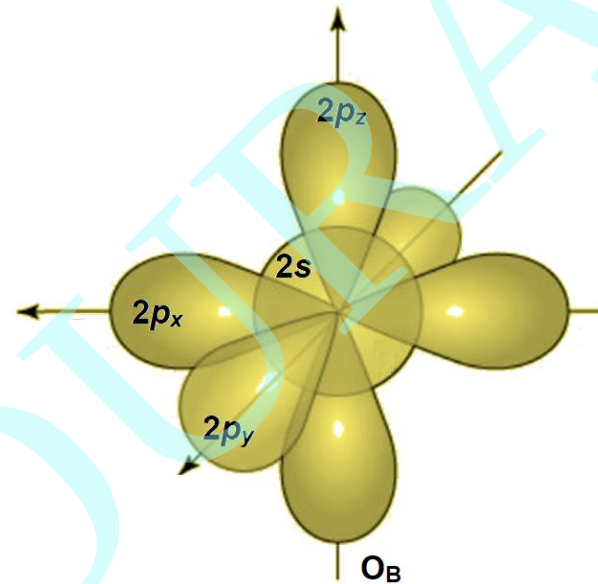
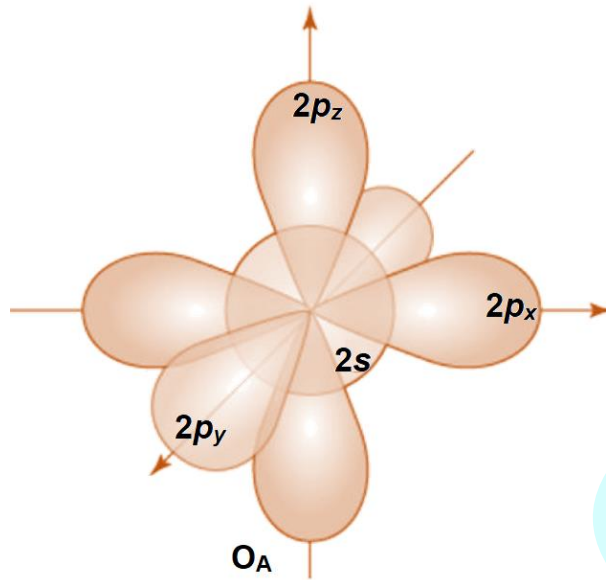


1. Με επικάλυψη
κατά μήκος των
αξόνων
σχηματίζονται τα
μοριακά τροχιακά
 σ_{2p} και σ_{2p}^*



2. Με επικάλυψη
από πλάγιες θέσεις
σχηματίζονται τα
μοριακά τροχιακά
 π_{2p} και π_{2p}^*

(γ) Κατάταξη των οκτώ ΜΟ κατά σειρά αυξανόμενης ενέργειας



Όλοι οι δυνατοί συνδυασμοί των τροχιακών σθένους δύο ατόμων της 2ης Περιόδου (π.χ. O)

Από $4 + 4 = 8$ ατομικά τροχιακά σχηματίζονται 8 ΜΟ.

(γ) Κατάταξη των οκτώ MO κατά σειρά αυξανόμενης ενέργειας

1. Τα MO σ_{2s} και σ_{2s}^* θα έχουν τη χαμηλότερη ενέργεια από κάθε MO που προκύπτει από συνδυασμούς των $2p$ AO, αφού τα $2s$ AO βρίσκονται ενεργειακά χαμηλότερα από τα $2p$. Μεταξύ των MO σ_{2s} και σ_{2s}^* , ενεργειακά υψηλότερα θα βρίσκεται ασφαλώς το αντιδεσμικό σ_{2s}^*
2. Το σ_{2p} θα βρίσκεται υψηλότερα από τα σ_{2s} και σ_{2s}^* , αφού τα $2p$ βρίσκονται υψηλότερα από το $2s$
3. Τα δύο δεσμικά MO π_{2p} , σχηματίζονται με τον ίδιο ακριβώς τρόπο, γι' αυτό έχουν την ίδια ενέργεια, δηλαδή είναι ενεργειακά εκφυλισμένα. Το ίδιο ισχύει προφανώς και για το ζεύγος των αντιδεσμικών MO π_{2p}^*
4. Ως προς το σ_{2p} τροχιακό, τα π_{2p} και π_{2p}^* θα είναι ασταθέστερα, δηλαδή ενεργειακά θα βρίσκονται υψηλότερα, αφού η επικάλυψη από πλευρικές θέσεις γίνεται σε μικρότερη έκταση, απ' ό,τι η επικάλυψη κατά μήκος του διαπυρηνικού άξονα. Ανάλογα, το σ_{2p}^* MO θα είναι σε υψηλότερο ενεργειακό επίπεδο από τα π_{2p}^* MO

Έτσι, οι σχετικές ενέργειες των 8 MO θα είναι:

$$\sigma_{2s} < \sigma_{2s}^* < \sigma_{2p} < \pi_{2p} = \pi_{2p} < \pi_{2p}^* = \pi_{2p}^* < \sigma_{2p}^*$$

Προσοχή! Η σειρά αυτή ισχύει μόνο για τα μόρια F_2 και O_2

Παράδειγμα 10.9

Ποια είναι η τάξη δεσμού και οι μαγνητικές ιδιότητες του μορίου O_2 ;

