

**Житомирський державний університет
імені Івана Франка**

**МЕТОДИЧНІ РЕКОМЕНДАЦІЇ ДО ОРГАНІЗАЦІЇ
САМОСТІЙНОЇ РОБОТИ
Обов'язкової освітньої компоненти**

***”КВАНТОВА ХІМІЯ”*
для підготовки здобувачів
першого (бакалаврського) рівня вищої освіти**

Галузь знань	<i>Е Природничі науки</i>
Спеціальність	<i>ЕЗ Хімія</i>
Предметна спеціальність	-
Спеціалізація	-
Освітня програма	<i>Хімія</i>
Факультет	<i>Природничий</i>

Автори:

к.х.н., доцент **Кусяк Наталія**
к.х.н., доцент **Листван Віталій**
к.х.н., доцент **Кичкирук Ольга**
магістр **Ходюк Олександр**

Розглянуто та схвалено
на засіданні кафедри хімії
Протокол від «11» червня 2025 р. № 28
Завідувач кафедри **Олена АНІЧКІНА**

*Рекомендовано до друку вченою радою
Житомирського державного університету імені Івана Франка
(протокол № 13 від 27 червня 2025 р.)*

Рецензенти:

Козакевич Роман – кандидат хімічних наук, старший дослідник, старший науковий співробітник відділу хемосорбції та гібридних матеріалів Інституту хімії поверхні ім.О.О.Чуйка НАН України

Гусакова Крістіна - кандидат хімічних наук, старший дослідник, старший науковий співробітник відділу термостійких полімерів і нанокompозитів Інституту хімії високомолекулярних сполук НАН України

Камінський Олександр – кандидат хімічних наук, доцент кафедри хімії ЖДУ імені Івана Франка

Методичні рекомендації до організації самостійної роботи з обов'язкової освітньої компоненти «Квантова хімія» для підготовки здобувачів першого (бакалаврського) рівня вищої освіти / Укладачі Н. В. Кусяк, В. В. Листван, О.Ю. Кичкирук, О.В. Ходюк, Житомир: Вид-во ЖДУ ім.І. Франка, 2025. 43 с.

У посібнику наведені перелік запитань і завдань для самостійної підготовки до робіт з квантової хімії, задачі відповідно до програми із квантової хімії для студентів спеціальності “Хімія”.

УДК 378.147:544.18(072)
М 52

© Кусяк Н.В., 2025

© Листван В.В., 2025

© Кичкирук О.Ю., 2025

© Ходюк О.В., 2025

© Житомирський державний
університет ім. І. Франка

ЗМІСТ

ВСТУП	4
Завдання для самостійної роботи	
Елементарні частинки та будова ядра	5
Квантова фізика та класична механіка	7
Основні постулати квантової механіки	11
Квантові числа	18
Загальний опис багатоелектронної системи	25
Метод молекулярних орбіталей молекул	29
Метод молекулярних орбіталей Хюккеля	32
Метод валентних зв'язків та симетрія молекул	35
Електричні властивості молекул	38
Теорія кристалічного поля	41
Теорія поля лігандів	42
Рекомендована література	43

ВСТУП

«Розвиток і освіта ні одній людині не можуть бути надані або повідомлені.

*Усяк, хто бажає до них долучитися, повинен досягти цього
власною діяльністю, власними силами, власним напруженням»*

А. Дістервег

Сучасна освіта передбачає підготовку фахівців, які могли б самостійно навчатися, виконувати складні завдання та творчо використовувати знання для формування системи навичок самоосвіти відповідно до концепції «навчання протягом усього життя». Фахівці, здатні нестандартно мислити та творчо застосовувати знання у складних виробничих та соціальних ситуаціях, користуються великим попитом на ринку праці. Навчання студентів самостійному навчанню, оволодінню новими знаннями, формування їхньої потреби в самоосвіті, розвиток високого рівня самоконтролю та самооцінки є основними завданнями вищої освіти. Самостійною роботою є навчальна діяльність здобувача, яка спрямована на вирішення завдань і має на меті розширення, закріплення та поглиблення набутих знань, а також опанування нових предметів без сторонньої допомоги. Самостійна робота студентів – це основний спосіб опанування навчального матеріалу вчасно, без обов'язкових курсів.

Сьогодні переважна більшість науковців розглядають самостійну роботу як особливу форму навчальної діяльності, яка є невід'ємною частиною засвоєння будь-якої дисципліни. У процесі такої роботи студент не лише здобуває знання та навички, а й формує власну активність та здатність до самостійних дій. Саме здатність до самостійної роботи є запорукою високого рівня професійної підготовки майбутнього спеціаліста, а також створює основу для подальшого наукового саморозвитку та здатності самостійно вирішувати складні завдання. Дослідження підтверджують: лише ті знання, які студент здобув власними зусиллями – через особистий досвід, рефлексію та практичну діяльність – стають справді стійкими. За даними ЮНЕСКО, під час слухового сприйняття навчального матеріалу засвоюється приблизно 15% інформації, а при поєднанні слуху та зору – до 65%. У випадку, коли студент самостійно опрацьовує матеріал та виконує завдання від початку до аналізу результатів, рівень засвоєння може сягати 90%.

Методичні рекомендації щодо організації самостійної роботи студента під час розроблення презентації

Під час створення мультимедійної презентації в PowerPoint студент має можливість самостійно визначити структуру та оформлення слайдів, але важливо дотримуватися наукового стилю та грамотності. Зображення та текст мають бути чіткими та легко помітними. Візуальний дизайн повинен сприяти кращому розумінню контенту та не відволікати увагу аудиторії. Рекомендується уникати слайдів, перевантажених текстом або що містять лише текстову інформацію.

Загальна кількість слайдів у презентації зазвичай не повинна перевищувати 20-30. Варто використовувати єдиний фон для всієї роботи – це забезпечить стилістичну цілісність. Ви можете скористатися шаблонами, що пропонуються програмою. Важливо, щоб кольори таблиць, зображень та графіків контрастували з фоном: оптимальним був би світлий фон з мінімальною кількістю декоративних деталей. Анімаційні ефекти повинні посилювати сприйняття інформації, а не відволікати слухачів.

Не рекомендується використовувати складні декоративні шрифти. Розмір шрифту має бути щонайменше 20-22 pt для забезпечення комфортного читання. Рекомендовано розміщувати на слайді не більше 12-15 рядків тексту.

МОДУЛЬ 1

Квантова механіка

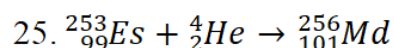
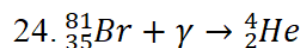
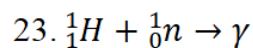
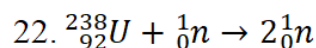
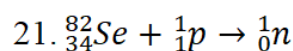
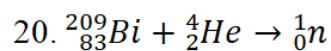
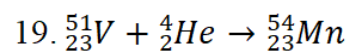
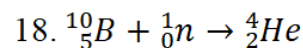
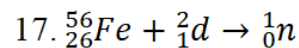
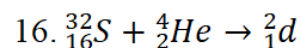
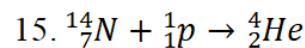
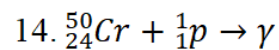
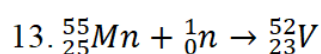
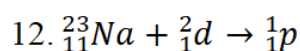
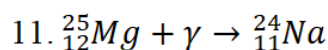
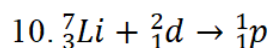
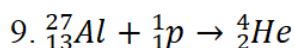
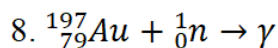
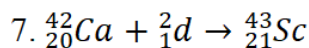
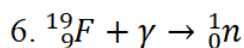
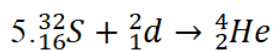
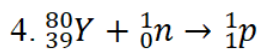
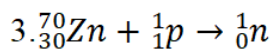
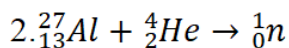
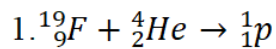
Завдання для самостійної роботи №1

Тема: Елементарні частинки та будова ядра.

Опрацюйте тему відповідно до питань:

- Взаємодія елементарних частинок.
- Структура ядра.
- Ізотопи, ізотони та ізобари.
- Дефект маси, енергія зв'язку. Стійкість ядер.
- Природна та штучна радіоактивності.

Закінчити схеми ядерних процесів:

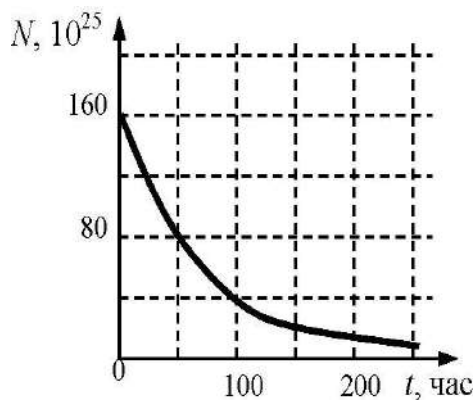


Задачі для самостійного розв'язування.

1. Ядро складається з 92 протонів та 143 нейтронів. Ядро якого елемента утворилося, що викинуло α -частку? Яка енергія зв'язку та дефект маси.
2. Яка максимальна кінетична енергія електрона, що вилітає при β -розпаді нейтрону. Рівняння розпаду.
3. Розрахувати енергію термоядерної реакції ${}^2_1\text{H} + {}^3_1\text{H} \rightarrow {}^4_2\text{He} + {}^1_0\text{n}$.
4. Яка частка від великої кількості радіоактивних атомів залишається нерозпалою через інтервал часу, що дорівнює двом періодам напіврозпаду.
5. Період напіврозпаду радіоактивного ${}^{45}\text{Ca}$ становить 164 доби. Якщо на початку було $4 \cdot 10^{24}$ атомів, то скільки їх залишиться через 328 годин?
6. Визначити період напіврозпаду радіоактивного елемента, якщо за проміжок часу 1,2 с, число атомів, що розпалися, становить 75% від початкової кількості.
7. Радіоактивна мідь із періодом напіврозпаду 10 хв. Яка частина початкової кількості міді залишиться через 1 годину?
8. 800 г радіоактивного цезію. Визначте масу цезію, що не розпався, через 108 років, якщо його період напіврозпаду дорівнює 27 рокам.

Тести:

1. Період напіврозпаду ядер Франція становить 4,8 хв. Це означає, що...
 1. за 4,8 хв атомний номер кожного атома Франція зменшиться вдвічі
 2. кожні 4,8 хв розпадається одне ядро Франція
 3. всі ядра, що спочатку були розпадуться за 9,6 хв
 4. половина ядер франція, що спочатку були, розпадається за 4,8 хв
2. Графік залежності кількості ядер, що не розпалися Ербія ${}^{127}_{68}\text{Er}$ від часу. Який період напіврозпаду цього ізотопу?



1. 25 годин
2. 50 годин
3. 100 годин
4. 200 годин

Рекомендована література:

1. Слєта Л.О., Іванов В.В. Квантова хімія. Харків: Фоліо. 2007. — 443 с.
2. Яцимирський В., Яцимирський А. Квантова хімія. — К.: ВПЦ «Київський університет», 2009. — 479 с.
3. Стрижак П.Є. Квантова хімія: Підручник для студентів вищих навчальних закладів. — К.: Вид. дім «КМА», 2009. — 458 с.
4. Курта С.А. Будова речовини.- Івано-Франківськ.. —2007. — 162 с.
5. Сліпенюк Т.С. Будова речовини: Навч.пос. — Чернівці: Рута, 2005. — 76 с.

Завдання для самостійної роботи № 2

Тема: Квантова фізика та класична механіка.

Опрацюйте тему відповідно до питань:

- Електрон. Характеристики α -, β - і γ -променів.
- Планетарна модель атома Резерфорда.
- Рівняння Планка.
- Теорія атома Гідрогену за Бором. Спектри атомів.
- Хвилі де Бройля.
- Принцип невизначеності В.Гейзенберга.

