

Практичне заняття № 5 **МЕТОД МОЛЕКУЛЯРНИХ ОРБІТАЛЕЙ.**

Завдання для самостійної роботи студентів

Метод молекулярних орбіталей. Лінійна комбінація атомних орбіталей (ЛКАО). Зв'язуючі, незв'язуючі та розпушуючі орбіталі. Енергетичні діаграми двоатомних молекул елементів першого та другого періодів.

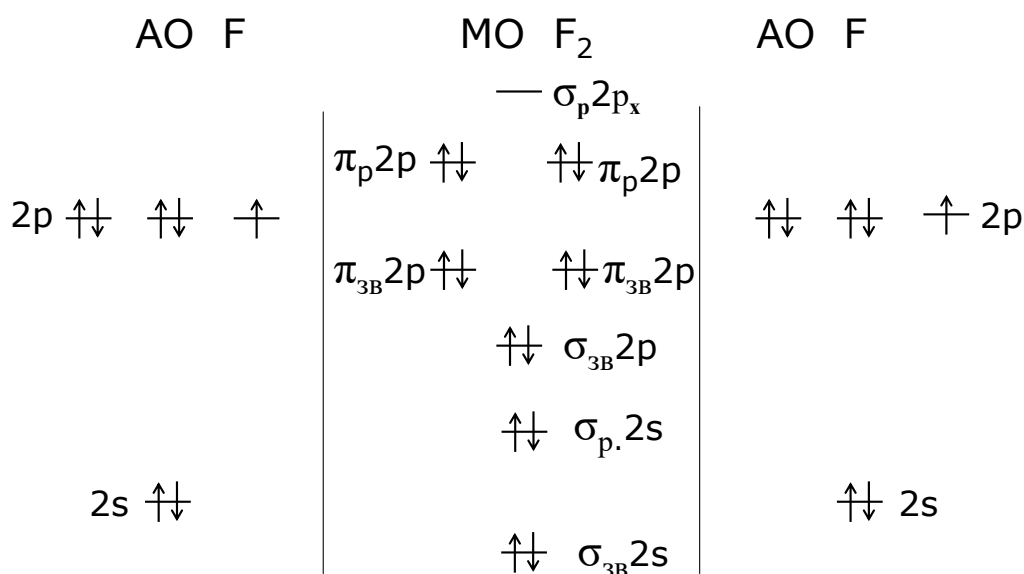
Енергетичні діаграми за ММО двохатомних молекул та молекулярних іонів. Діаграми багатоатомних систем. Кратність зв'язку та стійкість молекул.

Парамагнетизм та діамагнетизм. Порівняння методів МВЗ та ММО.

Приклади розв'язання типових задач

Приклад 1. Для молекули F_2 наведіть схему утворення молекулярних орбіталей з атомних та розташування на них електронів. Запишіть електронну формулу молекули та розрахуйте кратність зв'язку. Вкажіть діамагнітна чи парамагнітна є частинка? Як зміниться Кр. зв. в молекулярних іонах F_2^+ та F_2^- в порівнянні з молекулою? Наведіть відповідні схеми МО для цих іонів.

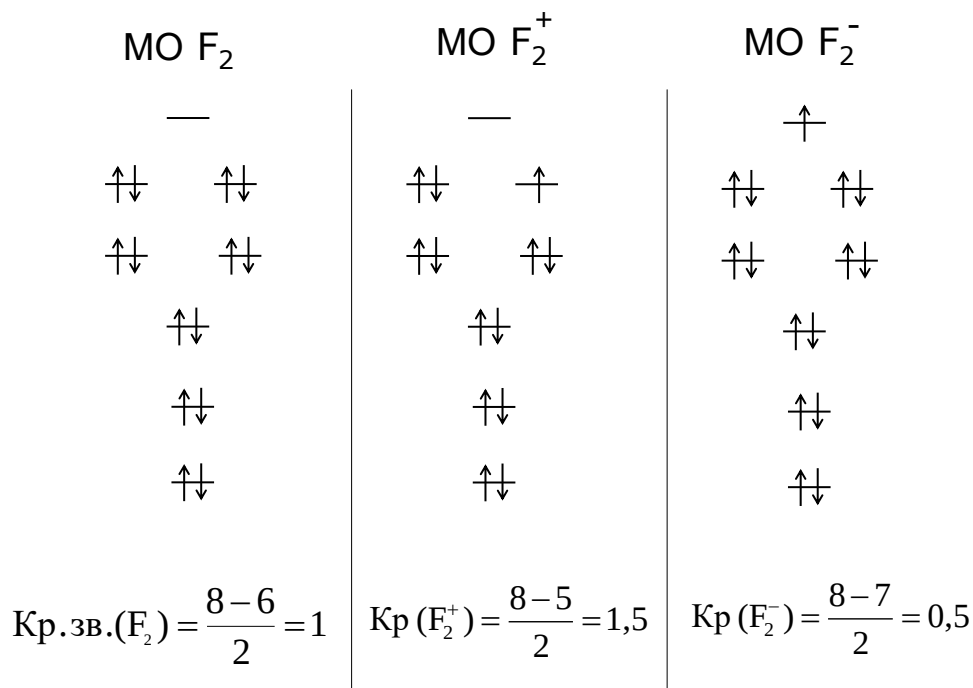
Розв'язання.



$$F_2[KK(\sigma_{3B2s})^2(\sigma_{p2s})^2(\sigma_{3B2p})^2(\pi_{3B2p})^4(\pi_{p2p})^4]$$

$$\text{Кр. зв.}(F_2) = \frac{8-6}{2} = 1$$

Так як, в молекулі магнітні моменти у всіх електронів атома взаємно скомпенсовані, тобто $\sum m_s = 0$, то у відсутності зовнішнього поля магнітний момент молекули дорівнює нулю і таким чином частинка є *діамагнітна*.



Контрольні запитання і задачі

1. На прикладі поданих далі молекул і молекулярних іонів, виходячи з положень методу ЛКАО, поясніть, як утворюються молекулярні орбіталі, як розподіляються електрони на цих орбіталах:

а) H₂, б) Cl₂, в) He₂⁺.

2. Для молекул або молекулярних іонів:

а) HF ; б) O₂²⁻; в) H₂⁺; г) CO; д) NO.

наведіть схему утворення молекулярних орбіталей з атомних та розподіл на них електронів, знайдіть кратність зв'язку, вкажіть діамагнітною чи парамагнітною є ця частинка.

3. Поясніть для заданого ряду частинок, як змінюється енергія та довжина зв'язку. Відповідь підтвердіть схемами молекулярних орбіталей з розташованими на них електронами:

а) N₂⁺, N₂, N₂⁻, б) O₂⁺, O₂, O₂⁻.