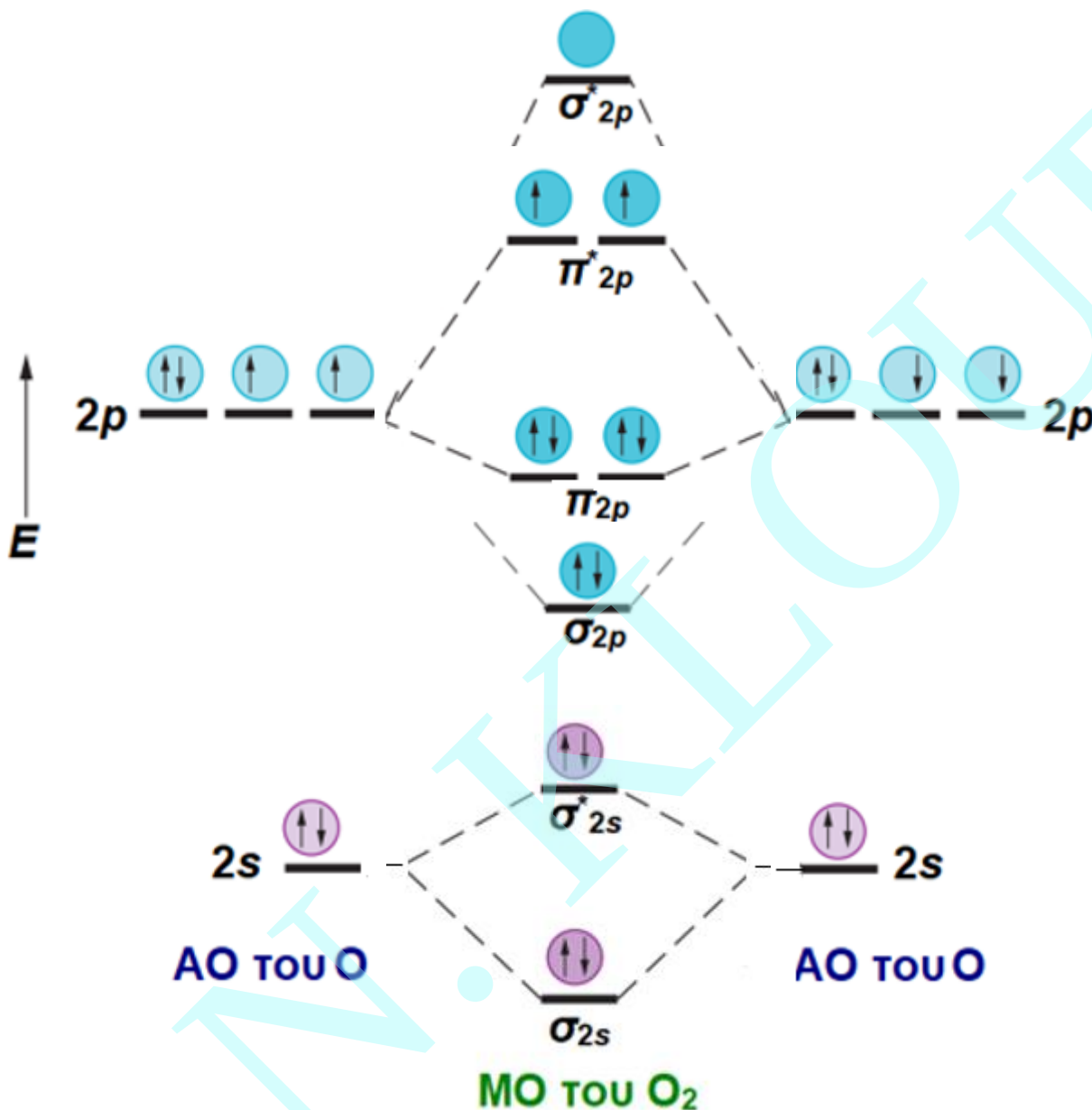
Απάντηση

12 e σθένους στο O_2 (6 e από κάθε άτομο), καταλαμβάνουν τα MO με τον τρόπο που δείχνει το διπλανό διάγραμμα τροχιακών.

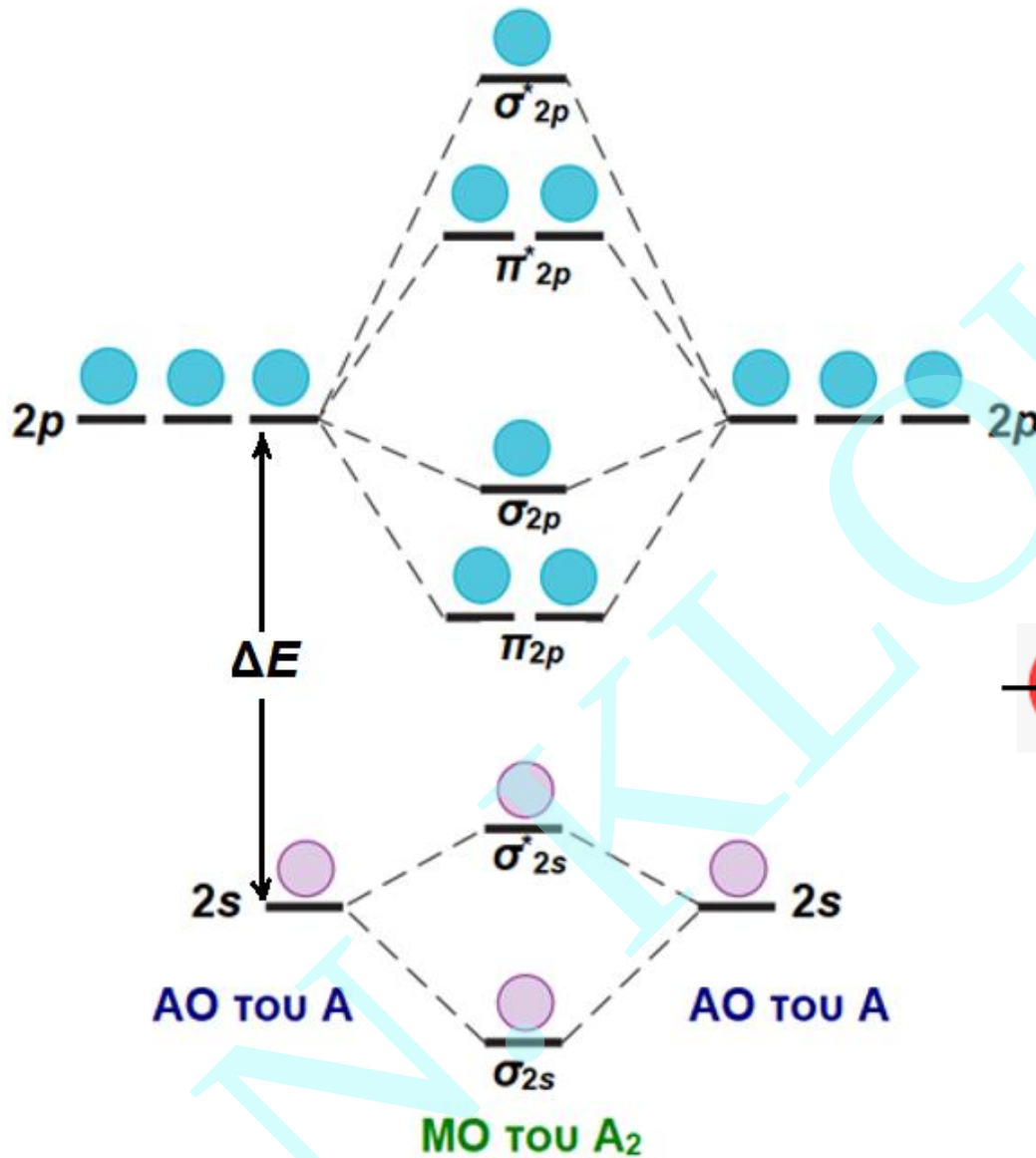
Υπάρχουν δύο μονήρη e στα αντιδεσμικά τροχιακά $\pi^*_{2p} \Rightarrow$ το μοριακό οξυγόνο είναι παραμαγνητικό.

Υπάρχουν 8 δεσμικά και 4 αντιδεσμικά ηλεκτρόνια $\Rightarrow$ τάξη δεσμού = $\frac{1}{2}(8 - 4) = 2$ (διπλός δεσμός).

Ηλεκτρονική δομή του O_2 με συμπυκνωμένη μορφή $(\sigma_{2s})^2(\sigma^*_{2s})^2(\sigma_{2p})^2(\pi_{2p})^4(\pi^*_{2p})^2$



Ενεργειακό διάγραμμα MO για τα ομοπυρηνικά διατομικά μόρια της 2ης περιόδου (πλην F_2 και O_2)



Το διάγραμμα αυτό ισχύει για τα μόρια Li_2 , Be_2 , B_2 , C_2 και N_2 ($Z \leq 7$) για τα οποία η ΔE ανάμεσα στα ατομικά τροχιακά 2s και 2p είναι μικρή.