Фундаментальні константи:

$$h = 6.63 \cdot 10^{-34} \text{ Дж} \cdot \text{с}$$

$$m_e = 9.11 \cdot 10^{-31} \text{ кг}$$

$$\hbar = 1.05 \cdot 10^{-34} \text{ Дж} \cdot \text{с}$$

$$1 \text{ эВ} = 1.60 \cdot 10^{-19} \text{ Дж}$$

$$q_e = 1.60 \cdot 10^{-19} \text{ Кл}$$

$$a_0 = 0.0529 \text{ нм} = 0.529 \text{ \AA}$$

Енергія кванта:

$$\varepsilon = h\nu \quad \text{или} \quad \varepsilon = \hbar\omega$$

Імпульс фотона:

$$p = \frac{h}{\lambda}$$

впливає з релятивістської енергії частинки з нульовою масою спокою і

енергії кванта:

$$E^2 = m_0^2 c^4 + p^2 c^2, m_0 = 0, E = h\nu$$

Співвідношення між частотою, періодом, швидкістю та довжиною хвилі:

$$\nu = \frac{1}{T} \quad \lambda = VT = \frac{V}{\nu}.$$

Комптонівська довжина хвилі

$$\lambda_c = \frac{h}{m_e c}.$$

Довжина хвилі де Бройля:

$$\lambda_D = \frac{h}{p}$$

Формула Рідберга для спектральних серій гідрогенподібних атомів:

$$\Delta E = RZ^2 \left(\frac{1}{n_{\text{кін}}^2} - \frac{1}{n_{\text{поч}}^2} \right), \quad \Delta E = h\nu$$
$$R = 13.6 \text{ eV}$$

Умова квантування орбітального моменту електрона в атомі Н за теорією Бора:

$$M_z = n\hbar, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

Радіус першої орбіти в атомі Гідрогену (радіус Бора, атомна одиниця довжини):

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{k m_e e^2}.$$

Магнітна та електрична постійні, постійна Кулона:

$$\mu_0 = 4\pi \cdot 10^{-7} \text{ Гн} / \text{м} = 4\pi \cdot 10^{-7} \text{ Н} / \text{А}^2$$

$$\epsilon_0 = \frac{1}{\mu_0 c^2} = 8.85 \cdot 10^{-12} \text{ Ф} / \text{м}$$

$$k_{\text{Кулон}} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} = 8.99 \cdot 10^9 \text{ Дж} \cdot \text{м} / \text{Кл}^2$$

Величини, що характеризують магнітне поле:

$$B = \mu_0 \mu \frac{I}{2R}$$

$$\mu = ISn$$

$$\mu_B = \frac{\hbar e}{2m}$$

- магнітна індукція в центрі колового провідника радіусом R зі струмом I .

- магнітний момент рамки площею S зі струмом I .

n - вектор нормалі до рамки.

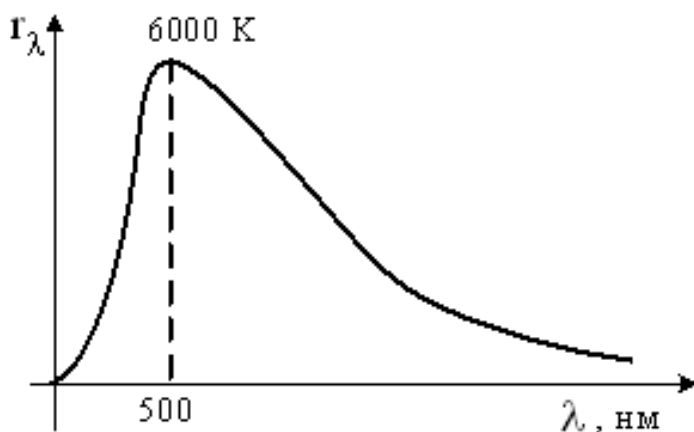
- магнетон Бора, одиниця магнітного моменту.

Задачі для самостійного розв'язування:

1. Яка товщина захисного шару води, який зменшує інтенсивність γ -випромінювання з енергією 1,4 MeV в 4 рази.
2. На залізний екран падає вузький монохроматичний пучок γ -променів, довжина хвилі яких $0,124 \cdot 10^{-2}$ нм. Знайти товщину шару заліза, що поглинає половину випромінювання.
3. Яку кількість енергії несе квант світла із довжиною хвилі $7,5 \cdot 10^{-7}$ м.
4. Яка енергія кванта світла із довжиною хвилі $6,1 \cdot 10^{-7}$ м?

Тести:

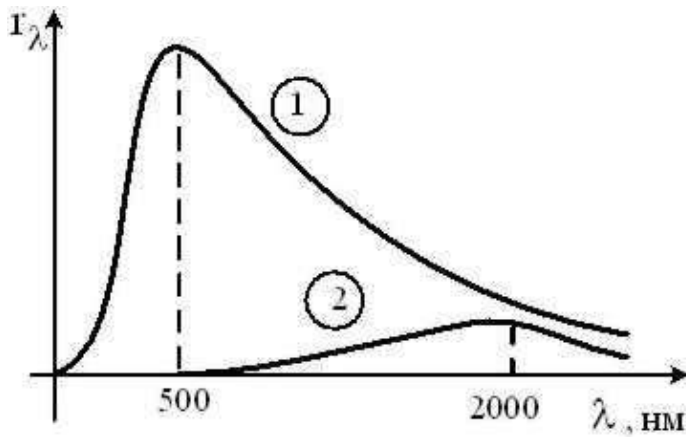
1. На малюнку показана крива залежності спектральної щільності випромінювання абсолютно чорного тіла від довжини хвилі при $T = 6000$ K. Якщо температуру тіла зменшити у 4 рази, то довжина хвилі, що відповідає максимуму випромінювання абсолютно чорного тіла. ...



Варіанти відповідей:

1. зменшиться у 4 рази;
2. збільшиться у 4 рази;
3. збільшиться у 2 рази;
4. зменшиться у 2 рази

2. На малюнку показані криві залежності спектральної щільності випромінювання абсолютно чорного тіла від довжини хвилі за різних температур. Якщо крива 1 відповідає спектру випромінювання абсолютно чорного тіла при температурі 6000 К, то крива 2 відповідає температурі (К) ...



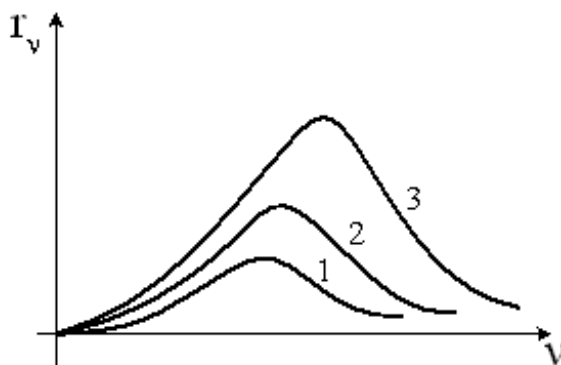
Варіанти відповідей:

1. 1500;
2. 750;
3. 3000;
4. 1000.

3. Положення атома Карбону у кристалічній ґратці алмазу визначено з похибкою $\Delta x = 5 \cdot 10^{-11}$ м. Враховуючи, що постійна Планка дорівнює $\hbar = 1,05 \cdot 10^{-34}$ Дж·с, а маса атома Карбону $m = 1,99 \cdot 10^{-26}$ кг, невизначеність швидкості Δv_x його теплового руху (в м/с) не менше...

1. 1,06;
2. $9,43 \cdot 10^{-3}$;
3. 0,943;
4. 106.

4. Показана крива залежності спектральної щільності енергетичної випромінювання абсолютно чорного тіла від частоти за різних температур. Найбільшій температурі відповідає графік.



1. Графік 1.
2. Графік 2.
3. Графік 3.

5. Якщо протон і нейтрон рухаються з однаковими швидкостями, то відношення їх довжин хвиль де Бройля λ_p / λ_n дорівнює...

Варіанти відповідей: 1. 4

2. 1

3. $\frac{1}{2}$

4. 2

Рекомендована література:

1. Слета Л.О., Іванов В.В. Квантова хімія. Харків: Фоліо. 2007. – 443 с.
2. Яцимирський В., Яцимирський А. Квантова хімія. — К.: ВПЦ «Київський університет», 2009. — 479 с.
3. Стрижак П.Є. Квантова хімія: Підручник для студентів вищих навчальних закладів. – К.: Вид. дім «КМА», 2009. — 458 с.
4. Курта С.А. Будова речовини.- Івано-Франківськ.. —2007. — 162 с.
5. Сліпенюк Т.С. Будова речовини: Навч.пос. – Чернівці: Рута, 2005. – 76 с.

Завдання для самостійної роботи № 3

Тема: Основні постулати квантової механіки

Опрацюйте тему відповідно до питань:

- Довжина хвилі електрона.
- Потенційний бар'єр.
- Хвильова функція
- Оператор Гамільтона.
- Власні функції і власні значення. Співвідношення невизначеностей, фізичний зміст і найпростіші оцінки на їх основі.
- Рівняння Шредінгера.
- Дискретний і безперервний спектри.
- Енергетичні стани і хвильові функції

Довжина хвилі електрона ціле число разів вкладається в довжині орбіти електрона: $2\pi r_n = n\lambda_n$.

$$\lambda = \frac{h}{mv} \quad \text{та} \quad 2\pi r = n\lambda \qquad m v v = n \left(\frac{h}{2\pi} \right),$$

Що є першим постулатом Бора.

Потенційним бар'єром є обмежений простір, в якому потенційна енергія U взаємодії частинки більша, ніж у сусідніх ділянках.

Високим потенційним бар'єром шириною a і висотою U називається потенціал

$$U(x) = \begin{cases} U, & 0 \leq x \leq a \\ 0, & x < 0 \text{ або } x > a \end{cases}$$

Нескінченно широким потенційним бар'єром висотою U називається потенціал

$$U(x) = \begin{cases} 0, & x < 0 \\ U, & x > 0 \end{cases}$$

Квантова частинка, що рухається з енергією $E < U$ при зіткненні з бар'єром може або відбитися (і рухатися назад із тією ж енергією), або проникнути за бар'єр. Імовірність проникнення за бар'єр за $E < U$ (т.зв. тунельний ефект) визначає коефіцієнт прозорості (коефіцієнт пропускання):

$$D \approx f = \exp\left(-\frac{2d}{\hbar} \sqrt{2m(U-E)}\right) \text{ або } D = \frac{f}{(1+f/4)^2}.$$

За нескінченно широким бар'єром частинка може необмежено рухатися тільки за $E > U$. При цьому ймовірність проходження (коефіцієнт пропускання) є

$$\tau = \frac{4k_1 k_2}{(k_1 + k_2)^2}.$$

k_1, k_2 - хвильові числа хвиль де Бройля перед і над бар'єром.

Для будь-яких бар'єрів за $E > U$ у квантової частинки існує ненульова ймовірність відбиття від бар'єра (т.зв. явище надбар'єрного відбиття). У разі широкого бар'єра вона визначається коефіцієнтом відбиття:

$$\rho = \left| \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right|^2.$$

Припустимо, що електрон рухається зі швидкістю $2,69 \cdot 10^6 \text{ м} \cdot \text{с}^{-1}$, а його місцеположення визначають фотоном фіолетового світла ($\lambda = 410 \text{ нм}$). Порівняйте енергію електрона та фотона.

Енергія електрона:

$$E_e = \frac{mv^2}{2} = \frac{9,11 \cdot 10^{-31} \text{ кг} \cdot (2,69 \cdot 10^6 \text{ м} \cdot \text{с}^{-1})^2}{2} = 6,59 \cdot 10^{-18} \text{ Дж.}$$

Енергія фотона:

$$E_\phi = h \cdot \nu = \frac{hc}{\lambda} = \frac{6,6262 \cdot 10^{-34} \text{ Дж} \cdot \text{с} \cdot 2,998 \cdot 10^8 \text{ м} \cdot \text{с}^{-1}}{410 \cdot 10^{-9} \text{ м}} = 4,85 \cdot 10^{-19} \text{ Дж.}$$

Радикальна зміна фізичних уявлень про рух у квантовій механіці в порівнянні з класичною вимагає, логічно, і такої ж радикальної зміни математичного апарату теорії. У зв'язку з цим, перш за все, виникає питання про спосіб опису стану в квантовій механіці.

Нехай q – сукупність координат квантової системи, а dq – добуток диференціалів цих координат, або елемент обсягу конфігураційного простору. Для однієї частки q є набір x, y, z , а $dq = dx dy dz = dV$ – елемент об'єму звичайного простору. Основу математичного апарату квантової механіки становить твердження, що стан системи може бути описано певною (комплексною) функцією координат $\Psi(q)$, яка називається хвильовою функцією системи. Вона була введена в квантову механіку Шредінгером в 1926 році.

Хвильова функція – величина, що повністю описує стан мікрооб'єкта (електрона, протона, атома, молекули) та взагалі будь-якої квантової системи.

