

1. Tarkastele seuraavien kaksiatomisten molekyylien elektronirakennetta: C_2^+ , C_2 , C_2^- , O_2^+ , O_2 , O_2^- , O_2^{2-} , CO, NO, CN $^-$. Muodosta elektronikonfiguraatiot ja määritä sidosten kertaluvut. Käytä apuna kirjan kuvia tai luentokalvoja heterogeenisten molekyylien tapauksessa.

2. Normittamattomat sp^2 hybridiorbitaalit ovat

$$h_1 = s + \sqrt{2}p_y$$

$$h_2 = s + \sqrt{3/2}p_x - \sqrt{1/2}p_y$$

$$h_3 = s - \sqrt{3/2}p_x - \sqrt{1/2}p_y$$

(a) Osoita että orbitaalit ovat tasossa 120 asteen kulmassa toisiinsa nähden.

(b) Normita orbitaalit (voit olettaa että s , p_x , p_y , p_z orbitaalit ovat keskenään ortonormaaleja).

3. Laske elektronegatiivisuusarvot sekä Paulingin että Mullikenin asteikolla Na ja Cl atomeille NaCl -molekyylissä. *Huom: Kirjan yhtälössä 11.23 on virhe, jätä numeerinen kerroin 0.102 pois laskusta jos tarkastelet sidosenergioita elektronivolteissa.*

4. Tarkastele allyyliradikaalin $\cdot CH_2-CH=CH_2$ π -elektronirakennetta Huckel-approksimaation avulla. Käytä kantana hiilen $2p_z$ orbitaaleja ja ratkaise molekyyliorbitaalien energiat.

5. **Happimolekyylin, typpimolekyylin ja typpimonoksidin biokemiallinen reaktiivisuus.** Opiskele kirjan sivut 385-386 (tai hae vastaava tieto muualta) ja vastaa muutamalla lauseella seuraaviin kysymyksiin (4p):

(a) Mitä on typen fiksaatio? Missä sitä (luonnossa) tapahtuu?

(b) Mikä on superoksidi-ioni? Miksi se voi olla haitallista solulle? Miten biologinen systeemi "puolustautuu" superoksidi-ioneja vastaan?

(c) Mitä ovat ROS-yhdisteet (Reactive Oxygen Species)? Miksi ne ovat haitallisia ihmisen kehossa?

(d) Mitä ovat antioksidantit?