Πέραν της κύριας επικάλυψης 2s - 2s, υπάρχει και μια αλληλεπίδραση 2s - 2p η οποία εξασθενίζει την 2p - 2p.



Σε τι διαφέρει αυτό το διάγραμμα από το προηγούμενο;

Το τροχιακό σ_{2p} βρίσκεται ενεργειακά υψηλότερα από τα τροχιακά π_{2p}

Παράδειγμα 10.10

Ποια είναι η τάξη δεσμού και οι μαγνητικές ιδιότητες του μορίου N_2 ;

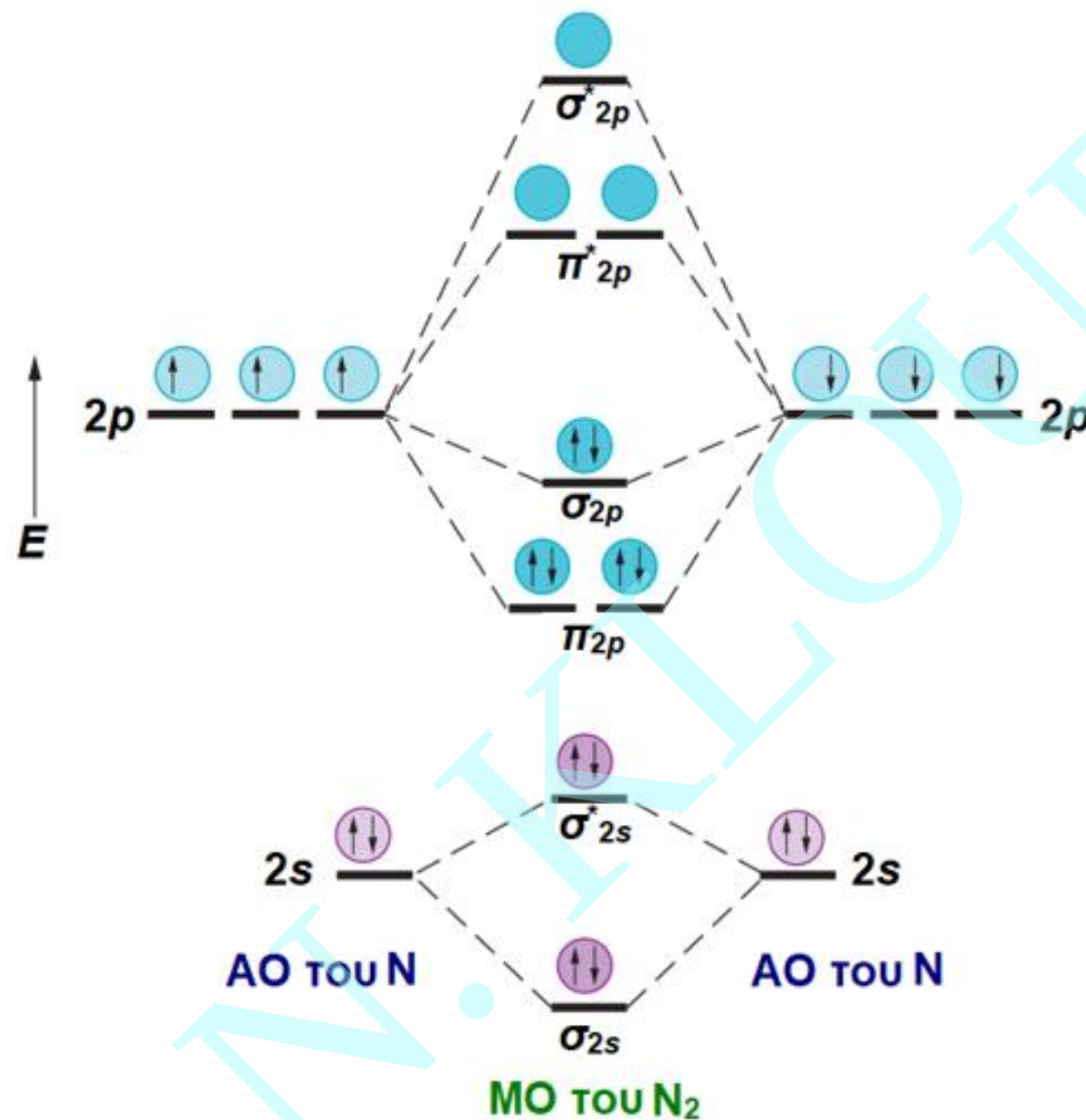
Απάντηση

10 e σθένους στο N_2 (5 e από κάθε άτομο), καταλαμβάνουν τα MO με τον τρόπο που δείχνει το διπλανό διάγραμμα τροχιακών.

Δεν υπάρχουν μονήρη e στα MO $\Rightarrow$ το μοριακό άζωτο είναι διαμαγνητικό.

Υπάρχουν 8 δεσμικά και 2 αντιδεσμικά ηλεκτρόνια $\Rightarrow$ τάξη δεσμού = $\frac{1}{2}(8 - 2) = 3$ (τριπλός δεσμός).

Ηλεκτρονική δομή του N_2 με συμπυκνωμένη μορφή $(\sigma_{2s})^2(\sigma_{2s}^*)^2(\pi_{2p})^4(\sigma_{2p})^2$