Отже, хвильова функція є функцією стану квантової системи. Опис стану за допомогою хвильової функції має статистичний, тобто. ймовірний характер: квадрат модуля хвильової функції дає значення ймовірностей тих величин, від яких залежить хвильова функція. Наприклад, $|\Psi_{(x,y,z,t)}|^2$ є ймовірність знаходження частинки в момент часу t у точці простору з координатами x, y, z . Сукупність ймовірностей знаходження частинки в деякій кінцевій області простору називається щільністю ймовірності. Наприклад, відома зі шкільного курсу хімії електронна хмара, що відповідає атомній або молекулярній орбіталі, з математичної точки зору є функцією ймовірності, тобто. $|\Psi|^2$. Хвильова функція описує не лише розподіл ймовірностей знаходження мікрооб'єкта у просторі, а й дозволяє отримати максимально повну, сумісну з принципами квантової механіки інформацію про будь-які фізичні величини, що характеризують ці мікрооб'єкти.

Функція стану (хвильова функція) повинна задовільняти умовам однозначності, завершеності та безперервності у всьому просторі змінних. Вона має бути, як мінімум, двічі диференційована. З іншого боку, сума ймовірностей

всіх можливих значень координат системи має, за визначенням, дорівнювати одиниці, тобто:

$$\int |\Psi|^2 dq = \int \Psi^* \Psi dq = 1$$

Ψ^* - функція, комплексно пов'язана з Ψ . Ця рівність є так званою умовою нормування хвильових функцій. Шляхом вибору відповідного постійного коефіцієнта функція Ψ завжди може бути нормована.

Опис законів руху квантової системи передбачає можливість визначення її динамічних змінних (координата, імпульс, енергія і т.п.). Хвильова функція дає максимально повний опис квантової системи, тобто знання Ψ дозволяє обчислити набір динамічних змінних. Це досягається деякою дією (англ. - *Operate*) на хвильову функцію. Опис дії на хвильову функцію вимагає запровадження поняття *оператора* – одного з ключових понять математичного апарату квантової механіки.

Оператор $\hat{A}$ є закон, за яким одній функції f відповідає інша функція g . Оператор визначає, яка дія має бути виконана над функцією f , щоб перевести її у функцію g .

$$\hat{A}f = g$$

Наприклад, $\hat{A} = d/dx$ та $f = 5x^2$. Тоді $f = d/dx(5x^2) = 10x = g$

Або: оператор піднесення до квадрату, добуток на змінну x або просто число (наприклад, $\hat{A} = 10$). Тоді, $g = 25x^4$, $5x^3$ та $50x^2$ відповідно.

Подібно до того, як у класичній механіці властивості системи можуть бути виражені відповідними координатами і імпульсами всіх частинок, так і в квантовій механіці оператори різних фізичних величин задаються за допомогою операторів координат і імпульсів. Оператор координати є просто координата, та її дія на будь-яку функцію полягає у множенні її на вектор r , який визначається координатами x , y і z , тобто.

$$\begin{aligned}\hat{\vec{r}}f &= \vec{r}f \\ \hat{x}f &= x \cdot f, \quad \hat{y}f = y \cdot f, \quad \hat{z}f = z \cdot f\end{aligned}$$

Оператор імпульсу p визначається через оператори його проекцій (наприклад, на декартові осі координат):

$$\begin{aligned}\hat{\vec{p}} &= -i\hbar \nabla = -i\hbar \left(\vec{i} \frac{\partial}{\partial x} + \vec{j} \frac{\partial}{\partial y} + \vec{k} \frac{\partial}{\partial z} \right) \\ \hat{p}_x &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}, \quad \hat{p}_y = -i\hbar \frac{\partial}{\partial y}, \quad \hat{p}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial z}\end{aligned}$$

Функція від будь-яких динамічних змінних $A(p, q)$ замінюється на оператор $\hat{A}(p, q)$, який виходить із класичного вираження цієї функції шляхом заміни p і q на відповідні оператори:

$$\hat{A}(p, q) = A(\hat{p}, \hat{q})$$

Наприклад, оператор кінетичної енергії електрона легко отримати, замінюючи у класичному рівнянні

$$T = \frac{m_e v^2}{2} = \frac{p^2}{2m_e} = \frac{p_x^2}{2m_e} + \frac{p_y^2}{2m_e} + \frac{p_z^2}{2m_e}$$

компоненти імпульсу p_x, p_y, p_z відповідними операторами

$$\hat{T} = \frac{1}{2m_e} (\hat{p}_x + \hat{p}_y + \hat{p}_z)^2 = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right)$$

або вводячи позначення Δ – оператор Лапласа:

$$\Delta \equiv \nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

отримаємо

$$\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta$$

Потенційна енергія $V(q, t)$ є функція лише координат і часу, внаслідок чого оператор $\hat{V}$ виражається через оператори координат за тими ж формулами, що і потенційна енергія в класичній механіці. Наприклад, оператор потенційної енергії взаємодії електрона з ядром заряду Z дорівнює

$$\hat{V} = -\frac{Ze^2}{\hat{r}}.$$

Повна енергія E класичної системи дорівнює сумі кінетичної T та потенційної V енергій. Аналогічно, у квантовій механіці оператор повної енергії $\hat{H}$ (оператор Гамільтона або гамільтоніан системи) сума операторів кінетичної та потенційної енергій. Наприклад, для одноелектронного атома:

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V} = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta - \frac{Ze^2}{\hat{r}}$$

З правил побудови операторів динамічних змінних видно, що квантова механіка принципово потребує класичної для своєї побудови та обґрунтування.

Рівняння Шредінгера – основне рівняння квантової механіки (1926)

$$\hat{H}(p, q, t) \Psi(q, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(q, t)$$

Задачі для самостійного розв'язування:

1. Довжина хвилі електрона $0,242 \cdot 10^{-7}$ м. Обчисліть швидкість руху електрона.
2. Розрахуйте довжину хвилі електрона, що має швидкість $2,2 \cdot 10^3$ м/с.
3. Маса фотона дорівнює масі електрона ($9,108 \cdot 10^{-31}$ кг). Яка довжина хвилі відповідає цьому фотону?
4. Маса нейтрону $1,675 \cdot 10^{-27}$ кг, а швидкість руху його $4 \cdot 10^2$ м/с. Визначте довжину хвилі де Бройля.
5. Маса-частинки $6,644 \cdot 10^{-27}$ кг. З якою швидкістю рухається частинка, якщо довжина хвилі де Бройля для неї дорівнює $2 \cdot 10^{-12}$ м ?
6. Розрахуйте довжину хвилі де Бройля для молекул гелію та фтору, що рухаються зі швидкістю 500 м/с.
7. Обчисліть енергію (еВ) збудження електрона в атомі Na, якщо пари його поглинають фотон із довжиною хвилі $4340 \cdot 10^{-10}$ м.
8. Яку енергію (еВ) треба повідомити незбудженого атома водню, щоб він міг випускати випромінювання з довжиною хвилі $\lambda = 1500 \cdot 10^{-10}$ м?
9. Електрон з енергією $E = 9$ еВ рухається в позитивному напрямку осі ОХ. Оцінити ймовірність того, що він пройде через потенційний бар'єр заввишки 10 еВ і завширшки 0.1 нм. (0.36).
10. Електрон проходить через прямокутний потенційний бар'єр шириною $d = 0.5$ нм. Висота бар'єра U більша за енергію електрона на 1%. Обчислити коефіцієнт прозорості, якщо енергія електрона E (1) 10 еВ (2) 100 еВ.
11. Кінетична енергія T електрона у 2 рази вища за висоту U нескінченно широкого потенційного бар'єра. Визначити коефіцієнти відбиття ρ і проходження τ .
12. Використовуючи формули для коефіцієнтів ρ , τ знайти, чому дорівнює ймовірність того, що частинка відіб'ється від бар'єра, або пройде над ним. Записати рівняння Шредінгера для електрона (1) в атомі Гідрогену; (2) у гідрогенподібному атомі; (3) в атомі гелію.
13. Записати одновимірне рівняння Шредінгера (1) для частинки масою m , яка вільно рухається зі швидкістю V ; (2) тієї самої частинки в нескінченній потенційній шухляді шириною a ; (3) тієї самої частинки в гармонійному потенціалі з коефіцієнтом жорсткості k .
14. Записати рівняння Шредінгера для м'ячика, що стрибає на поверхні землі з постійною енергією.

Тести:

1. Стаціонарним рівнянням Шредінгера для лінійного гармонійного осцилятора є рівняння ...

Варіанти відповідей:

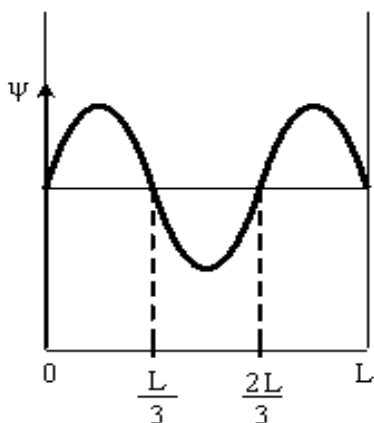
- 1) $\Delta\psi + (2m/\hbar^2) E\psi = 0;$
- 2) $\Delta\psi + 2m/\hbar^2(E + Ze^2/4\pi \epsilon_0 r)\psi=0;$
- 3) $d^2\psi/dx^2 + (2m/\hbar^2) E\psi = 0;$
- 4) $d^2\psi/dx^2 + 2m/\hbar^2(E - m\omega_0^2 x^2/2)\psi=0.$

2. Стаціонарним рівнянням Шредінгера для електрона іона Гідрогену є рівняння...

Варіанти відповідей:

- 1) $\Delta\psi + 2m/\hbar^2(E + Ze^2/4\pi \epsilon_0 r)\psi=0;$
- 2) $\Delta\psi + (2m/\hbar^2) E\psi = 0;$
- 3) $d^2\psi/dx^2 + (2m/\hbar^2) E\psi = 0;$
- 4) $d^2\psi/dx^2 + 2m/\hbar^2(E - m\omega_0^2 x^2/2)\psi=0.$

3. Імовірність виявити електрон на ділянці (a,b) одновимірного потенційного ящика з нескінченно високими стінками обчислюється за формулою $W = \int_a^b \omega dx$, де ω - щільність ймовірності, що визначається ψ - функцією. Якщо ψ -функція має вигляд, вказаний на рис, то ймовірність виявити електрон на ділянці $L/6 < x < 5L/6$ — дорівнює...



Варіанти відповідей:

- | | |
|---------|---------|
| 1. 5/6; | 2. 1/2; |
| 3. 1/3; | 4. 2/3. |

Рекомендована література:

1. Слєта Л.О., Іванов В.В. Квантова хімія. Харків: Фоліо. 2007. – 443 с.
2. Яцимирський В., Яцимирський А. Квантова хімія. — К.: ВПЦ «Київський університет», 2009. — 479 с.
3. Стрижак П.Є. Квантова хімія: Підручник для студентів вищих навчальних закладів. – К.: Вид. дім «КМА», 2009. — 458 с.
4. Курта С.А. Будова речовини.- Івано-Франківськ.. —2007. — 162 с.
5. Сліпенюк Т.С. Будова речовини: Навч.пос. – Чернівці: Рута, 2005. – 76 с.

Завдання для самостійної роботи № 4

Тема: Квантові числа.

Опрацюйте тему відповідно до питань:

- Квантовомеханічна модель атома Гідрогену.
- Квантові числа як параметри, що визначають стан електрона в атомі.
- Фізичний зміст квантових чисел.

Енергія атома Гідрогена або іона із зарядом Z :

$$E_n = -\frac{k^2 \mu e^4}{2h^2} \frac{Z^2}{n^2} \approx -\frac{k^2 m_e e^4}{2h^2} \frac{Z^2}{n^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

$$k = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} = 8.99 \cdot 10^9 \frac{\text{Дж} \cdot \text{м}}{\text{Кл}^2}$$

Орбіталь – це об'єм простору, в якому ймовірність знаходження електрона становить 95 %. Основні характеристики орбіталей задають квантові числа, які з'являються під час розв'язування рівняння Шредінгера $\psi(r, \theta, \varphi) = f(n, l, m_l)$.

