

ЗАДАНИЕ 1 ПО ТЕМЕ "СТРОЕНИЕ ВЕЩЕСТВА"

Таблица 1 Варианты задания по теме

«Строение вещества. Метод молекулярных орбиталей»

Номер варианта	Молекулы и молекулярные ионы	Номер варианта	Молекулы и молекулярные ионы
	2.2		2.2
1	$N_2; O_2^{2+}$	26	HHe^+, Br_2
2	$F_2; O_2^{2-}$	27	NO^+, Be_2
3	$H_2; CO$	28	F_2^+, He_2^+
4	$NO; O_2$	29	H_2^-, CN
5	$NO^+; C_2$	30	O_2^-, HCl
6	$F_2^+; B_2$	31	$LiF, HHe-$
7	$NO^-; Cl_2$	32	BN, Ne_2
8	$HHe; O_2^+$	33	KCl, C_2^{2-}
9	$ClF; Be_2^+$	34	B_2^{2-}, CN^+
10	$N_2^-; FO$	35	O_2^+, HI
11	$NO^+; Li_2^+$	36	NO^-, Be_2^+
12	$O_2^+; He_2$	37	Na_2^+, OF^-
13	$CN^-; N_2$	38	HeH^{2+}, IF
14	$F_2^-; O_2$	39	NO^+, NaF
15	$H_2^-; HCl$	40	CO^-, NF
16	$C_2; CO^+$	41	NO^-, H_2^-
17	$He_2^+; O_2^+$	42	C_2^+, HF
18	$Ne_2^+; Cl_2$	43	Ne_2, LiF
19	$HHe^+; O_2^+$	44	CO, He_2^+
20	$CO; NH$	45	Br_2, Ne_2^+
21	$O_2^+; Cl_2$	46	IF, B_2
22	$H_2^-; NO^-$	47	He_2^+, HBr
23	$NO^+; C_2$	48	N_2^-, Na_2
24	$NO^{2+}; Ne_2^+$	49	HHe^-, B_2^{2-}
25	$HHe; N_2^+;$	50	Ne_2^+, CN^-

2.2 Строение молекул и ионов по методу молекулярных орбиталей (МО)

Рекомендуемая последовательность описания молекул по методу МО:

а) Постройте энергетические диаграммы для исходных атомов.

Составьте электронно-графические формулы валентных электронов атомов (ионов), образующих молекулярную частицу.

б) Определите атомные орбитали (АО), при перекрывании которых образуются МО. Следует помнить, что не любое перекрывание АО ведет к образованию МО. Для этого необходимо учитывать расположение АО в пространстве и разность энергий АО, образующих МО. Не могут эффективно перекрываться АО, разность энергий которых больше 15-20 эВ (таблица 9).

Таблица 9 - Разность энергий между атомными 2s - и 2p-орбиталями:

$E_{2p}-E_{2s}$	эВ $\frac{\text{кДж}}{\text{моль}}$	Li	Be	B	C	N	O	F
		1,85	3,36	5,75	8,77	12,39	16,53	21,54
		178	324	554	846	1195	1595	2078

в) Составьте энергетическую диаграмму молекулярных орбиталей для молекулярной частицы.

г) Распределите валентные электроны по молекулярным орбиталям в соответствии с принципом Паули, правилом Гунда и принципом наименьшей энергии.

д) Составьте электронную формулу для молекулярной частицы.

е) Рассчитайте порядок связи. Ответьте, существует ли такая частица и устойчива ли она.

ж) Сравните энергию ионизации молекулярной частицы и исходных атомов (ионов).

з) Предскажите, какие свойства – парамагнитные или диамагнитные – проявляет молекулярная частица?

Пример. Описать строение молекулярного иона N_2^+ по методу МО

Решение:

а) Электронно-графические формулы валентных электронов исходного атома N и иона N^+ (рисунок 1).

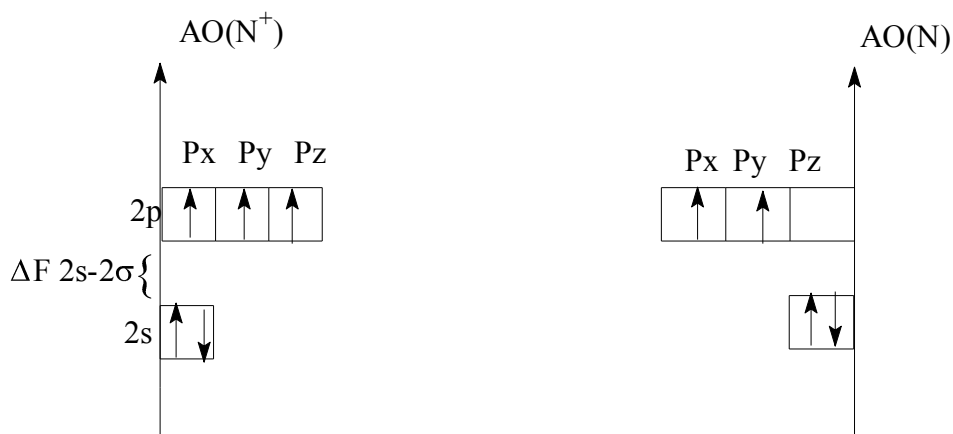


Рисунок 1 - Энергетическая диаграмма исходных частиц

б) Связи в молекулярных частицах образуются за счет взаимодействия внешних валентных атомных орбиталей 2s и 2p подуровней. Атомные орбитали 1s-подуровня и МО, образованные ими, не учитываются и на диаграмме не указаны (рисунок 2).