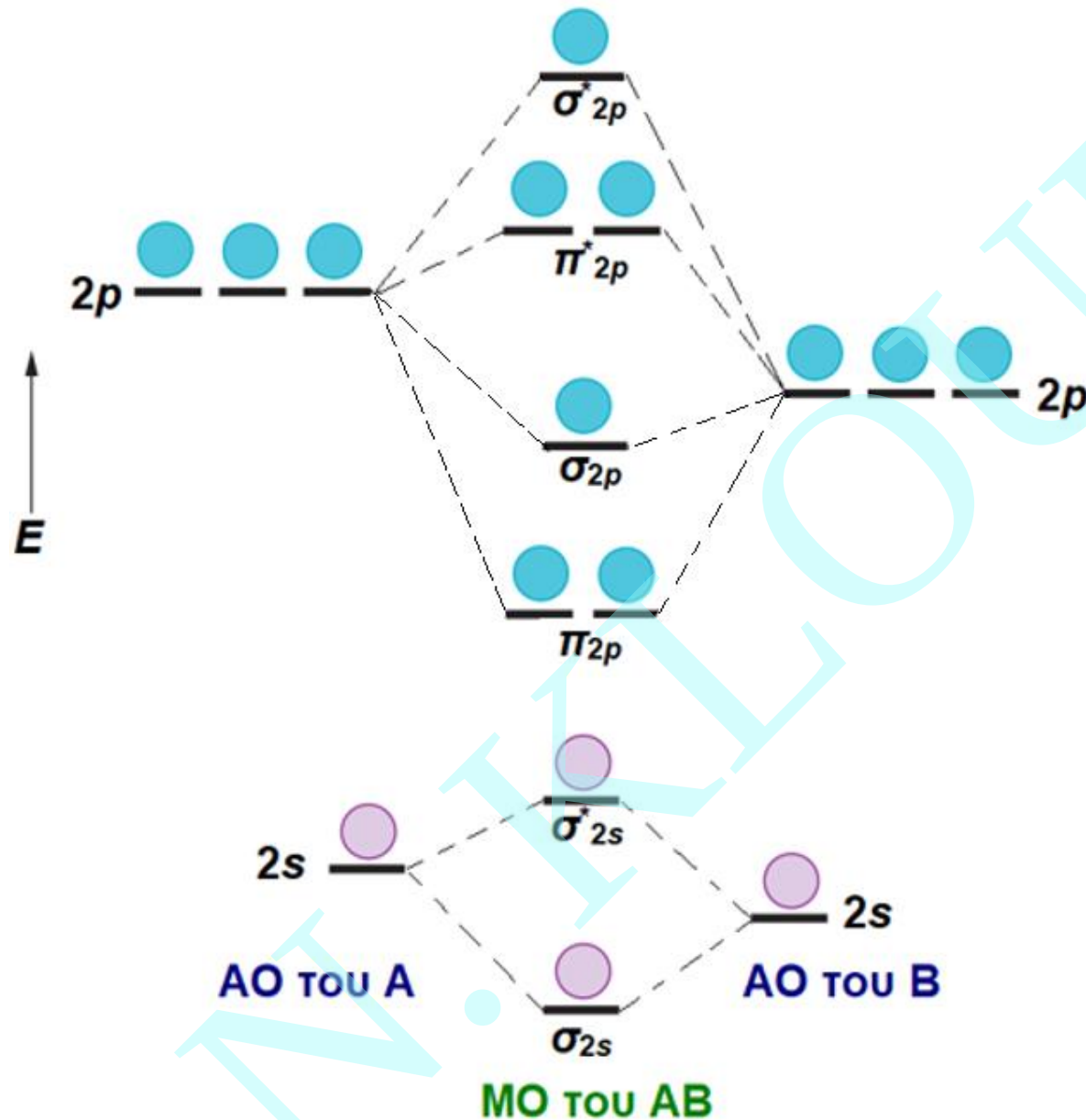
Δεσμικές ιδιότητες των ομοπυρηνικών διατομικών μορίων της 2ης περιόδου

Μόριο	Τάξη δεσμού	Μήκος δεσμού (pm)	Ενέργεια δεσμού (kJ/mol)	Μαγνητικός χαρακτήρας
Li ₂	1	267	110	διαμαγνητικό
Be ₂	0	το μόριο αυτό δεν μπορεί να υπάρξει		
B ₂	1	159	290	παραμαγνητικό
C ₂	2	131	620	διαμαγνητικό
N ₂	3	110	941	διαμαγνητικό
O ₂	2	121	495	παραμαγνητικό
F ₂	1	143	155	διαμαγνητικό
Ne ₂	0	το μόριο αυτό δεν μπορεί να υπάρξει		

Καθώς η τάξη δεσμού μεγαλώνει, το μήκος του δεσμού μικραίνει και η ενέργεια δεσμού τείνει να μεγαλώνει.

Ο μαγνητικός χαρακτήρας των μορίων που προσδιορίζεται πειραματικά, προβλέπεται σωστά από τη θεωρία ΜΟ.

Ενεργειακό διάγραμμα ΜΟ για ετεροπυρηνικά διατομικά μόρια AB



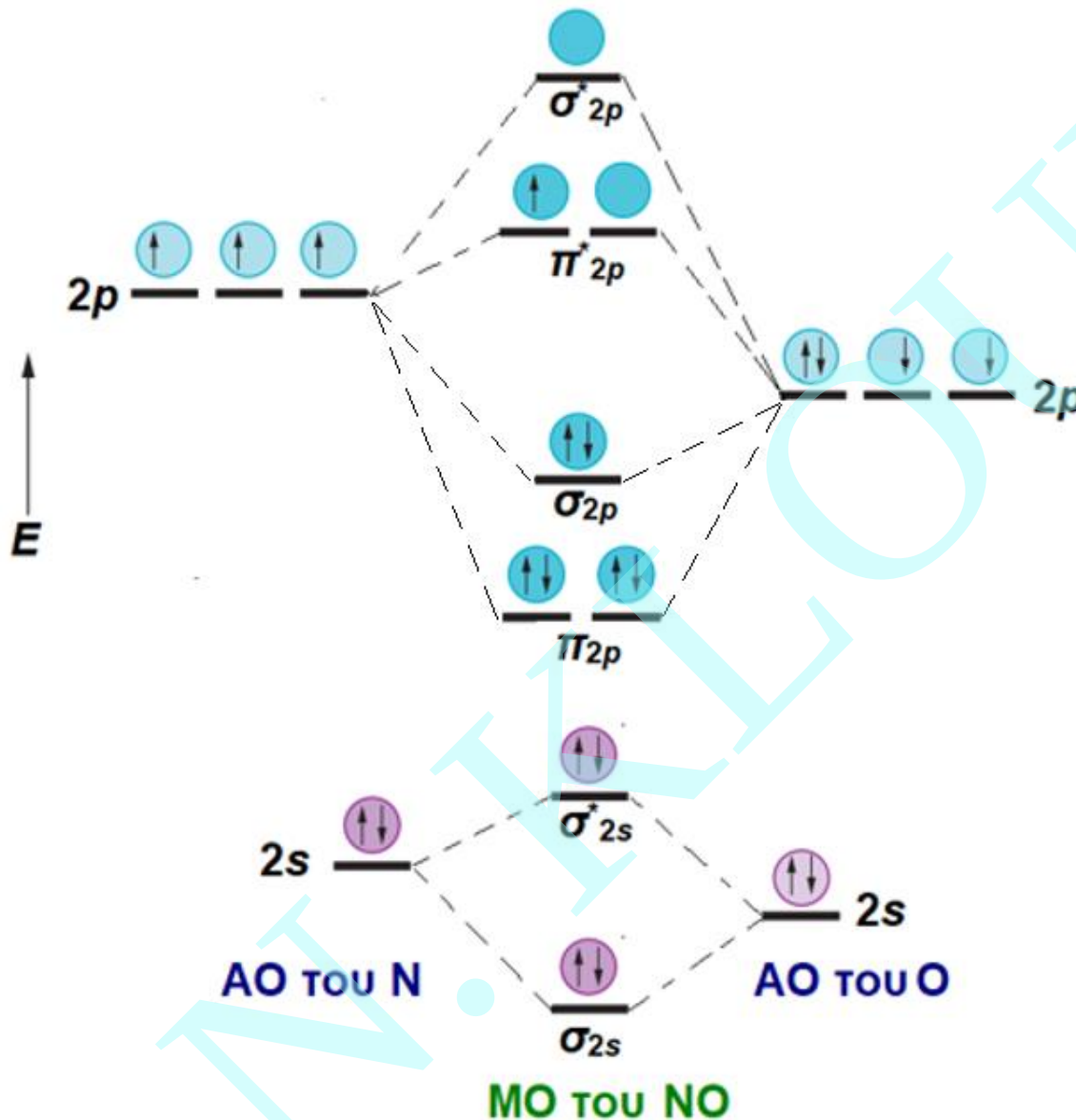
Ετεροπυρηνικά: μόρια από διαφορετικά άτομα, π.χ. το HF, LiH, CO, NO

Για διατομικά μόρια του τύπου AB στοιχείων της 2ης περιόδου, και εφόσον η διαφορά ηλεκτραρνητικότητας μεταξύ A και B δεν είναι σημαντική, ισχύει προσεγγιστικά το διπλανό διάγραμμα ΜΟ.