Атомна орбіталь (АО) гідروгенподібного атома або іона:

$$\Psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi),$$

$n = 1, 2, 3, \dots$ - головне квантове число

$0 \leq l \leq n - 1$ - орбітальне квантове число

$-l \leq m \leq l$ - магнітне квантове число

Головне квантове число (n) може приймати значення цілих чисел від 1 до ∞ ($n = 1; 2; 3; 4; 5; \dots \infty$). Це число у першу чергу характеризує енергію електрона. Орбіталі з однаковим n утворюють енергетичні рівні (оболонки), які мають такі умовні позначення:

	n	1	2	3	4	...
Оболонка	K	L	M	N	...	

Значення квантового числа n визначається числом вузлових поверхонь стоячої електронної хвилі, вздовж якої $\psi dV = 0$ та $\psi^2 dV = 0$. Слід звернути увагу на те, що до радіальної частини

$$\frac{1}{R} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{8\pi^2 \cdot m \cdot r^2}{h^2} \left(E + \frac{e^2}{r} \right) = \beta$$

входять як повна (E), так і потенціальна енергія $\left(E_n = -\frac{e^2}{r} \right)$. Якщо E від'ємна,

то при наближенні до ядра E_n проходить через мінімум. Саме ця відстань до ядра відповідає найбільш стійкій (стаціонарній) системі, за якої електрон опиняється у «стаціонарній ямі». Тоді ця умова й відповідає знаходженню електрона на орбіталі відповідного рівня. Формула, за якою можна знайти цю енергію, отримана під час розв'язання рівняння Е. Шредінгера та повністю співпадає з математичним виразом першого постулату Н. Бора:

$$E = -\frac{mZ^2e^2}{4h^2n^2} = -\frac{13,61}{n^2} \text{ (eV)}, \quad \text{або} \quad E = -\frac{2,181 \cdot 10^{-18} \cdot Z^2}{n^2} \text{ (Дж/атом)}, \quad \text{або}$$

$$E = -\frac{1,313 \cdot 10^3 \cdot Z^2}{n^2} \text{ (кДж/моль)}.$$

Отже, усі можливі розрахунки за постулатами Н. Бора мають аналогічний вигляд для гідрогеноподібних атомів і у квантово-механічній моделі.

l може приймати значення усіх цілих чисел від 0 до $(n - 1)$ для кожного значення n , та задає підрівні й має назву *орбітального квантового числа*.

Орбітальне квантове число	0	1	2	3	4	5	...
Літера для позначення	s	p	d	f	g	h	...

Орбітальне (азимутальне, побічне) квантове число визначає орбітальний момент кількості руху електрона, який дорівнює $|\vec{L}| = \hbar\sqrt{l(l+1)}$, де $\hbar = \frac{h}{2\pi}$ іноді називається квантом дії.

Отже, l задає *механічний момент кількості руху електрона відносно ядра та є величиною векторною (фізичний зміст)*. Зверніть увагу на те, що l можна розглядати як класичний кутовий момент, про що свідчить його неквантованість за Планком.

Крім фізичних характеристик квантовим числам притаманні ще й геометричні характеристики, пов'язані із розміром, формою та розташуванням орбіталей у просторі. Дуже часто орбіталі гідрогеноподібного атома задають радіальною та кутовою частиною хвильової функції, значення яких для деяких орбіталей наведено нижче.

Аналіз таблиці 1 вказує на те, що усі s -орбіталі є сферичними, тому що їх хвильова функція не залежить від кутів θ та φ . Добуток радіальної та кутової хвильових функцій задає повну хвильову функцію ψ . Розглянемо її значення для $1s$ -орбіталі:

$$\psi_{1s} = 2\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \cdot e^{-\frac{Zr}{a_0}} \cdot \frac{1}{2\sqrt{\pi}} = \frac{1}{\sqrt{\pi}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \cdot e^{-\frac{Zr}{a_0}}.$$

Задачі для самостійного розв'язування:

1. Обчисліть енергію (eV), якою володіє електрон, перебуваючи на третьому енергетичному рівні в атомі Гідрогену?
2. Якщо моделі атома Гідрогену за Бором прийняти, що радіус орбіти, за якою обертається електрон, дорівнює $2,116 \cdot 10^{-10}$ м. Визначте швидкість обертання електрона цією орбітою.
3. Енергетичний стан зовнішнього електрона атома описується такими значеннями квантових чисел: $n=3$, $l=0$, $m_l=0$. Атоми яких елементів мають такий електрон? Складіть електронні формули атомів цих елементів.
4. Користуючись правилом Гунда, розподіліть електрони за орбіталями, що відповідають нижчому енергетичному стану атомів: Мангану, Нітрогену, Оксигену, Силіцію, Кобальту.
5. Тому якому з елементів відповідає кожна з наведених електронних формул:

- а) $1s^2 2s^2 2p^3$; б) $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$;
 в) $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^3 4s^2$; г) $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^1$;
 д) $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10} 5s^2 5p^6 5d^1 6s^2$?

6. Користуючись правилом Гунду, розподіліть електрони за орбітальями, що відповідають найвищому енергетичному стану атомів: фосфору, алюмінію, кремнію, сірці, нікелю.

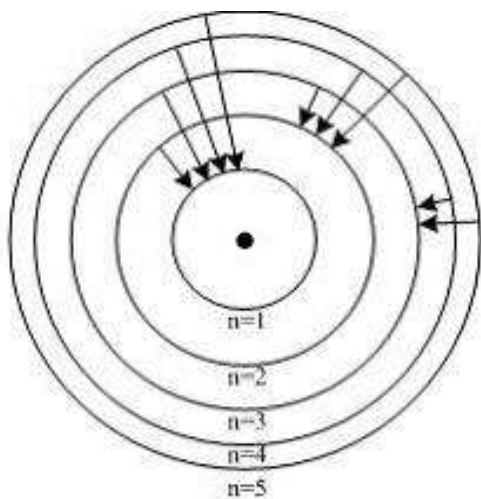
7. Виразіть електронну конфігурацію атомів, використовуючи електронні формули, для елементів з порядковими номерами 12, 20, 38, 48, 23.

8. Користуючись правилом Гунду, розподіліть електрони за орбітальями, що відповідають нижчому енергетичному стану, для атомів елементів з порядковими номерами 21, 35, 37, 73, 58.

9. Напишіть усі квантові числа для електронів атомів: а) Літію, Берилію, Бору, Карбону; б) Нітрогену, Оксигену, Неону, Флуору.

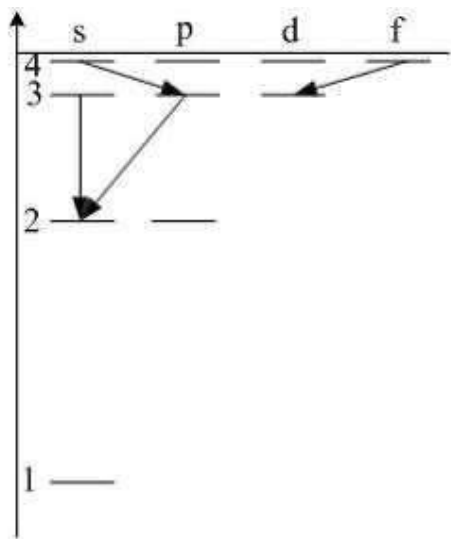
Тести:

1. На малюнку зображені стаціонарні орбіти атома Гідрогену згідно з моделлю Бора, а також умовно зображені переходи електрона з однієї стаціонарної орбіти на іншу, що супроводжуються випромінюванням кванта енергії. В ультрафіолетовій області спектра ці переходи дають серію Лаймана, у видимій – серію Бальмера, в ІЧ – серію Пашена. Найбільшій частоті кванта у серії Лаймана відповідає перехід...



Варіанти відповідей:

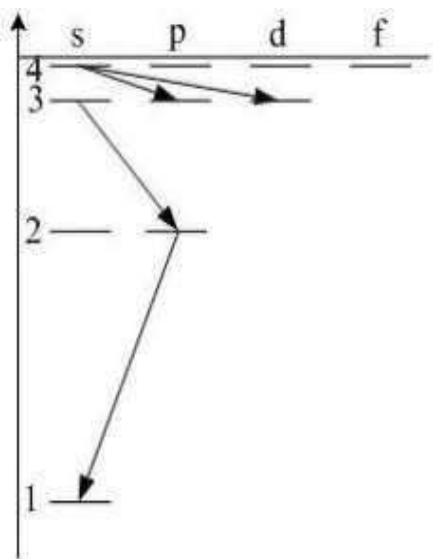
- 1) $n \rightarrow 2 \quad m = 1;$
- 2) $n \rightarrow 3 \quad m = 2;$
- 3) $n \rightarrow 5 \quad m = 1;$
- 4) $n \rightarrow 4 \quad m = 1;$



2. При переходах електрона в атомі з одного рівня на інший закон збереження моменту імпульсу накладає певні обмеження (правило відбору). В енергетичному спектрі атома водню (рис.) забороненим переходом є.....

Варіанти відповідей:

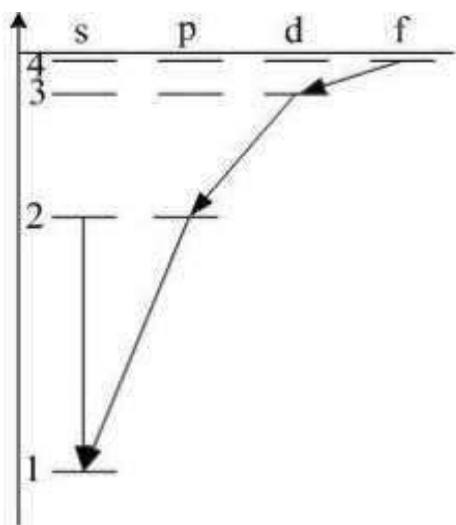
- 1) $4s - 3p$; 2) $4f - 3d$;
3) $3s - 2s$; 4) $3p - 2s$



3. При переходах електрона в атомі з одного рівня на інший закон збереження моменту імпульсу накладає певні обмеження (правило відбору). В енергетичному спектрі атома водню (рис.) забороненим переходом є.....

Варіанти відповідей:

- 1) $4s - 3p$; 2) $3s - 2p$;
3) $2p - 1s$; 4) $4s - 3d$.



4. При переходах електрона в атомі з одного рівня на інший закон збереження моменту імпульсу накладає певні обмеження (правило відбору). В енергетичному спектрі атома водню (рис.) забороненим переходом є.....

Варіанти відповідей:

- 1) $2p - 1s$; 2) $3d - 2p$;
3) $4f - 3d$; 4) $2s - 1s$.

Таблиця 1

Радіальна та кутова функції атомат Гідрогену

Квантові числа			Орбіталь	Радіальна хвильова функція	Кутова хвильова функція
n	l	m _l			
1	2	3	4	5	6
1	0	0	1s	$2\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \cdot e^{-\frac{Zr}{a_0}}$	$\frac{1}{2\sqrt{\pi}}$
2	0	0	2s	$\frac{1}{2\sqrt{2}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}\left(2-\frac{Zr}{a_0}\right)e^{-\frac{Zr}{2a_0}}$	$\frac{1}{2\sqrt{\pi}}$
2	1	0	2p _z	$\frac{1}{2\sqrt{6}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}\left(\frac{Zr}{a_0}\right)e^{-\frac{Zr}{2a_0}}$	$\frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{\pi}}\cos\theta$
2	1	1	2p _x	—//—	$\frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{\pi}}\sin\theta\cos\varphi$
2	1	-1	2p _y	—//—	$\frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{\pi}}\sin\theta\sin\varphi$
3	0	0	3s	$\frac{2}{81\sqrt{3}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \times$ $\times \left[27 - 18\frac{Zr}{a_0} + 2\left(\frac{Zr}{a_0}\right)^2\right] \cdot e^{-\frac{Zr}{3a_0}}$	$\frac{1}{2\sqrt{\pi}}$
3	1	0	3p _z	$\frac{4}{81\sqrt{6}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \times$ $\times \left[6\frac{Zr}{a_0} - \left(\frac{Zr}{a_0}\right)^2\right] \cdot e^{-\frac{Zr}{3a_0}}$	$\frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{\pi}}\cos\theta$
3	1	1	3p _x	—//—	$\frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{\pi}}\sin\theta\cos\varphi$
3	1	-1	3p _y	—//—	$\frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{\pi}}\sin\theta\sin\varphi$

