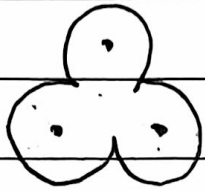


Problem Set 5.

6.72. 分子形状如下:



电子密度最大的区域

①. 三角形的中心区域

②. 每两个氢原子核连线的中点

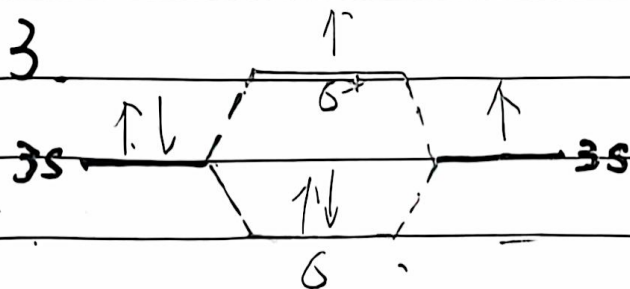
在最低能量的分子轨道中, 最大的电子密度区域位于三角形的中心, 电子云在三个氢原子间均匀分布, 形成一个由三个氢原子共享的键合轨道

6.69

(a). H_2 分子的电离能大于原子氢 (H), 因为在 H_2 分子中, 两个氢原子的 $1s$ 轨道形成了一个成键分子轨道 (σ_{1s}), 其中填充了两个电子, 降低了系统的能量, 增加了稳定性. 要电离 H_2 , 要从键合轨道上移除一个电子, 比从孤立的原子种移除要更多能量.

(b). O_2 分子的电离能低于原子氧, 因为 O_2 分子的最高占据分子轨道是反键的 π^* 轨道. 移除一个电子会从这个反键轨道上移走, 从而增加分子的键级, 使分子更加稳定. 因此, 电离 O_2 所需的能量比电离孤立的 O 原子更低.

(c). 由于 F_2 分子的最高占据轨道也是反键轨道, 移除一个电子会使分子更加稳定, 因此, 可以推测 F_2 的电离能低于原子氟 (F).



价电子构型为: $(\sigma_{3s})^2 (\sigma_{3s}^*)^1$

成键电子数 = 2, 反键电子数 = 1

$$\text{键级} = (2 - 1) / 2 = 0.5$$

由于键级为正 Na_2^- 离子可能存在, 但键级较低, 键合较弱, 因此, Na_2^- 离子可能是高度反应性的, 不太稳定的物种

4.

a). $(\sigma_{3s})^2 (\sigma_{3s}^*)^2 (\sigma_{3p})^2 (\pi_{3px})^2 (\pi_{3py})^2 (\pi_{3px}^*)^1 (\pi_{3py}^*)^1$