Το CO, με 10 e σθένους, έχει ηλεκτρονική δομή $(\sigma_{2s})^2(\sigma^*_{2s})^2(\pi_{2p})^4(\sigma_{2p})^2$ και τάξη δεσμού $(8-2)/2=3$

Παράδειγμα 10.11

Πρόβλεψη δεσμικών ιδιοτήτων βάσει του διαγράμματος ΜΟ



Δώστε το διάγραμμα τροχιακών και την ηλεκτρονική δομή του μονοξειδίου του αζώτου, NO. Προσδιορίστε τ.δ. και μαγνητικές ιδιότητες.

Απάντηση

Μόριο ετεροπυρηνικό, ΑΟ του Ο χαμηλότερα.

Ηλεκτρόνια σθένους 11

$$\text{τ.δ.} = 1/2 (8 - 3) = 2,5$$

Υπάρχει 1 ασύζευκτο $e \Rightarrow$ μόριο παραμαγνητικό

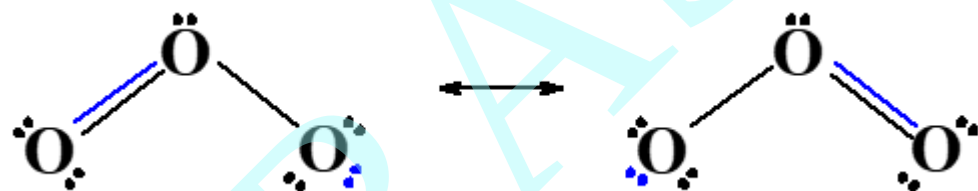
Ηλεκτρονική δομή του NO
 $(\sigma_{2s})^2(\sigma_{2s}^*)^2(\pi_{2p})^4(\sigma_{2p})^2(\pi_{2p}^*)^1$

10.7 Μοριακά τροχιακά και απεντοπισμένοι δεσμοί

Πώς περιγράφονται οι δεσμοί στο μόριο του όζοντος, O_3

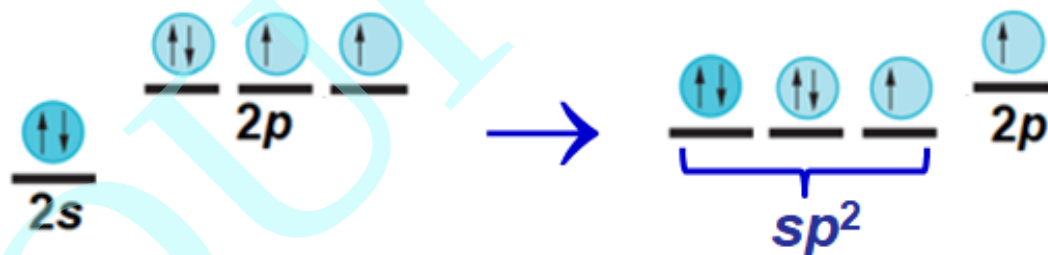
O_3 : 18 e σθένους

(α) Θεωρία δεσμού σθένους:
ερμηνεία με τύπους συντονισμού



(β) Θεωρία ΜΟ:

1. Ερμηνεία του σ σκελετού
με sp^2 υβριδικά τροχιακά
(Γιατί sp^2 ;)



Σχηματισμός ενός
σ δεσμού O–O από
επικάλυψη $sp^2 - sp^2$

Σχηματισμός ενός
σ δεσμού O–O από
επικάλυψη $sp^2 - sp^2$



14 e σθένους
για τον σ σκελετό

Για τον σ σκελετό:
Κάθε άτομο O διαθέτει
τρία sp^2 υβριδικά
τροχιακά, από τα οποία
το μεσαίο άτομο O
χρησιμοποιεί τα δύο για
να δημιουργήσει δύο
σ δεσμούς με τα δύο
ακραία άτομα O.

β. Θεωρία ΜΟ (συνέχεια)

2. Ερμηνεία του π δεσμού του μορίου του όζοντος με απεντοπισμένα π μοριακά τροχιακά

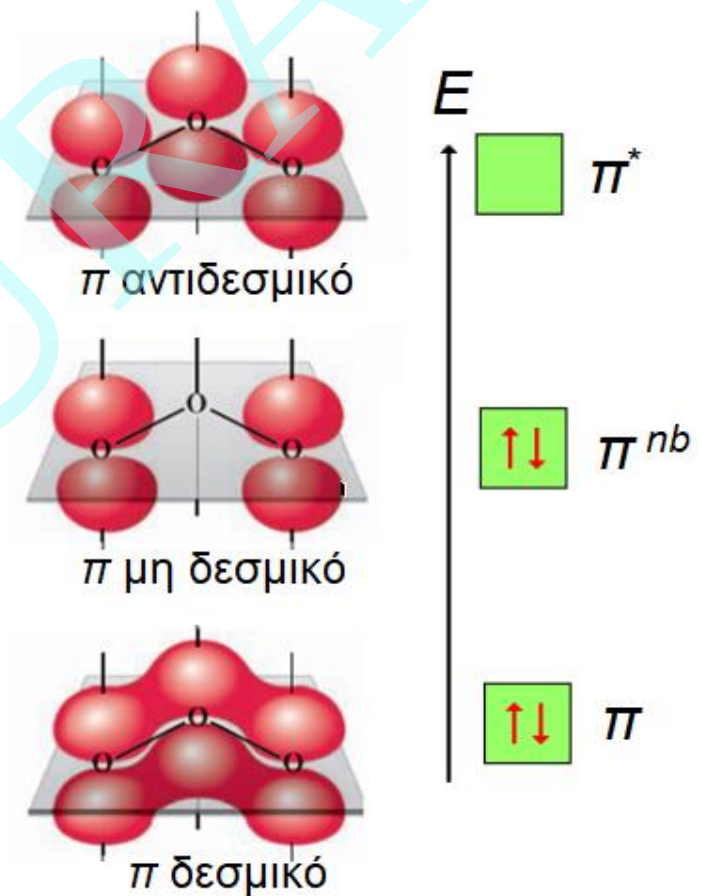
Κάθε άτομο Ο έχει και ένα ανυβριδοποίητο p τροχιακό, κάθετο στο επίπεδο των sp^2 υβριδικών τροχιακών.

