

ЛАБОРАТОРНЕ ЗАНЯТТЯ 1.6

ТЕМА: Хімічний зв'язок і будова молекул. Метод молекулярних орбіталей (МО).

Мета: засвоєння найважливіших понять теорії хімічного зв'язку і просторової конфігурації молекул.

Контрольні запитання та вправи.

Теорія молекулярних орбіталей

1. Сформулюйте основні положення теорії молекулярних орбіталей.
2. На рис. 2 показані розраховані за рівнянням Шредінгера нижчі енергетичні рівні молекулярного іону водню H_2^+ в залежності від міжядерної відстані.

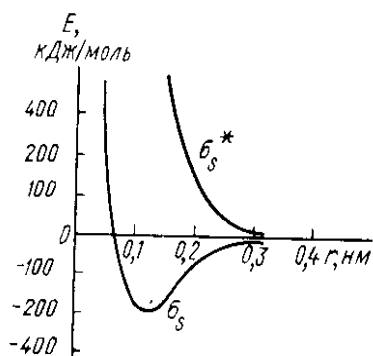


Рис. 2 Залежність нижчих енергетичних рівнів молекулярного іону водню H_2^+ від міжядерної відстані

- а) Яка з енергетичних кривих відповідає іону H_2^+ в основному стані? Користуючись рисунком 2 визначити енергію дисоціації іону H_2^+ і рівноважну між'ядерну відстань? ($D_0 = 255,7$ кДж/моль; $d = 0,108$ нм)
 - б) Зобразити графічно хвильові функції (вздовж осі з'єднання ядер) для вказаних на рис. 2. енергетичних рівнів молекулярного іону H_2^+ .
 - в) Нарисуйте граничні поверхні і наведіть назви орбіталей іону H_2^+ .
 - г) Зобразіть графічно характер зміни ймовірності знаходження електрону на зв'язуючій та розривляючій орбіталах молекулярного іону H_2^+ по осі з'єднання ядер.
 - д) Наведіть електронну конфігурацію молекулярного іону H_2^+ в основному стані.
 - е) Чому атоми з'єднуються в молекулу?
3. Сформулюйте основні положення методу ЛКАО – МО.
 - а) Як виходячи з будови атомів, що утворюють молекулу визначити число, форму і енергію молекулярних орбіталей?
 - б) Якими способами можна зобразити конструювання молекулярних орбіталей іону H_2^+ із атомних орбіталей?
 - в) Який фізичний зміст такого зображення?
 4. Побудуйте енергетичну діаграму і розподіліть електрони по орбіталах молекул водню.
 - а) Поясніть різницю між енергіями іонізації молекули і атома водню в основному стані

$$E_i = 1312,1 \text{ кДж/моль} = 13,599 \text{ еВ для атому Н}$$

$$E_i = 1489 \text{ кДж/моль} = 15,43 \text{ еВ для молекули Н}_2$$

б) Наведіть електронні конфігурації, що відповідають основному та іонізованому (до H_2^+) станам молекули водню (рис.3).

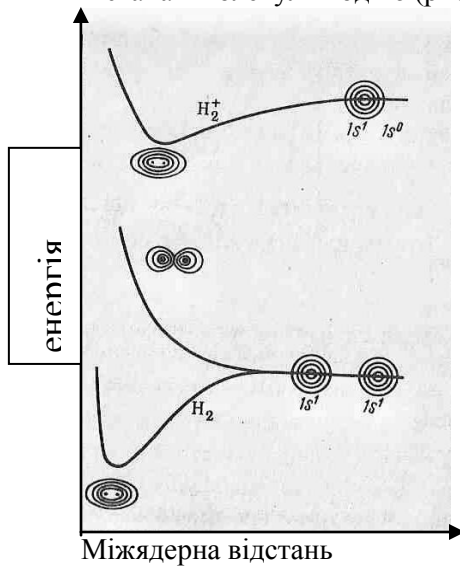


Рис. 3

в) По рис.3 поясніть характер зміни енергії дисоціації (енергії зв'язку) і рівноважної між'ядерної відстані (довжини зв'язку) при іонізації молекул водню. Порівняйте значення енергії дисоціації і між'ядерної відстані H_2 і H_2^+