1	2	3	4	5	6
3	2	0	$3d_{z^2}$	$\frac{4}{81\sqrt{30}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \times$ $\times \left(\frac{Zr}{a_0}\right)^2 \cdot e^{-\frac{Zr}{3a_0}}$	$\frac{\sqrt{15}}{4\sqrt{\pi}}(3\cos^2\theta - 1)$
3	2	1	$3d_{xz}$	—//—	$\frac{\sqrt{30}}{\sqrt{8}\sqrt{\pi}}\sin\theta\cos\theta\cos\varphi$
3	2	-1	$3d_{yz}$	—//—	$\frac{\sqrt{30}}{\sqrt{8}\sqrt{\pi}}\sin\theta\cos\theta\sin\varphi$
3	2	2	$3d_{x^2-y^2}$	—//—	$\frac{\sqrt{15}}{4\sqrt{\pi}}\sin^2\theta\cos 2\varphi$
3	2	-2	$3d_{xy}$	—//—	$\frac{\sqrt{15}}{4\sqrt{\pi}}\sin^2\theta\sin 2\varphi$
4	3	0	$4f_{x^3}$	$\frac{1}{768\sqrt{35}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}$ $\times \left(\frac{Zr}{a_0}\right)^3 \cdot e^{-\frac{Zr}{4a_0}}$	$\frac{\sqrt{70}}{8\sqrt{\pi}}\sin^3\theta \times$ $\times (4\cos^3\varphi - 3\cos\varphi)$
4	3	1	$4f_{y^3}$	—//—	$\frac{\sqrt{70}}{8\sqrt{\pi}}\sin^3\theta \times$ $\times (3\sin\varphi - 4\sin^3\varphi)$
4	3	-1	$4f_{z^3}$	—//—	$\frac{\sqrt{7}}{4\sqrt{\pi}}(5\cos^3\theta - 3\cos\theta)$
4	3	2	$4f_{z^2x}$	—//—	$\frac{\sqrt{42}}{8\sqrt{\pi}}(5\cos^2\theta - 1) \times$ $\times \sin\theta\cos\varphi$
4	3	-2	$4f_{z^2y}$	—//—	$\frac{\sqrt{42}}{8\sqrt{\pi}}(5\cos^2\theta - 1) \times$ $\times \sin\theta\sin\varphi$
4	3	3	$f_{z(x^2-y^2)}$	—//—	$\frac{\sqrt{105}}{4\sqrt{\pi}}\cos\theta\sin^2\theta \times$ $\times (2\cos\varphi - 1)$
4	3	-3	f_{xyz}	—//—	$\frac{\sqrt{105}}{4\sqrt{\pi}}\cos\theta\sin^2\theta \times$ $\times \cos\varphi\sin\varphi$

Рекомендована література:

1. Слета Л.О., Іванов В.В. Квантова хімія. Харків: Фоліо. 2007. – 443 с.
2. Яцимирський В., Яцимирський А. Квантова хімія. — К.: ВПЦ «Київський університет», 2009. — 479 с.
3. Стрижак П.Є. Квантова хімія: Підручник для студентів вищих навчальних закладів. – К.: Вид. дім «КМА», 2009. — 458 с.
4. Курта С.А. Будова речовини.- Івано-Франківськ.. —2007. — 162 с.
5. Сліпенюк Т.С. Будова речовини: Навч.пос. – Чернівці: Рута, 2005. – 76 с.

Завдання для самостійної роботи № 5

Тема заняття: Загальний опис багатоелектронної системи

Опрацюйте тему відповідно до питань:

- Хвильова функція багатоелектронної системи.
- Атомні терми.
- Багатоелектронні атоми та періодична система елементів.
- Закон Г.Мозлі.
- Оператори спіна, їх комутаційні співвідношення.
- Магнітний момент.
- Принцип Паулі.

Величина орбітального, спінового та повного моменту імпульсу електрона:

$$\begin{aligned} |M_l| &= \hbar \sqrt{l(l+1)}, & M_{l,z} &= \hbar m_l, & l &= 0, 1, 2, \dots & -l \leq m_l \leq l \\ |M_s| &= \hbar \sqrt{s(s+1)} = \hbar \frac{\sqrt{3}}{2}, & M_{s,z} &= \hbar m_s = \pm \frac{1}{2} \hbar, & s &= 1/2, & m_s = -\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \\ |M_j| &= \hbar \sqrt{j(j+1)}, & M_{j,z} &= \hbar m_j, & j &= |l-s|, \dots, l+s & -l \leq m_j \leq l \end{aligned}$$

j повного моменту кількості рухів електрона (орбітального плюс спінового) визначає можливі значення квадрата повного моменту: j при заданому l може приймати 2 значення: $j = l \pm 1/2$

Величина орбітального, спінового та повного моменту багатоелектронної системи:

$$\begin{aligned} |M_l| &= \hbar \sqrt{L(L+1)}, & M_{L,z} &= \hbar m_L, & -L &\leq m_L \leq L \\ |M_s| &= \hbar \sqrt{S(S+1)}, & M_{S,z} &= \hbar m_S, & -S &\leq m_S \leq S \\ |M_J| &= \hbar \sqrt{J(J+1)}, & M_{J,z} &= \hbar m_J, & -J &\leq m_J \leq J \end{aligned}$$

Правила складання моментів імпульсу в наближенні $L-S$ зв'язку (воно справедливе для легких атомів):

Правило додавання орбітальних моментів:

Якщо в атомі існують електрони з орбітальними квантовими числами l_1, l_2 , то результуючий орбітальний момент атома може мати квантові числа

$$L = l_1 + l_2, l_1 + l_2 - 1, \dots, |l_1 - l_2|.$$

Правило складання спінових моментів:

Якщо в атомі існують електрони зі спіновими квантовими числами s_1 , s_2 , то результуючий спіновий момент електронної системи може мати квантові числа

$$S = s_1 + s_2, s_1 + s_2 - 1, \dots, |s_1 - s_2|.$$

Повний момент багатоелектронної системи:

$$J = L + S, L + S - 1, \dots, |L - S|.$$

Терм багатоелектронної системи:

$$^{2S+1}[L]_j \text{ де } [L] - \text{позначення числа } L=0,1,2,3\dots \quad s,p,d,f\dots$$

Правила Гунда для еквівалентних електронів у наближенні L-S-зв'язку:

1. Терми з максимальною мультиплетністю мають нижчу енергію
2. Серед термів з однаковою мультиплетністю найменшу енергію мають терми з найбільшим L
3. Серед термів з однаковими L і S найменшу енергію мають терми з найменшим J за оболонок, заповнених до половини включно, і з найбільшим J за оболонок, заповнених більш як наполовину.

Завдання та задачі для самостійного розв'язування:

1. Електрон в атомі Н збуджено в p -стан. Визначити можливі значення квантового числа повного моменту та відповідні величини повного моменту M_j
2. В атомі гелію один електрон перебуває в p -стані, інший - у d -стані. Знайти квантове число повного орбітального моменту L і повний орбітальний момент M_L .
3. Визначити основний електронний терм атомів I та II періодів. Знайти основний терм електронної конфігурації nd^2 у наближенні $L-S$ зв'язку.
4. Записати гамільтоніан атома He в системі CI та атомній системі одиниць. Знайти потенціал іонізації атома He (енергію атома He узяти з розв'язання попередньої задачі).
5. Чому дорівнюють потенціали іонізації таких гелієподібних систем: $\text{Li}^+, \text{C}^{4+}, \text{O}^{6+}$.
6. Знайти терми основного стану атомів Mg, O, P, S, Cr та Cl.
7. У обертовому діапазоні поглинання деякої речовини HX в далекій ІЧ-області діапазону спостерігається кілька ліній поглинання з хвильовими числами (м^{-1}): 13649,4; 15355,6 та 17061,8 м^{-1} . Рівноважна міжядерна відстань $r_e = 1,4146 \cdot 10^{-10}$ м. Визначте атомну масу атома X.

8. У ІЧ-області спектру HCl поглинає випромінювання з ν :

№ лінії	1	2	3	4	5	6	7
$\nu, \text{м}^{-1}$	8538,4	10673,0	12807,6	14942,2	17076,8	19211,4	21346,6

Визначте середнє значення моменту інерції та між'ядерну відстань.

9. Розрахуйте хвильове число лінії у обертовому спектрі поглинання $^{19}\text{F}^{79}\text{Br}$, яка відповідає переходу молекули з рівня $j = 1$ на квантовий обертовий $j = 2$, якщо рівноважна між'ядерна відстань $r_e = 1,7555 \cdot 10^{-10} \text{ м}$.

10. Визначте енергію обертового руху $^{19}\text{F}^{79}\text{Br}$ на обертовому квантовому рівні $j = 1$, якщо рівноважна між'ядерна відстань $r_e = 1,7555 \cdot 10^{-10} \text{ м}$.

11. На яку величину відрізнятяться хвильові числа ліній поглинання у обертових спектрах $^1\text{H}^{35}\text{Cl}$ та $^1\text{H}^{37}\text{Cl}$, якщо лінія пов'язана з переходом молекули з обертового квантового рівня $j = 6$ на обертовий квантовий рівень $j = 7$. Рівноважна між'ядерна відстань у обох молекул однакова і дорівнює $1,2746 \cdot 10^{-10} \text{ м}$.

12. Значення рівноважної між'ядерної відстані молекули $^1\text{H}^{127}\text{I}$ [М]. Розрахуйте момент інерції молекули.

13. Визначте енергію обертання молекули на десяти перших обертових квантових рівнях та хвильові числа дев'яти перших ліній у обертовому спектрі поглинання, якщо момент інерції молекули $I = 4,295 \cdot 10^{-47} \text{ кг} \cdot \text{м}^2$. Молекула $^1\text{H}^{127}\text{I}$.

14. Визначте хвильові числа перших десяти ліній у спектрі поглинання $^1\text{H}^{19}\text{F}$ у дальній ІЧ-області.

15. По різниці хвильових чисел сусідніх ліній поглинання в далекій ІЧ-області спектра розрахуйте момент інерції та рівноважну між'ядерну відстань у молекулі А.

№ варіанта	Молекула А	$\Delta \tilde{\nu}, \text{см}^{-1}$	№ варіанта	Молекула А	$\Delta \tilde{\nu}, \text{см}^{-1}$
1	$^1\text{H}^{35}\text{Cl}$	21,35	14	$^2\text{H}^{81}\text{Br}$	8,64
2	$^2\text{H}^{35}\text{Cl}$	10,97	15	$^3\text{H}^{81}\text{Br}$	5,83
3	$^3\text{H}^{35}\text{Cl}$	7,51	16	$^{35}\text{Cl}^{19}\text{F}$	1,03
4	$^1\text{H}^{37}\text{Cl}$	21,32	17	$^{37}\text{Cl}^{19}\text{F}$	1,01
5	$^2\text{H}^{37}\text{Cl}$	10,94	18	$^{35}\text{Cl}^{79}\text{Br}$	0,195
6	$^3\text{H}^{37}\text{Cl}$	7,48	19	$^{35}\text{Cl}^{81}\text{Br}$	0,194
7	$^1\text{H}^{79}\text{Br}$	17,06	20	$^{37}\text{Cl}^{79}\text{Br}$	0,188
8	$^2\text{H}^{79}\text{Br}$	8,64	21	$^{37}\text{Cl}^{81}\text{Br}$	0,187
9	$^2\text{H}^{79}\text{Br}$	5,83	22	$^1\text{H}^{127}\text{I}$	13,13
10	$^3\text{H}^{79}\text{Br}$	42,22	23	$^2\text{H}^{127}\text{I}$	6,61
11	$^1\text{H}^{35}\text{F}$	22,17	24	$^3\text{H}^{127}\text{I}$	4,44
12	$^2\text{H}^{35}\text{F}$	15,48	25	$^{12}\text{C}^{14}\text{N}$	3,80
13	$^3\text{H}^{35}\text{F}$	17,06	26	$^{11}\text{C}^{14}\text{N}$	4,20

16. Визначте між'ядерну відстань r_e C-O молекулі CO_2 , якщо момент інерції $I = 71,758 \cdot 10^{-47} \text{ кг} \cdot \text{м}^2$. Яка симетрія молекули CO_2

17. Визначте момент інерції та обертальну постійну (м^{-1}) молекули OCS , якщо в мікрохвильовій ділянці спектра в спектрі поглинання спостерігаються максимуми поглинання (м^{-1}): 81,143; 121,714; 126,686; 202,886. Молекула OCS лінійна.

18. Визначити максимальне коливальне квантове число для $^{19}\text{F}^{79}\text{Br}$, якщо $\omega_e = 672,6 \cdot 10^2 \text{ м}^{-1}$ і $\chi_e = 6,69 \cdot 10^{-3}$.

19. Визначити енергію коливального руху атомів у молекулі $^{19}\text{F}^{79}\text{Br}$ на нульовому та максимальному коливальних квантових рівнях. Визначте енергію хімічного зв'язку, якщо $\omega_e = 672,6 \cdot 10^2 \text{ м}^{-1}$ і $\chi_e = 6,69 \cdot 10^{-3}$ та $v_{\text{max}} = 74$.

20. Обчисліть число максимумів поглинання в чисто обертальному спектрі HF , якщо $\omega_e = 4139 \text{ м}^{-1}$ $\chi_e = 0,0215$.

21. Визначте енергію коливального руху молекули $^{12}\text{C}^{14}\text{N}$ на нульовому та першому коливальних рівнях. $\omega_e = 2028,62 \text{ м}^{-1}$ і $\omega_e \cdot \chi_e = 13,11 \text{ см}^{-1}$.

22. Визначити максимальне квантове число, енергію коливань на нульовому та максимальному квантових рівнях та енергію хімічного зв'язку молекули $^1\text{H}^{19}\text{F}$, якщо $\omega_e = 4141,03 \text{ см}^{-1}$ та $\chi_e = 0,0218$.

23. Визначте постійну силову для молекули $^1\text{H}^{19}\text{F}$, якщо $\omega_e = 4,141 \text{ м}^{-1}$.

24. Визначте енергії коливального руху атомів у молекулі $^{19}\text{F}^{79}\text{Br}$ на коливальних квантових рівнях $v = 5, 20, 30$, якщо $\omega_e = 672,6 \cdot 10^2 \text{ м}^{-1}$ $\chi_e = 6,69 \cdot 10^{-3}$.

Рекомендована література:

1. Слєта Л.О., Іванов В.В. Квантова хімія. Харків: Фоліо. 2007. – 443 с.
2. Яцимирський В., Яцимирський А. Квантова хімія. — К.: ВПЦ «Київський університет», 2009. — 479 с.
3. Стрижак П.Є. Квантова хімія: Підручник для студентів вищих навчальних закладів. – К.: Вид. дім «КМА», 2009. — 458 с.
4. Курта С.А. Будова речовини.- Івано-Франківськ.. —2007. — 162 с.
5. Сліпенюк Т.С. Будова речовини: Навч.пос. – Чернівці: Рута, 2005. – 76 с.

МОДУЛЬ 2

Квантова хімія

Завдання для самостійної роботи № 6

Тема заняття: Метод молекулярних орбіталей молекул

Опрацюйте тему відповідно до питань:

- Молекулярний іон Гідрогену.
- Метод МО ЛКАО для 2х атомних молекул.
- Метод МО для багатоатомних молекул.

Метод МО ЛКАО

В методі МО припускають, що в молекулі, як і в атомі, можна побудувати набір дозволених дискретних енергетичних рівнів та відповідних їм хвильових функцій (молекулярних орбіталей), що описують поведінку електрона у молекулі. На кожному енергетичному рівні може розташовуватися трохи більше двох електронів. Для побудови хвильових функцій МО часто використовують атомні орбіталі (АО), описуючи кожен МО ψ_i як лінійну комбінацію АТ ϕ_k (МО ЛКАО):

$$\psi_i = \sum_k c_{ki} \phi_k.$$

Біля кожного ядра в молекулі поведінка електрона має бути схожою на його поведінка в атомі та описуватися відповідними даному атому АО. При цьому наближене рішення (оскільки для молекул рівняння Шредінгера може бути вирішено тільки приблизно!) хоча б у цих областях буде досить коректним. В області між ядрами МО описуватиметься суперпозицією АТ. Завдання знаходження хвильових функцій МО при цьому зводиться до знаходження коефіцієнтів СКІ. Крім цього, для кожної МО необхідно визначити відповідну їй енергію.

1. Вибрати базові орбіталі $\chi_1, \chi_2, \dots, \chi_m$
2. Вибрати наближені МО у вигляді ЛКАО базових АО:

$$\varphi_i = N_i (c_{i1} \chi_1 + c_{i2} \chi_2 + \dots + c_{im} \chi_m), \quad i = 1, 2, \dots, m$$

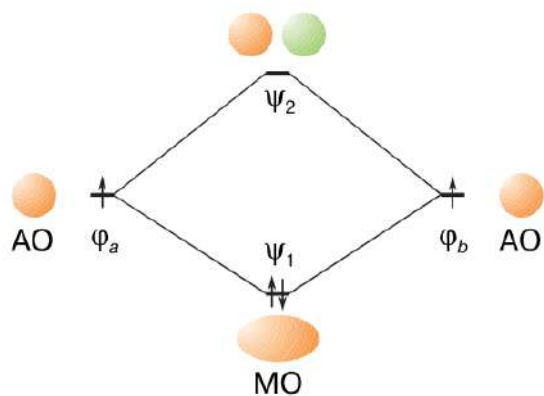


Схема утворення МО в молекулі водню.

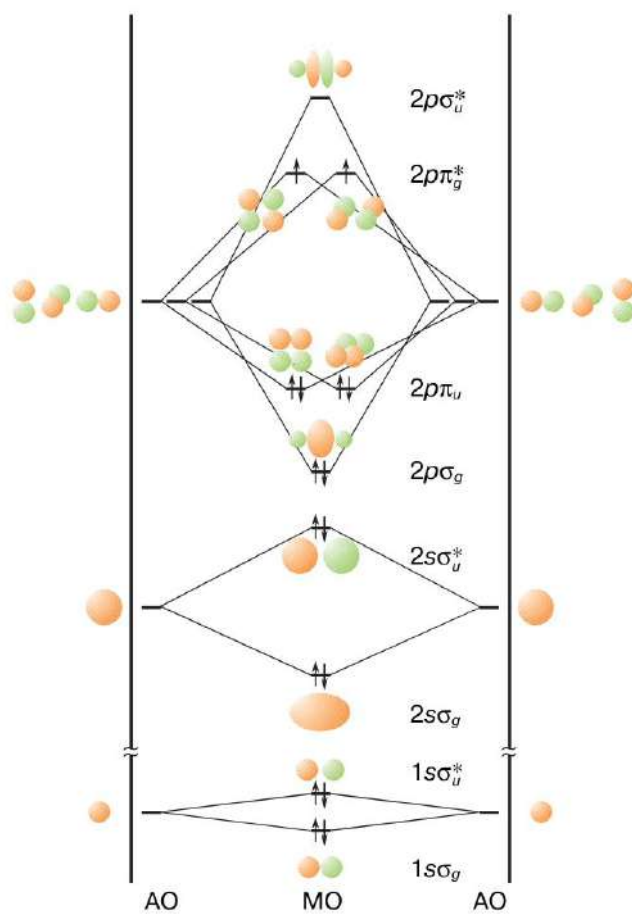


Схема утворення МО в молекулі кисню.

Завдання та задачі для самостійного розв'язування:

1. Запишіть молекулярні орбіталі молекули O_2 та іонів O^{2+} , O_2^+ , O_2^- , O_2^{2-} . Розташуйте частинки в ряд зі збільшенням рівноважної між'ядерної відстані на підставі порядку зв'язку. Обчисліть порядок зв'язку у кожній частинці. Розташуйте енергії зв'язків у зростаючій послідовності.
2. Намалюйте енергетичну діаграму для молекули Li_2 . Розташуйте електрони на енергетичних рівнях. Визначте порядок зв'язку. Встановіть, чи має молекула Li_2 магнітні властивості.
3. Чим можна пояснити, що молекула H_2 рівноважна між'ядерна відстань $0,741 \cdot 10^{-8}$ см, а молекула Li_2 $2,672 \cdot 10^{-8}$ см?
4. Намалюйте енергетичну діаграму молекули O_2 . Визначте порядок зв'язку. Молекула O_2 має магнітні властивості.
5. Запишіть МО молекули Be_2 . Визначте порядок зв'язку. Зробіть висновок щодо між'ядерної відстані та енергії хімічного зв'язку.
6. Класифікувати МО етилену за НП ГС молекули.
7. Класифікувати МО алільного радикала за НП ГС молекули.
8. Намалюйте енергетичну діаграму молекули BN . Визначте порядок зв'язку у молекулі. Молекула BN має магнітні властивості. Електронегативність атома N більша за електронегативність атома B.
9. Запишіть МО іона CO^+ та молекул VO та CN . Визначте порядок зв'язку у кожній частинці. Визначте терм основного стану стану всіх частинок.

Рекомендована література:

1. Слєта Л.О., Іванов В.В. Квантова хімія. Харків: Фоліо. 2007. – 443 с.
2. Яцимирський В., Яцимирський А. Квантова хімія. — К.: ВПЦ «Київський університет», 2009. — 479 с.
3. Стрижак П.Є. Квантова хімія: Підручник для студентів вищих навчальних закладів. – К.: Вид. дім «КМА», 2009. — 458 с.
4. Курта С.А. Будова речовини.- Івано-Франківськ.. —2007. — 162 с.
5. Сліпенюк Т.С. Будова речовини: Навч.пос. – Чернівці: Рута, 2005. – 76 с.

Завдання для самостійної роботи № 7

Тема заняття: Метод молекулярних орбіталей Хюккеля

Опрацюйте тему відповідно до питань:

- Основні наближення і обчислювальна схема методу МОХ.
- Молекулярні діаграми для спряжених систем.
- Електронна структура спряжених вуглеводнів.
- Теорія реакційної здатності органічних сполук.

Метод молекулярних орбіталей Хюккеля (МОХ)

1. Розглядаються молекули зі сполученими π - зв'язками.
2. Як базові АО розглядаються тільки валентні p -АО карбону або гетероатомів, які дають внесок у π -систему.
3. Використовується наближення нульового диференціального перекривання (НДП):

$$\chi_i \chi_j = \delta_{ij}, \quad \delta_{ij} = \begin{cases} 1, & i = j \\ 0, & i \neq j \end{cases}$$

4. Внаслідок наближення НДП усі інтеграли спрощуються:

$$(\mu\nu | \lambda\sigma) = 0, \quad S_{\mu\nu} = \delta_{\mu\nu}, \quad H_{\mu\mu} = \alpha$$
$$H_{\mu\nu} = \begin{cases} \beta \\ 0 \end{cases}$$

Величини α, β є емпіричними параметрами методу.

5. Рівняння Рутана зводяться до вигляду:

$$\sum_{\mu} (H_{\mu\nu} - \varepsilon_i \delta_{\mu\nu}) c_{i\mu} = 0$$

6. Енергія молекули:

$$E = \sum_i n_i \varepsilon_i \quad (n_i - \text{заселеність } i\text{-той МО, } n_i = 0, 1 \text{ или } 2).$$

8. Заряди атомів (А - номер АО даного атома, n_A - число електронів, що вносяться в π -систему атомом А):

$$q_A = n_A - \sum_i n_i c_{iA}^2$$

9. Порядки зв'язків і валентності атомів:

$$p_{AB} = \sum_i n_i c_{iA} c_{iB}, \quad V_A = \sum_B p_{AB}$$

Якщо до π -системи, крім карбону, входить гетероатом Х, значення параметрів α і β змінюються:

$$\alpha_X = \alpha_C + h\beta_{CC}, \beta_{CX} = k\beta_{CC}.$$

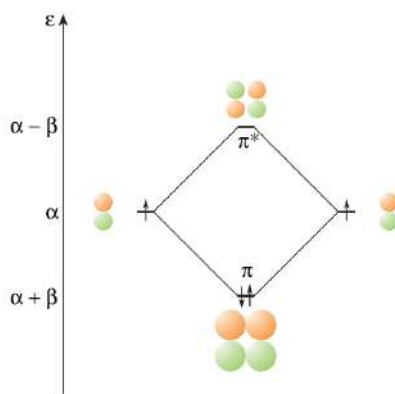
Величини h і k є емпіричними параметрами і визначаються природою гетероатома та його зв'язків:

Атом	Зв'язок	h	k
C·	=C–C= (аром.св.)	0	1
	=C–C=	0	0.9
	–C=C–	0	1.1
N·	–N=C<	0.5	1
	–N=N–	0.5	1
	–N=Ar	0.5	0.8
N:	>N–C=	1.5	0.8
	>N–Ar	1.5	1
N· ⁺	O ₂ N–Ar	2	0.7
O·	O=C<	1	0.8
O:	–O–C=	2	0.8
O· ⁺	–O ⁺ =C<	2.5	1
S·	S=C<	0.4	1
S:	–S–C=	1.3	0.6
F	F–C=	3	0.7
Cl	Cl–C=	2	0.4
Br	Br–C=	1.5	0.3

Молекула етилену

Вихідними для цієї молекули є ϕ_1 і ϕ_2 2р АО атомів карбону, на кожній з яких розташовано по одному електрону з енергією α (теоретично Хюккеля немає необхідності використовувати чисельні значення параметрів, всі енергетичні характеристики прийнято виражати через α та β).