Με επικάλυψη των τριών αυτών p τροχιακών σχηματίζονται τα ακόλουθα τρία π ΜΟ στο μόριο O_3

Στα τρία p τροχιακά υπάρχουν αδιάθετα $18 - 14 = 4$ ηλεκτρόνια

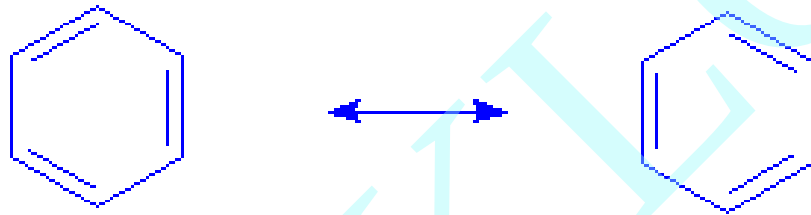
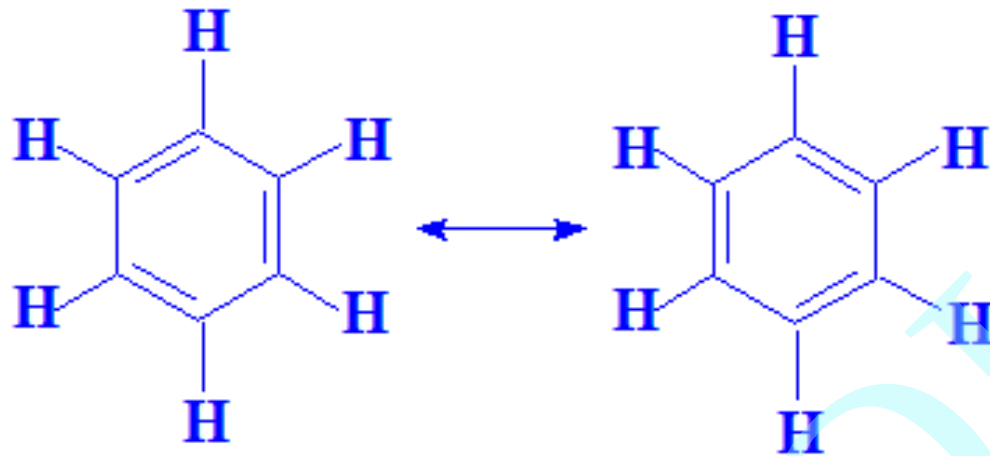
Από τα τέσσερα p ηλεκτρόνια, τα δύο καταλαμβάνουν το δεσμικό π ΜΟ και τα άλλα δύο το μη δεσμικό π ΜΟ. Το αντιδεσμικό ΜΟ είναι κενό.

Πόση είναι η τάξη του π δεσμού στο O_3 ;



Η ηλεκτρονική κατανομή των π μοριακών τροχιακών του O_3

Περιγραφή των δεσμών στο βενζόλιο, C_6H_6 , με τη βοήθεια μη εντοπισμένων π MO



Δομές συντονισμού του βενζολίου

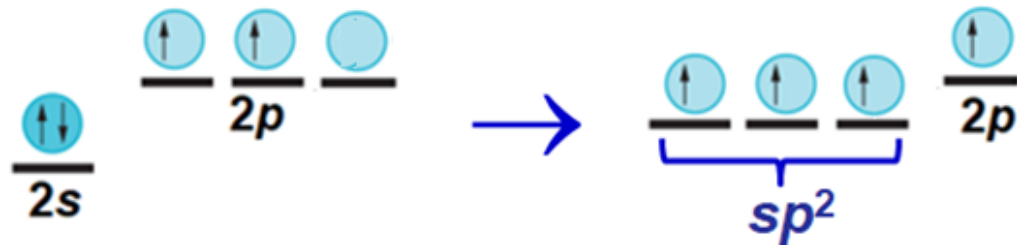
Η ισοτιμία των δεσμών στο βενζόλιο περιγράφεται από δύο ισοδύναμες δομές Lewis (ή δομές Kekulé)

Στο μόριο του βενζολίου, τα έξι άτομα C είναι ενωμένα μεταξύ τους σ' έναν επίπεδο εξαγωνικό δακτύλιο.

Κάθε άτομο C συνδέεται και με ένα άτομο H.

Όλες οι γωνίες των δεσμών C–C–C είναι 120° και όλοι οι δεσμοί C–C έχουν το ίδιο μήκος (140 pm).

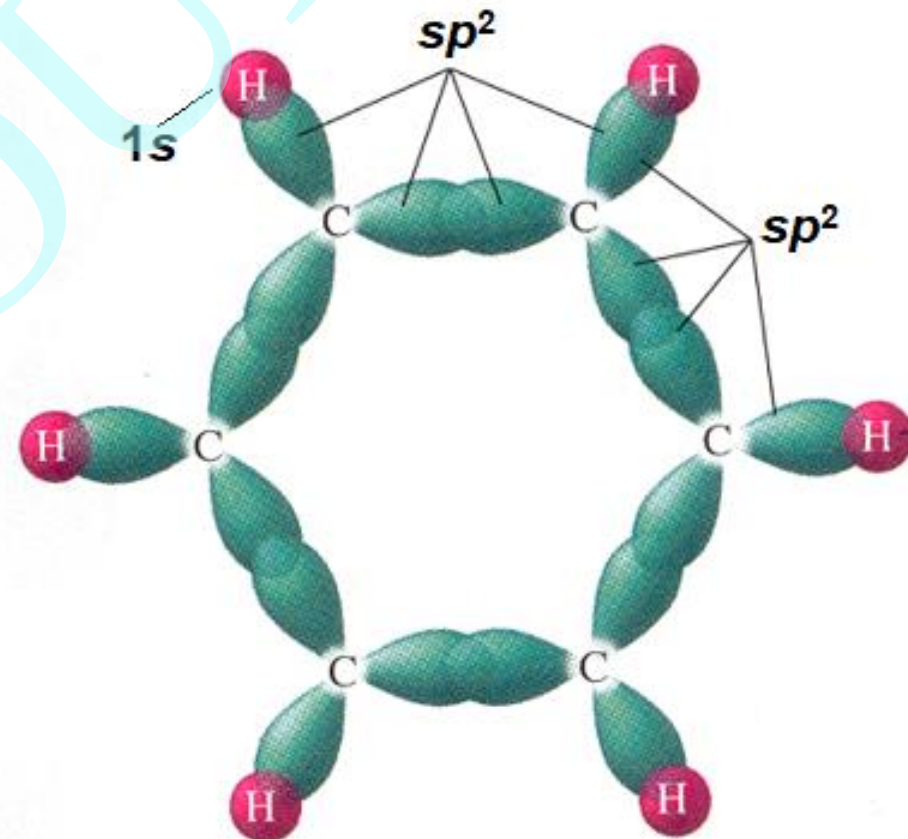
Σχηματισμός του σ συστήματος δεσμών στο βενζόλιο (θεωρία δεσμού σθένους)



