

Міністерство освіти і науки України

Сумський державний університет

Кафедра теоретичної та прикладної хімії

Методичні рекомендації до практичних занять з дисципліни

КРИСТАