Задача 66

Полная электронная формула атома скандия в основном состоянии:

$$Sc 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^1$$

Полная электронная формула атома скандия в возбужденном состоянии:

$$Sc* 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^1 3d^1 4p^1$$

Распределение валентных электронов по квантовым ячейкам

В основном состоянии:



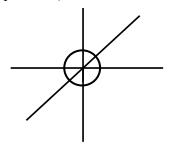
При переходе атома скандия в возбужденное состояние один электрон с 4s-подуровня перемещается на 4p-подуровень.

В основном состоянии у атома скандия нет неспаренных валентных электронов на внешнем энергетическом уровне, значит, валентность атома скандия в основном состоянии равна 0. (B=0)

В возбужденном состоянии у атома скандия 2 неспаренных валентных электрона на внешнем энергетическом уровне, а также 1 неспаренный валентный электрон на 3d-подуровне. Валентность атома скандия в возбужденном состоянии может варьировать от 2 до 3 ($B^* = 2-3$)

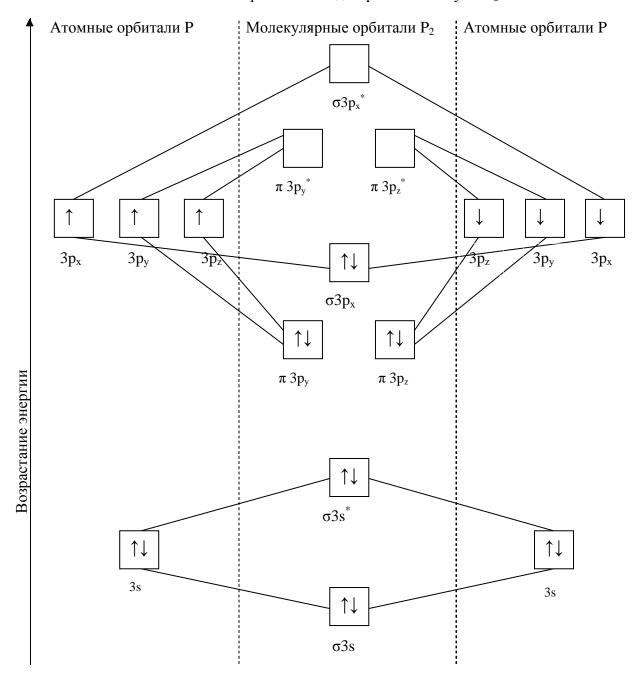
Нейтральный атом скандия обладает парамагнитными свойствами, так как на 3d-подуровне имеются неспаренные электроны (1 электрон).

Орбитали внешнего энергетического уровня атома скандия в стабильном состоянии (одна 4sорбиталь):



Задача 103

Энергетическая диаграмма молекулы Р2

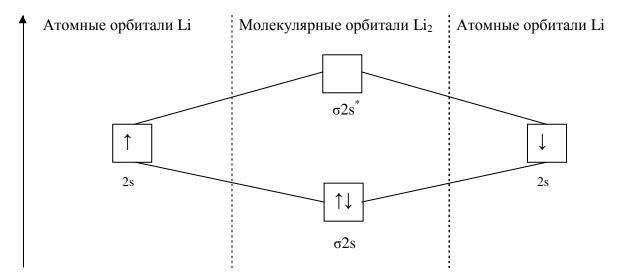


Порядок связи равен полуразности электронов на связывающих и разрыхляющих орбиталях:

$$n = \frac{N - N^*}{2} = \frac{8 - 2}{2} = 3$$

В молекуле P_2 нет неспаренных электронов на молекулярных орбиталях, значит, молекула P_2 является диамагнитной.

Энергетическая диаграмма молекулы Li₂



Порядок связи равен полуразности электронов на связывающих и разрыхляющих орбиталях:

$$n = \frac{N - N^*}{2} = \frac{2 - 0}{2} = 1$$

В молекуле Li_2 нет неспаренных электронов на молекулярных орбиталях, значит, молекула Li_2 является диамагнитной.