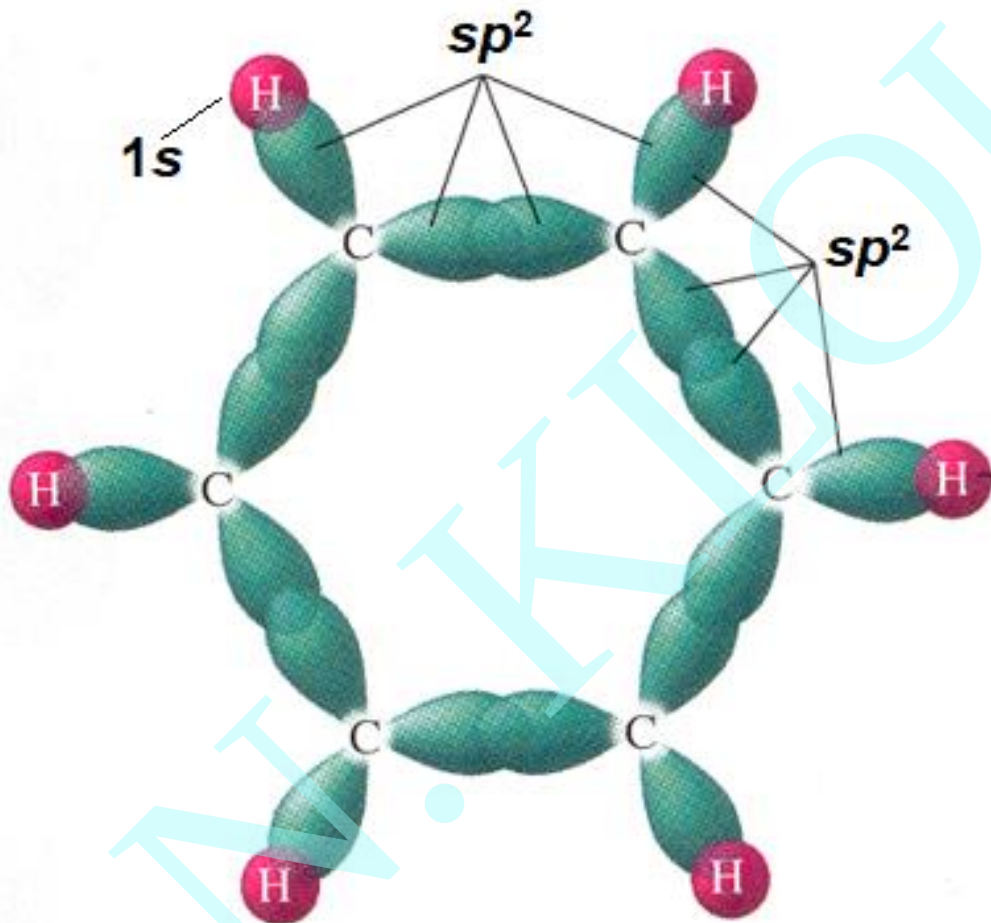
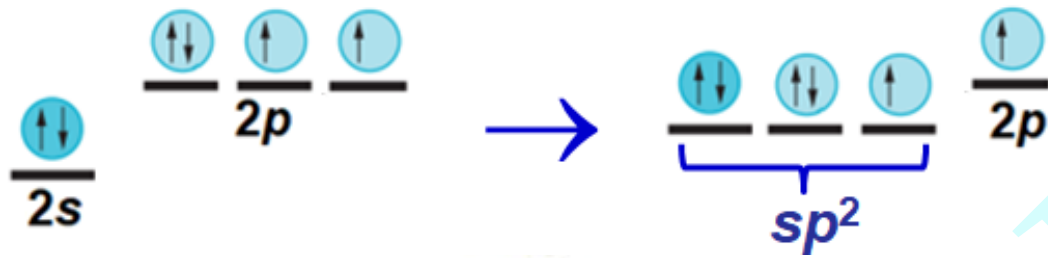
Κάθε άτομο C σχηματίζει γύρω του τρεις σ δεσμούς: δύο με τα γειτονικά του άτομα C (επικαλύψεις $sp^2 - sp^2$) και έναν δεσμό με ένα άτομο H (επικάλυψη $sp^2 - s$)

Έτσι, κάθε άτομο C διαθέτει και από ένα ανυβριδοποίητο p τροχιακό κατειλημμένο από ένα ηλεκτρόνιο.

Τα έξι p ηλεκτρόνια χρησιμοποιούνται για τη δημιουργία του π συστήματος δεσμών.



Σχηματισμός του σ συστήματος δεσμών στο βενζόλιο (θεωρία δεσμού σθένους)

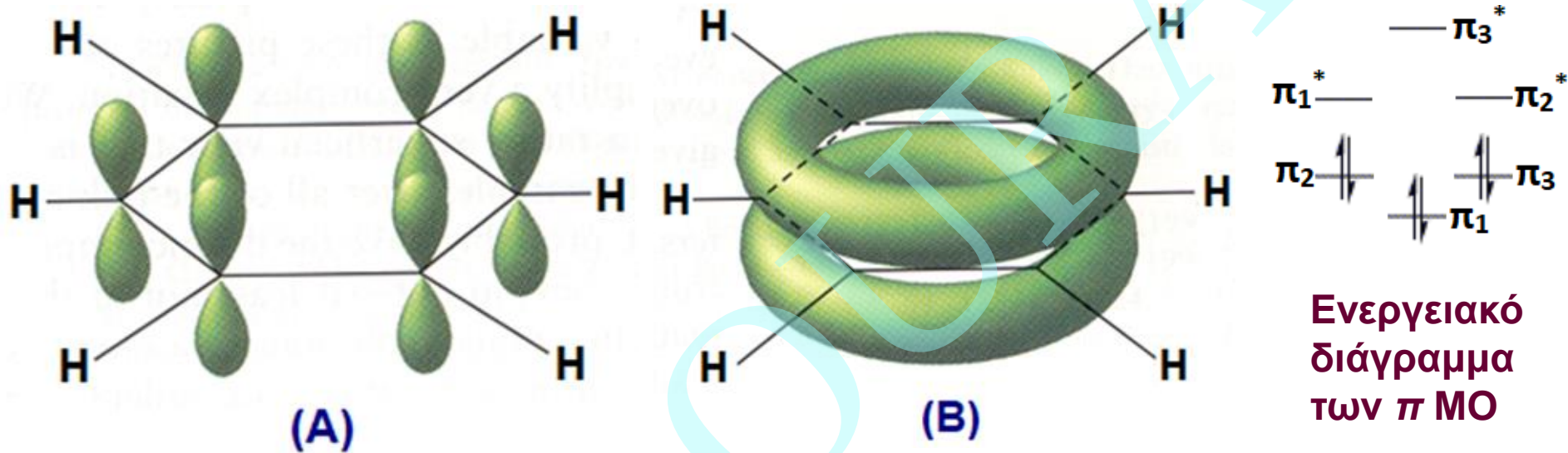


Κάθε άτομο C σχηματίζει γύρω του τρεις σ δεσμούς: δύο με τα γειτονικά του άτομα C (επικαλύψεις $sp^2 - sp^2$) και έναν δεσμό με ένα άτομο H (επικάλυψη $sp^2 - s$)

Έτσι, κάθε άτομο C διαθέτει και από ένα ανυβριδοποίητο p τροχιακό κατειλημμένο από ένα ηλεκτρόνιο.

Τα έξι p ηλεκτρόνια χρησιμοποιούνται για τη δημιουργία του π συστήματος δεσμών.