В результаті розрахунку отримано дві МО: π – зв'язуюча $\psi_1 = 0,707 \phi_1 + 0,707 \phi_2$ з енергією $\varepsilon_1 = \alpha + \beta$ і π^* – розпушуюча $\psi_2 = 0,707 \phi_1 - 0,707 \phi_2$ з енергією $\varepsilon_2 = \alpha - \beta$. Негативному знаку при C_{22} на схемі відповідає зміна знаків у пелюстках р АО на протилежні. В основному стан молекули етилену обидва електрони займають нижню МО ψ_1 та π -електронна енергія E_π становить $2\alpha + 2\beta$. Енергія π -зв'язку в етилені, таким чином, дорівнює 2β . Інша експериментальна характеристика, яка може бути оцінена при розрахунку, – енергія переходу електрона з орбіталі ψ_1 на ψ_2 також дорівнює $\varepsilon_2 - \varepsilon_1 = 2\beta$.



π-МО в молекулі етилену

Задачі для самостійного розв'язування:

1. Методом МОХ знайти енергії МО, коефіцієнти розкладання МО, енергію молекули, орбітальні заряди атомів і порядки зв'язків у молекулі формальдегіду $\text{CH}_2 = \text{O}$.
2. Використовуючи приведення гамільтоніану до блочно-діагонального вигляду в базисі симетризованих орбіталей, знайти енергію МО, коефіцієнти розкладання МО за АО та енергію молекули формальдегіду $\text{H}_2\text{C}=\text{O}$ методом МОХ. Класифікувати МО за НП ГС молекули.
3. Використовуючи приведення гамільтоніану до блочно-діагонального вигляду в базисі симетризованих орбіталей знайти енергію МО, коефіцієнти розкладання МО за АО та енергію молекул дихлоретиленів $\text{H}_2\text{C}=\text{CCl}_2$ і *cis*- $\text{CHCl}=\text{CHCl}$ методом МОХ. Класифікувати МО за НП ГС молекули.

Рекомендована література:

1. Слета Л.О., Іванов В.В. Квантова хімія. Харків: Фоліо. 2007. – 443 с.
2. Яцимирський В., Яцимирський А. Квантова хімія. — К.: ВПЦ «Київський університет», 2009. — 479 с.
3. Стрижак П.Є. Квантова хімія: Підручник для студентів вищих навчальних закладів. – К.: Вид. дім «КМА», 2009. — 458 с.
4. Курта С.А. Будова речовини.- Івано-Франківськ.. —2007. — 162 с.
5. Сліпенюк Т.С. Будова речовини: Навч.пос. – Чернівці: Рута, 2005. – 76 с.

Завдання для самостійної роботи № 8

Тема заняття: Метод валентних зв'язків та симетрія молекул

Опрацюйте тему відповідно до питань:

- Резонансні структури. Кількісні характеристик молекул.
- Розрахунок енергії зв'язку в молекулі водню.
- Елементи теорії груп. Симетрія молекул. Елементи теорії лінійних зображень.
- Неемпіричні методи у квантовій хімії.

Приклад розв'язування задачі:

За допомогою енергії зв'язків можна визначити тепловий ефект реакції, якщо теплота утворення сполуки невідома (табличні енергії зв'язків відносяться лише до газів).

$$\Delta H = \sum E_{\text{розрив. зв'язків}} - \sum E_{\text{утвор. зв'язків}}$$

Для реакції $\text{CH}_4 + \text{Cl}_2 \rightarrow \text{CH}_3\text{Cl} + \text{HCl}$

$$\Delta H = E(\text{C-H}) + E(\text{Cl-Cl}) - E(\text{C-Cl}) - E(\text{H-Cl})$$

$$\Delta H = 413 + 242 - 328 - 431 = -104 \text{ кДж}$$

Розрахуйте теплоту утворення H_2O , користуючись рівнянням Полінга.

Рівняння Полінга має вигляд:

$$Q_f = 100 \sum (\chi_A - \chi_B)^2 - 6,5 \sum (\chi_A - \chi_B)^4 - 235n(\text{N}) - 106n(\text{O})$$

де Q_f – теплота утворення, χ – електронегативності атомів A і B ,
 $n(\text{H})$ і $n(\text{O})$ – число атомів Гідрогену і Оксигену.

Підставляємо в рівняння значення $\chi_{(\text{H})} = 2,1$ $\chi_{(\text{O})} = 3,5$

$$Q_f = 100 \cdot 2 \cdot 1,4^2 - 6,5 \cdot 2 \cdot 1,4^4 - 106 \cdot 1 = 236 \text{ кДж/моль.}$$

Завдання та задачі для самостійного розв'язування:

1. Як змінюється міцність ковалентного зв'язку у молекулах: $\text{BeF}_2 - \text{BeCl}_2 - \text{BeBr}_2 - \text{BeI}_2$?
2. Чому існують молекули NF_3 і PF_5 , але не може існувати молекула NF_5 ?
3. Як з точки зору методів ВЗ можна пояснити більшу міцність зв'язку $\text{C} - \text{O}$ у молекулі CO , ніж у молекулі CO_2 ?
4. Визначте тип гібридизації центрального атома та передбачте геометричну будову таких частинок: OF_2 , H_3O^+ , BeH_2 , SO_3 , SiCl_4 , GaCl_3 , H_3BO_3 , XeF_2 , XeF_4 , XeF_6 , PF_5 , ClF_3 , H_5IO_6 , IF_5 ,?
5. Чому, незважаючи на велику різницю в електронегативностях атомів Карбону ($\chi_{\text{C}} = 2,5$) та Флору ($\chi_{\text{F}} = 2,5$), молекула CF_4 – неполярна?
6. Визначте ступінь йонності (чи величину ефективного заряду на атомах H і Br) зв'язку $\text{H} - \text{Br}$, якщо дипольний момент молекули HBr дорівнює $2,6 \cdot 10^{-30}$ Кл·м, а довжина зв'язку становить $1,41 \cdot 10^{-10}$ м.
7. Обчисліть довжину зв'язку $\text{H} - \text{F}$ в молекулі гідроген флуориду, якщо експериментальний дипольний момент молекули $\mu(\text{H} - \text{F})$ дорівнює $6,4 \cdot 10^{-30}$ Кл·м, а ефективний заряд атома флуору – 0,435.
8. У яких із наведених нижче молекулах дипольний момент молекули близький до нуля: F_2 , COCl_2 , SiH_4 , CHCl_3 , POCl_3 ?
9. Визначте тепловий ефект реакції $\text{C}_2\text{H}_6 + 7/2\text{O}_2 \rightarrow 2\text{CO}_2 + 3\text{H}_2\text{O}(\text{газ})$, використовуючи енергії зв'язків.
10. Визначити групу симетрії лінійних молекул: HCl , H_2 , CO , CO_2 .
11. Визначити групу симетрії нелінійних молекул: H_2O , NH_3 , CH_3Cl , CH_4 , C_2H_4 , C_6H_6 , C_2H_6 (затулована конформація), C_2H_6 (скручена конформація), SiH_4 .
12. Визначити групу симетрії молекул: H_2O_2 , циклобутан, циклогексан, PCl_5 (тригональна біпіраміда), SF_6 , орто-хінон, 1,3,5-триметилбензол, ферецен, біс-бензолхром, C_{60} .
13. Визначте зміну ентальпії реакції (тепловий ефект): $\text{C}_2\text{H}_2 + 2\text{Cl}_2 \rightarrow \text{C}_2\text{H}_2\text{Cl}_4$ за величинами енергій зв'язків (табл.).

Енергії зв'язків

Зв'язок	Енергія (кДж/моль)	Зв'язок	Енергія (кДж/моль)
C – C	348	N $\equiv$ N	941
C – H	413	Si – O	368
C – O	358	Si – Si	226
C = O	799	Si – H	323
C $\equiv$ O	1072	Cl – Cl	242
C = C	614	I – I	151
C $\equiv$ C	839	H – H	436
S = O	323	H – F	567
O ₂	495	H – Cl	431
O – O	146	H – Br	366
O – Cl	203	H – I	299
O – I	234	S – H	339
O – H	463	S – Cl	253
O – N	201	S – Br	218
N – N	163	S – S	266
N = N	418	C – C алмаз	356,2

Рекомендована література:

1. Слєта Л.О., Іванов В.В. Квантова хімія. Харків: Фоліо. 2007. – 443 с.
2. Яцимирський В., Яцимирський А. Квантова хімія. — К.: ВПЦ «Київський університет», 2009. — 479 с.
3. Стрижак П.Є. Квантова хімія: Підручник для студентів вищих навчальних закладів. – К.: Вид. дім «КМА», 2009. — 458 с.
4. Курта С.А. Будова речовини.- Івано-Франківськ.. —2007. — 162 с.
5. Сліпенюк Т.С. Будова речовини: Навч.пос. – Чернівці: Рута, 2005. – 76 с.

Завдання для самостійної роботи № 9

Тема заняття: Електричні властивості молекул

Опрацюйте тему відповідно до питань:

- Електричний дипольний момент багатоатомних молекул.
- Полярні і неполярні речовини. Дипольний момент і симетрія молекул.
- Парціальні дипольні моменти зв'язків і структурних груп.
- Деформація молекул в зовнішньому електричному полі. Індукований дипольний момент і поляризованість молекули.
- Водневий зв'язок. Дисперсійні сили, їх особливості.

Задачі для самостійного розв'язування:

1. Довжина диполя молекули дорівнює $3 \cdot 10^{-9}$ см. обчислити дипольний момент молекули аміаку.
2. Дипольний момент води дорівнює 1,84 D. Чому дорівнює довжина диполя у полярної молекули води.
4. Дипольний момент полярної групи C-Cl дорівнює 2,05 D. Чому дорівнює довжина вектора диполя і як він направлений у зазначеній полярній групі.
5. Визначте дипольний момент для нелінійної молекули FNO.
6. Визначити дипольний момент для пірамідальної молекули F₃.
7. Визначення ступеня іонності зв'язку з різниці електронегативностей атомів, що сполучаються. Який із наведених зв'язків Cs-Cl, Ca-S, Ba-F є найбільш іонним?
8. Який із зв'язків – H-N, H-S, H-Ti, H-Li – найбільш полярний? До якого з атомів зміщено електронну хмару в кожному з наведених прикладів?
9. На основі різниці відносних електронегативності атомів елементів вкажіть, як змінюється ступінь іонності зв'язку в сполуках HF, HCl, HBr, HI.
10. В одному з наведених сполук: LiF, BeF₂, BF₃, CF₄ - зв'язок E-F найбільше наближатиметься до іонної.
11. Напишіть електронну конфігурацію наступних частинок: Cd²⁺, Al³⁺, Zr²⁺, Cl⁻.
12. Яку ковалентність може виявляти Сульфур у своїх сполуках?
13. Розташуйте в порядку зростання ступінь іонності зв'язку B - Cl, Na-Cl, Ca - Cl, Be-Cl.
14. Виходячи з електронних структур частинок BN, BO і CO розташуйте їх

у порядку зростання рівноважної міжядерної відстані.

15. Як змінюється довжина зв'язку, енергія дисоціації та магнітні властивості в ряду частинок пункту 8.

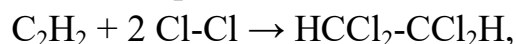
Радіуси йонів елементів, знайдені експериментально, нм

іон	r	іон	r	іон	r
Li ⁺	0.068	Al ³⁺	0.057	Te ²⁻	0.222
Na ⁺	0.095	Cu ²⁺	0.080	H ⁻	0.136
K ⁺	0.133	Zn ²⁺	0.083	F ⁻	0.133
Rb ⁺	0.146	S ²⁻	0.186	Cl ⁻	0.181
Cs ⁺	0.165	Se ²⁻	0.198	Br ⁻	0.196
Mg ²⁺	0.074			I ⁻	0.220
Ca ²⁺	0.104				

16. Константа кристалічних ґрат KCl дорівнює $3,16 \cdot 10^{-10}$ м. Розрахуйте ефективний радіус іона K⁺, якщо іона Cl⁻ дорівнює $1,811 \cdot 10^{-10}$ м.