$$D_0 = 436 \text{ кДж/моль}; d = 0,074 \text{ нм} - \text{ для молекули Н}_2$$

$$D_0 = 255,7 \text{ кДж/моль}; d = 0,108 \text{ нм} - \text{ для іону Н}_2^+$$

- Покажіть способи перекривання при сполученні s-s, p-p, s-p, p-d, d-d орбіталей. Відзначте випадки, котрі за умовами симетрії призводять до перекривання:
 - 1) додатнього, від'ємного, нульового;
 - 2) σ -, π -, δ - типу.
- Використовуючи метод ЛКАО – МО визначити число і форму орбіталей молекули фтору F_2 . Складіть діаграму енергетичних рівнів молекули і запишіть її електронну конфігурацію.
 - Які сполучення атомних орбіталей узгоджуються з енергетичними умовами для утворення орбіталей молекули фтору, якщо $E_{2p} \gg E_{2s}$
 - Які сполучення атомних орбіталей призводять до утворення молекулярних орбіталей σ -, π - типу, якщо прийняти вісь z за з'єднуючу для атомів фтору?

Визначте число і форму орбіталей молекули азоту. Побудуйте енергетичну діаграму рівнів молекули і наведіть її електронну конфігурацію.

- Як впливає енергетична близькість 2s і 2p орбіталей атомів на розташування молекулярних орбіталей σ -, π - типу на енергетичній діаграмі гомоядерних двоатомних молекул?
- Який порядок зв'язку в молекулі азоту? Як порядок зв'язку впливає на її енергію, довжину?

Розподіліть валентні електрони по орбіталях молекул B_2 , C_2 , N_2 , O_2 , F_2 , визначте порядок зв'язку в цих молекулах. Які з цих молекул пара -, а які діамангітні?

Побудуйте графіки залежності енергії і довжини зв'язку від числа валентних електронів в ряду B_2 - N_2 - C_2 - O_2 - F_2 . Поясніть хід кривих.

Молекул	B_2	N_2	C_2	O_2	F_2
D_0 , кДж/моль	276,0	945,3	602,0	498,4	159,
d, нм	0,159	0,1097	0,124	0,1207	0,141

Який характер зміни енергії дисоціації і між'ядерної відстані при переході:

від N_2 до N_2^+ і N_2^-

від O_2 до O_2^+ і O_2^- .

Молекул	N_2	N_2^+	N_2^-	O_2	O_2^+	O_2^-
D_0 , кДж/моль	945,3	842,7	744,8	498,4	642	394
d , нм	0,1097	0,111	0,125	0,1207	0,112	0,134

Поясніть характер зміни енергії дисоціації у вказаних системах.

Використовуючи метод ЛКАО – МО, визначте число і форму орбіталей молекули фториду водню. Побудуйте діаграму енергетичних рівнів молекули і наведіть її електронну конфігурацію. Енергії орбіталей фтору і водню:

	1s(H)	1s(F)	2s(F)	2p(F)
E, eV	-13,6	-1000	-40	-17,4

а) Які з комбінацій орбіталей атомів водню і фтору енергетично найбільше підходять для утворення молекулярних орбіталей?

б) Які з комбінацій орбіталей атомів водню і фтору призводять до утворення зв'язуючої, розрихляючої та незв'язуючої орбіталей, якщо за вісь, з'єднуючу атоми в молекулі HF, прийняти вісь z? Нарисуйте схему перекривання орбіталей. Наведіть назви молекулярних орбіталей.

в) Чому молекула фториду водню сильно поляризована? ($\mu = 0,64 \cdot 10^{-29}$ Кл·м)

Побудуйте діаграму енергетичних рівнів лінійної молекули CO_2 .

а) за рахунок яких сполучень орбіталей центрального атома і групових орбіталей периферійних атомів (лігандів) виникають орбіталі молекул? Наведіть схеми перекривання орбіталей центрального атома і групових орбіталей периферійних атомів.

б) Чим пояснюються високе значення середньої енергії ($E_{CO} = 803$ кДж/моль) зв'язку CO і порівняно невелика між'ядерна відстань ($d_{CO} = 0,116$ нм) в молекулі CO_2 ?

в) Чому в молекулі CO_2 зв'язок полярний, а сама молекула неполярна?