Σχηματισμός του π συστήματος δεσμών στο βενζόλιο (θεωρία μοριακών τροχιακών)



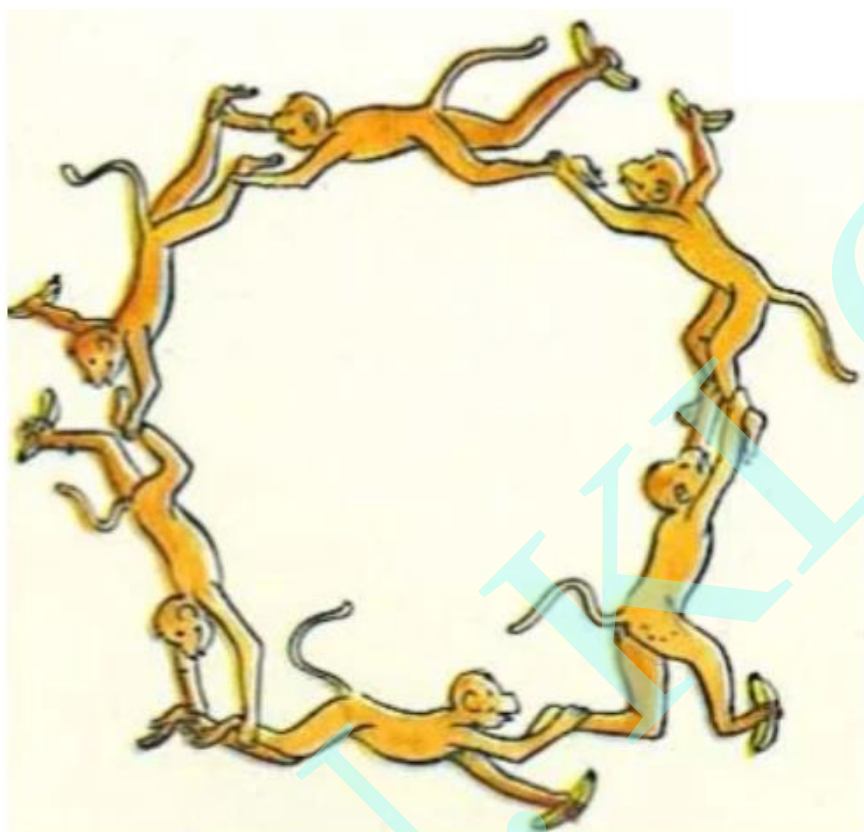
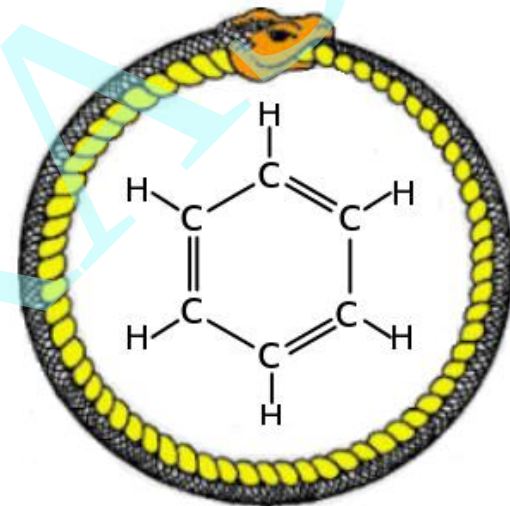
(A) Με επικάλυψη των έξι p ατομικών τροχιακών των έξι ατόμων C σχηματίζονται έξι π MO, τρία δεσμικά και τρία αντιδεσμικά. Τα τρία δεσμικά MO συμπληρώνονται με τα έξι π ηλεκτρόνια.

(B) Στα τρία δεσμικά π MO, τα ηλεκτρόνια απεντοπίζονται κυκλικά πάνω και κάτω από ολόκληρο τον δακτύλιο δίνοντας συνολικά 3 π δεσμούς.

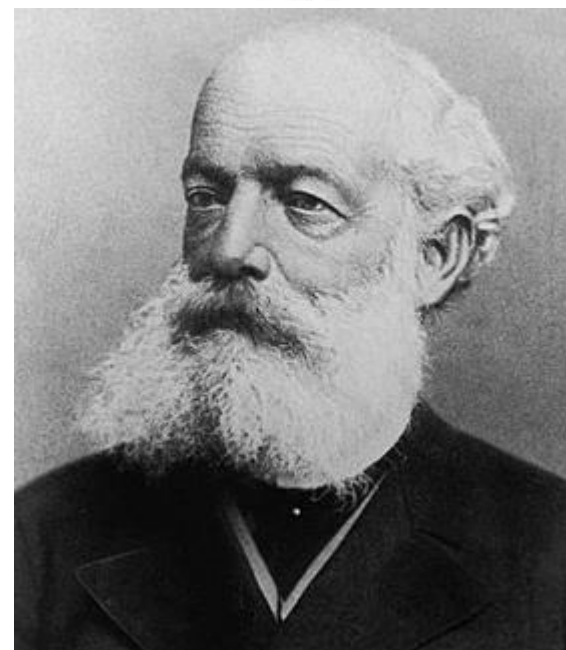
Έτσι, κάθε δεσμός C–C στο βενζόλιο αποτελείται από έναν πλήρη σ δεσμό και μισό π δεσμό (τάξη δεσμού = 1,5).

Κεकुλέ: Ο εμπνευστής της δομής του βενζολικού δακτυλίου (1865)

Ουροβόρος όφης
Το όνειρο του Kekulé
και η έμπνευσή του για
τη δομή του βενζολίου



**Κωμική απεικόνιση
του βενζολικού δακτυλίου**



**August Kekulé von
Stradonitz (1829-1896)**

Ερωτήσεις – Ασκήσεις – Προβλήματα

10.11 Περιγράψτε την ηλεκτρονική δομή καθενός από τα παρακάτω χημικά είδη, χρησιμοποιώντας τη θεωρία MO. Υπολογίστε την τ.δ. για καθένα και αποφανθείτε, αν πρόκειται για χημικά είδη που μπορούν να υπάρξουν.

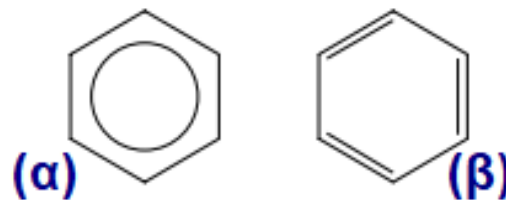
Ως ουσίες είναι διαμαγνητικές ή παραμαγνητικές;

(α) O_2^- , (β) O_2^+ , (γ) B_2 , (δ) B_2^+

10.12 Σχεδιάστε το διάγραμμα MO για το ιόν CN^- και διατυπώστε την ηλεκτρονική του δομή. Βρείτε την τάξη δεσμού του CN^- και αποφανθείτε αν το $NaCN$ είναι ουσία διαμαγνητική ή παραμαγνητική.

10.13 Τοποθετήστε τα ακόλουθα χημικά είδη κατά σειρά αυξανόμενης σταθερότητας: Li_2 , Li_2^+ , Li_2^- . Εξηγήστε.

10.14 Εξηγήστε γιατί η δομή (α) αποδίδει ορθότερα τον βενζολικό δακτύλιο από τη δομή (β).



10.15 Ποια από τις χημικές οντότητες (α) C_2 , (β) C_2^+ , (γ) C_2^- , (δ) C_2^{2-} είναι σταθερότερη;