17. Визначте енергію зв'язку Оксиген-Гідроген у молекулі H₂O, якщо енергія зв'язків відповідно дорівнює 435,9 та 498,7 кДж/моль, а при згорянні 2 моль водню виділяється 483,68 кДж тепло.

18. Розрахуйте зміну ентальпії реакції



якщо енергії зв'язків C-C, C≡C, Cl-Cl, C-Cl відповідно рівні -347,3, -823,1, -242,3 та -345,2 кДж/моль.

19. Обчисліть енергію s-p ковалентного зв'язку в молекулі H - Cl, якщо стандартна ентальпія утворення HCl (г) дорівнює 92,3 кДж/моль, а енергії зв'язків H - H і Cl - Cl відповідно дорівнюють (кДж/моль): - 435,9 і -242,3.

20. Розрахуйте зміну ентальпії в процесі утворення нітроген (II) оксиду, якщо енергії кратних зв'язків нітроген - нітроген, оксиген - оксиген і нітроген – оксиген відповідно дорівнюють (кДж/моль): - 945,6, - 498,7 і - 631,0.

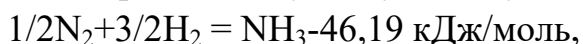
21. Обчисліть енергію - зв'язку C-C, якщо стандартна теплота утворення C₂H₆ із газоподібних вуглецю та водню дорівнює -2815,0 кДж/моль, а енергія зв'язку C-H дорівнює - 411,3 кДж/моль.

22. Визначте стандартну теплоту утворення з простих речовин етилену, якщо енергії зв'язків H-H, C-H та C=C відповідно дорівнюють (кДж/моль): - 435,9, -587,8, а теплота сублімації графіту дорівнює + 715,88 кДж/моль.

23. Обчисліть середню енергію зв'язку H-Te для сполуки H₂Te, якщо стандартні теплоти утворення ентальпій їх сполук дорівнюють 85,77 кДж/моль. Енергія дисоціації H₂ дорівнює 435,9 кДж/моль.

24. Енергія дисоціації НІ дорівнює 298,4 кДж/моль. Чи можна розкласти НІ на елементи при опроміненні ультрафіолетовим світлом ($\lambda = 2 \cdot 10^{-7}$ м)? Яку енергію треба витратити, щоб розкласти $5 \cdot 10^{-3}$ г НІ?

25. Визначте середню енергію зв'язку NH у молекулі аміаку, якщо



а енергії дисоціації N_2 та H_2 відповідно рівні (кДж/моль): 945,6 та 435,9 кДж/моль.

26. Обчисліть енергію кратного зв'язку (σ і 2π) $\text{C}\equiv\text{C}$ у молекулі ацетилену, якщо стандартна теплота утворення ацетилену з простих речовин дорівнює 226,75 кДж/моль. Теплота сублімації графіту дорівнює +715,88 кДж/моль, а енергія дисоціації водню +435,9 кДж/моль. Енергія зв'язку C-H дорівнює - 402,9 кДж/моль.

27. Розрахуйте ентальпію реакції $6\text{C}(\text{г}) + 6\text{H}(\text{г}) = \text{C}_6\text{H}_6(\text{г})$

а) за ентальпіями утворення;

б) за енергіями зв'язку, подвійні зв'язки в молекулі C_6H_6 фіксовані.

Рекомендована література:

1. Слєта Л.О., Іванов В.В. Квантова хімія. Харків: Фоліо. 2007. – 443 с.
2. Яцимирський В., Яцимирський А. Квантова хімія. — К.: ВПЦ «Київський університет», 2009. — 479 с.
3. Стрижак П.Є. Квантова хімія: Підручник для студентів вищих навчальних закладів. — К.: Вид. дім «КМА», 2009. — 458 с.
4. Курта С.А. Будова речовини.- Івано-Франківськ.. —2007. — 162 с.
5. Сліпенюк Т.С. Будова речовини: Навч.пос. — Чернівці: Рута, 2005. — 76 с.

Завдання для самостійної роботи № 10

Тема заняття: Теорія кристалічного поля

Опрацюйте тему відповідно до питань:

- Опис будови комплексних сполук за допомогою теорії кристалічного поля (ТКП).
- Аналіз розщеплення d-рівнів центрального іона в електростатичних полях різної симетрії.
- Параметри розщеплення. енергія стабілізації кристалічним полем (ЕСКП).
- Аналіз електронних спектрів і магнітних властивостей комплексів на основі ТКП.

Завдання та задачі для самостійного розв'язування:

1. Визначте тип гібридизації і просторову структуру комплексних йонів:
 $[\text{PdCl}]^{2-}$ - діамагнітний; $[\text{CoCl}_4]^-$ парамагнітний; $[\text{Pb}(\text{OH})_4]^{2-}$, $[\text{Be}(\text{OH})_4]^{2-}$, $[\text{Al}(\text{H}_2\text{O})_6]^{3+}$, $[\text{Zn}(\text{H}_2\text{O})_4]^{2+}$, $[\text{HgBr}_4]^{2-}$, $[\text{Cd}(\text{H}_2\text{O})_2(\text{NH}_3)_4]^{2+}$
2. Визначте забарвлення комплексного іона $[\text{Ti}(\text{H}_2\text{O})_6]^{3+}$, якщо енергія розщеплення енергетичних рівнів дорівнює $\Delta = 241,9$ кДж/моль. ($\lambda = 495$ синьо-зелений, спост - червоний).
3. Визначте число неспарених електронів у високоспиновому комплексі $[\text{Fe}(\text{H}_2\text{O})_6]^{3+}$, якщо певна експериментально молярна магнітна сприйнятливість дорівнює 0,0146. Вкажіть тип гібрид. орбіталей ЦА. ($\mu = 2,84 \sqrt{0,0146 \cdot 298} = 5,92$ магнетонів Бора. $5e, sp^3 d^2$).

Довжини хвиль спектру та відповідні їм забарвлення

λ погл. світла, нм	Колір погл. випромінювання	Колір, що спостерігається (доп. колір)
400 – 435	фіолетовий	жовто-зелений
435 - 480	синій	Жовтий
480 - 490	зеленувато-синій	Помаранчевий
490 – 500	синьо-зелений	Червоний
500 – 560	зелений	Пурпурний
560 – 580	жовто-зелений	Фіолетовий
580 - 595	Жовтий	Синій
595 - 605	Помаранчевий	зеленувато-синій
605 - 730	Червоний	синьо-зелений
730 - 760	Пурпурний	Зелений

Рекомендована література:

1. Слета Л.О., Іванов В.В. Квантова хімія. Харків: Фоліо. 2007. – 443 с.
2. Яцимирський В., Яцимирський А. Квантова хімія. — К.: ВПЦ «Київський університет», 2009. — 479 с.
3. Стрижак П.Є. Квантова хімія: Підручник для студентів вищих навчальних закладів. – К.: Вид. дім «КМА», 2009. — 458 с.
4. Курта С.А. Будова речовини.- Івано-Франківськ.. —2007. — 162 с.
5. Сліпенюк Т.С. Будова речовини: Навч.пос. – Чернівці: Рута, 2005. – 76 с.

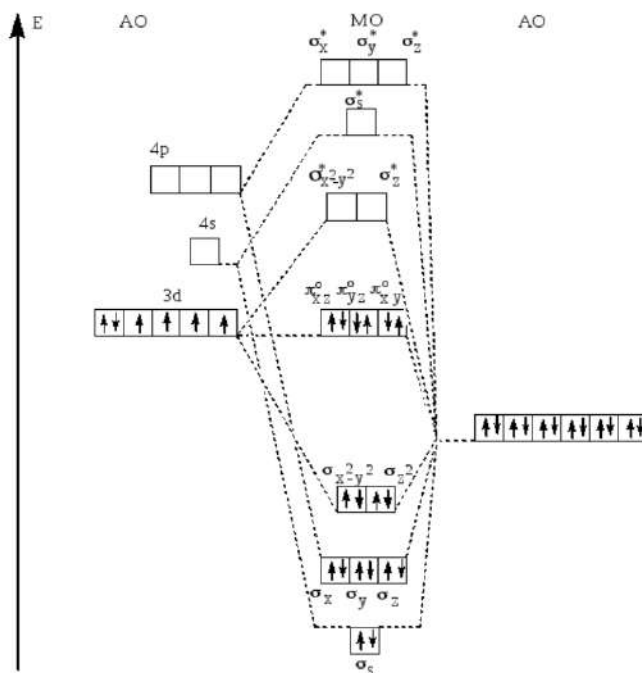
Завдання для самостійної роботи № 11

Тема заняття: Теорія поля лігандів

Опрацюйте тему відповідно до питань

- Основи теорії поля лігандів (ТПЛ).
- π -зв'язку в комплексних сполуках.
- Правило 18 електронів.

Рис. Схема розподілу валентних електронів по МО октаедричного низькоспінового комплексного іона $[\text{Co}(\text{NH}_3)_6]^{3+}$



Рекомендована література:

1. Слета Л.О., Іванов В.В. Квантова хімія. Харків: Фоліо. 2007. – 443 с.
2. Яцимирський В., Яцимирський А. Квантова хімія. — К.: ВПЦ «Київський університет», 2009. — 479 с.
3. Стрижак П.Є. Квантова хімія: Підручник для студентів вищих навчальних закладів. – К.: Вид. дім «КМА», 2009. — 458 с.
4. Курта С.А. Будова речовини.- Івано-Франківськ.. —2007. — 162 с.
5. Сліпенюк Т.С. Будова речовини: Навч.пос. – Чернівці: Рута, 2005. – 76 с.

Рекомендована література

Основна:

1. Слєта Л.О., Іванов В.В. Квантова хімія. Харків: Фоліо. 2007. – 443 с.
2. Яцимирський В., Яцимирський А. Квантова хімія. — К.: ВПЦ «Київський університет», 2009. — 479 с.
3. Стрижак П.Є. Квантова хімія: Підручник для студентів вищих навчальних закладів. – К.: Вид. дім «КМА», 2009. — 458 с.
4. Курта С.А. Будова речовини.- Івано-Франківськ.. —2007. — 162.
5. Сліпенюк Т.С. Будова речовини: Навч.пос. – Чернівці: Рута, 2005. – 76 с.

Додаткова

1. Черановський В.О., Іванова К.Ф. Основи будови речовини. Навчальний посібник для студентів хімічного факультету – Харків: ХНУ, 2003. -121 с.
2. Телегус В.С., Бодак О.І., Заречнюк О.С., Кінжибало В.В. Основи загальної хімії. – Львів: Світ, 2000. - 424 с.

Інтернет ресурси:

1. Бібліотека Житомирського державного університету імені Івана Франка [Електронний ресурс] – Режим доступу до ресурсу: http://irbis.zu.edu.ua/cgi-bin/irbis64r_11/cgiirbis_64.exe
2. Бібліотека українських підручників [Електронний ресурс] – Режим доступу до ресурсу: <http://pidruchniki.ws/>
3. Державна науково-педагогічна бібліотека України ім. В. О. Сухомлинського. [Електронний ресурс] – Режим доступу до ресурсу: www.dnppb.gov.ua
4. Національна бібліотека України імені В.І.Вернадського: режим доступу: <http://nbuv.gov.ua>

Література, використана при укладанні методичних матеріалів

1. Будова атома та періодичність: навчальний посібник (для здобувачів вищої освіти СО «Бакалавр» напряму підготовки «Хімія»); видання друге, доповнене / укладачі: Г. М. Розанцев, С. А. Неділько, С. В. Радіо. — Вінниця: ДонНУ імені Василя Стуса, 2017. — 182 с.
2. Бугра А.В., Коновал О.А. Методика самостійної роботи студентів : навчально-методичний посібник / А.В. Бугра, О.А. Коновал. – Кривий Ріг : КПІ ДВНЗ «КНУ», 2014 - 124 с.
3. Будова речовини : навчально-методичний посібник / О. В. Перлова. – Одеса : «Одеський національний університет імені І. І. Мечникова», 2014. – 92 с.