При перекрывании 2s орбиталей образуются σ_{2s} связывающая, σ_{2s}^* разрыхляющая МО (σ_{2s}^*).

Из $2p_x$ АО образуются σ_{2p_x} связывающая и $\sigma_{2p_x}^*$ разрыхляющая МО. Но так как ΔE_{2s-2p} имеет небольшое значение 11,4 эВ, следует учесть взаимодействие 2s АО одного атома и $2p_x$ АО второго атома. Это взаимодействие понижает энергию σ_{2s} орбиталей и повышает энергию σ_{2p_x} орбиталей. При перекрывании $2p_y$ АО образуются π_{2p_y} и $\pi_{2p_y}^*$ МО, а из $2p_z$ такие же по энергии, но различно расположенные в пространстве π_{2p_z} и $\pi_{2p_z}^*$ МО.

в). Энергетическая диаграмма образования молекулярного иона N_2^+ из атомных (рисунок 2)

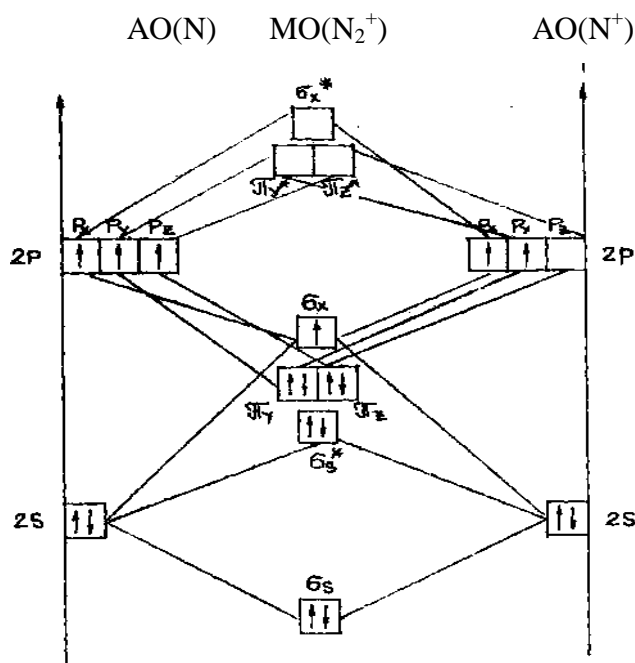
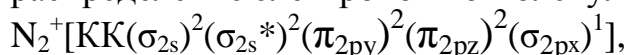


Рисунок 2

г) Распределите электроны на МО в соответствии:

- с принципом Паули (на МО не может быть более 2-х электронов, причем с разными значениями спиновых квантовых чисел);
- с правилом Гунда (МО с одинаковой энергией заполняются последовательно по одному электрону с одинаковыми значениями спиновых чисел);
- с принципом наименьшей энергии (первой заполняется МО с наименьшей энергией).

д) Электронная формула для молекулярного иона N_2^+ указывает распределение электронов по молекулярным орбиталям:



где КК- обозначение внутренних электронных слоев.

е) Порядок (кратность) связи рассчитывается по формуле:

$$\text{Порядок связи} = \frac{1}{2} (N_{\text{связ.МО}} - N_{\text{разр.МО}}),$$

где $N_{\text{связ.МО}}$ – число электронов на связывающих молекулярных орбиталях;

$N_{\text{разр.МО}}$ – число электронов на разрыхляющих молекулярных орбиталях.

$$\text{Порядок связи } (N_2^+) = \frac{1}{2} (7-2) = 2,5.$$

Чем больше порядок связи, тем устойчивее частица. Если порядок связи больше нуля, частица может существовать.

ж) Энергия ионизации – энергия, которую необходимо затратить для отрыва наименее прочно связанного электрона от частицы в основном состоянии.

В ионе N_2^+ внешним электроном и наименее прочно связанным является электрон на «верхней» связывающей МО- (σ_{2px}). Энергия связывающей МО меньше, чем энергия исходных АО, поэтому энергия ионизации молекулярного иона N_2^+ больше энергии ионизации исходных атома N и иона N^+ .

Если в молекулярной частице «верхней занятой» МО является разрыхляющая МО, энергия ионизации молекулярной частицы меньше энергии ионизации исходных атомов (ионов).

з) Магнитные свойства молекулярной частицы определяются наличием неспаренных электронов.

Если неспаренных электронов нет, частица не обладает собственным магнитным моментом, не взаимодействует с магнитным полем, и является диамагнитной.

Если в молекулярной частице есть неспаренные электроны, она обладает парамагнитными свойствами.

Молекулярный ион N_2^+ обладает парамагнитными свойствами, так как у него есть один неспаренный электрон.