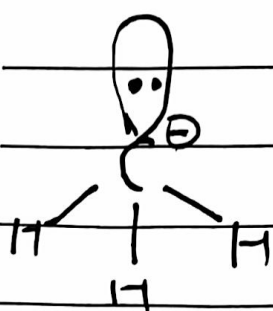
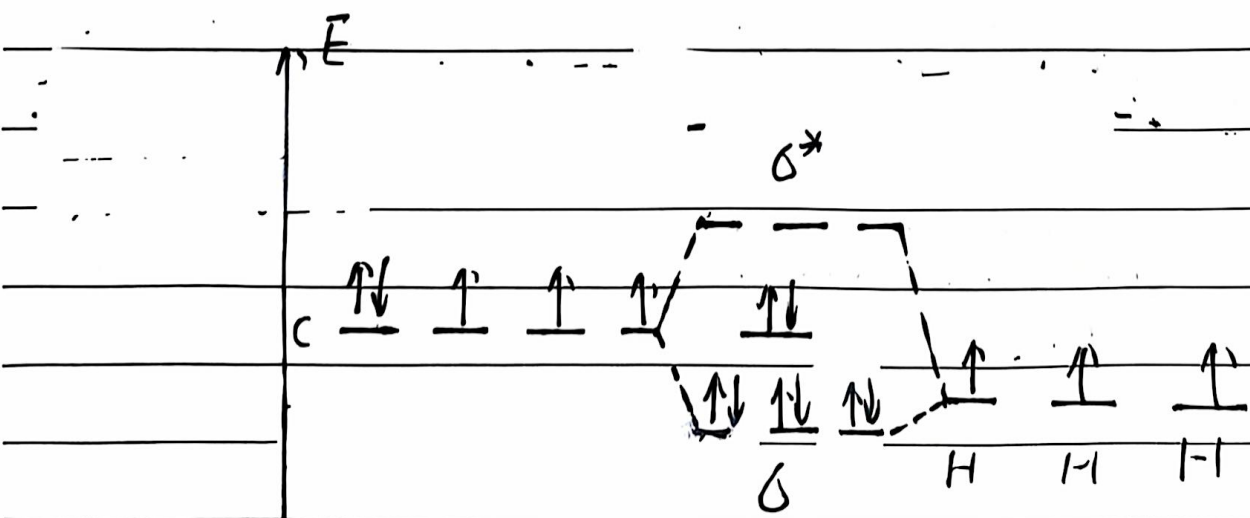
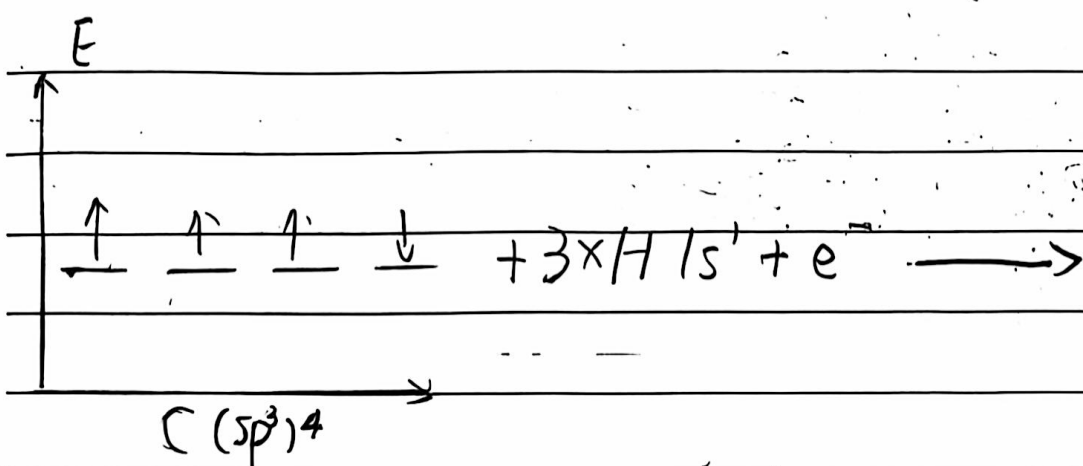
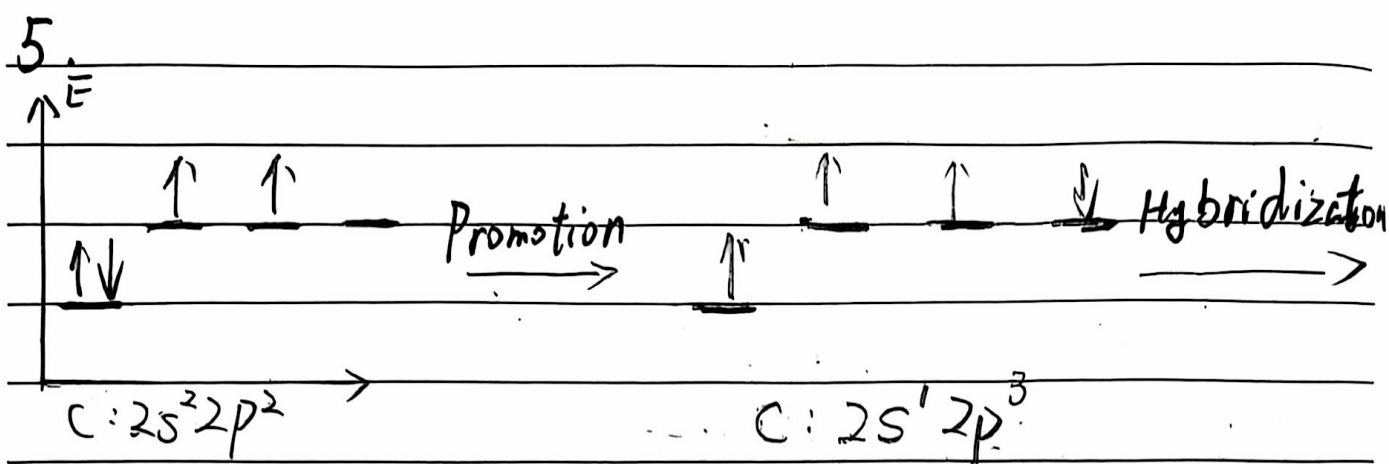
$$\text{键级} = (8 - 4) / 2 = 2$$

b). $(\sigma_{2s})^2 (\sigma_{2s}^*)^2 (\sigma_{2p})^2 (\pi_{2px})^2 (\pi_{2py})^2 (\pi_{2px}^*)^2 (\pi_{2py}^*)^1$

$$\text{键级} = (8 - 5) / 2 = 1.5$$

c). $(\sigma_{2s})^2 (\sigma_{2s}^*)^2 (\pi_{2px})^2 (\pi_{2py})^2 (\sigma_{2p})^2$

$$\text{键级} = (8 - 2) / 2 = 3$$



CH_3^- 的键角 (即 $C-H$ 键角) 小于 CH_4
 由于孤对电子的排斥作用
 分子构型: 三角锥型