Задача 172

Молекула NOBr

Валентный угол равен O-N-Br равен 115°

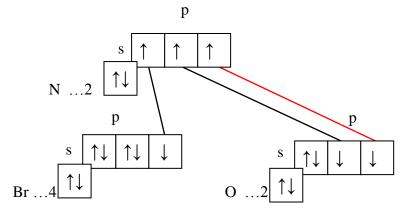
Краткие электронные формулы атомов:

N [He]
$$2s^2 2p^3$$

O [He]
$$2s^2 2p^4$$

Br [Ar
$$3d^{10}$$
] $4s^2 4p^5$

Механизм образования связей в молекуле NOBr:

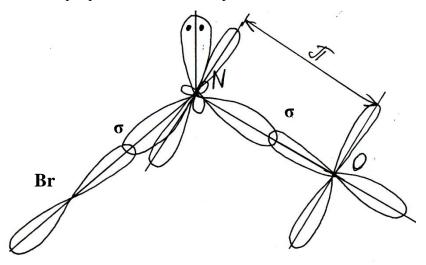


Тип гибридизации атома азота: sp^2 –гибридизация.

Две sp^2 –гибридные орбитали атома азота перекрываются с двумя p-орбиталями атомов брома и кислорода (показано черными линиями). Образуются две σ -связи. Красной линией показано перекрывание негибридной p-орбитали атома азота с p-орбиталью атома кислорода (образуется π -связь)

Помимо этого, у атома азота остается одна несвязанная (неподеленная) электронная пара. Она оказывает влияние на гибридизацию и форму частицы.

Схема перекрывания атомных орбиталей:



Геометрическая форма молекулы: угловая.

Молекула H_2S

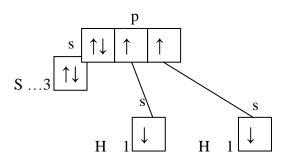
Валентный угол равен H-S-H равен 92°

Краткие электронные формулы атомов:

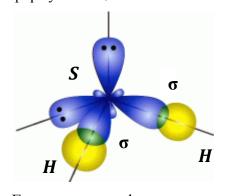
 $H 1s^1$

S [Ne] $3s^2 3p^4$

Механизм образования химических связей:



Атом серы находится в состоянии sp^3 -гибридизации. Две sp^3 -гибридные орбитали атома серы перекрываются с двумя s-орбиталями атомов водорода. Образуются две σ -связи. Помимо этого, у атома серы остаются 2 неподеленные электронные пары. Они оказывают влияние на гибридизацию и форму частицы.



Геометрическая форма молекулы: угловая.

<u>Задача 223</u>

$$M$$
еталл — Ba

$$\rho = 3,59 \text{ г/см}^3 = 3590 \text{ кг/м}^3$$

$$a = 5.02 \cdot 10^{-10} \,\mathrm{m}^3$$

Структурный тип – ?

$$r-?$$

Молярная масса бария:

$$M = 137$$
 г/моль = $137 \cdot 10^{-3}$ кг/моль

Число формульных единиц рассчитаем, исходя из формулы:

$$\rho = \frac{m}{V} = \frac{ZM}{a^3 \cdot N_A}$$
$$Z = \frac{\rho \cdot a^3 \cdot N_A}{M}$$

$$Z = \frac{\rho \cdot a^3 \cdot N_A}{M}$$

$$Z = \frac{3590 \text{кг/m}^3 \cdot (5,02 \cdot 10^{-10} \,\text{m})^3 \cdot 6,022 \cdot 10^{23} \,\text{моль}^{-1}}{137 \cdot 10^{-3} \,\text{кг/моль}} = 2$$

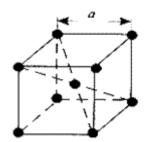
Структурный тип: объемноцентрированная кубическая (ОЦК), так как Z = 2.

Эффективный радиус:

$$r = \frac{a\sqrt{3}}{4}$$

$$r = \frac{5,02 \cdot 10^{-10} \,\mathrm{m} \cdot \sqrt{3}}{4} = 2,17 \cdot 10^{-10} \,\mathrm{m}$$

Ячейка:



Координационное число: К = 8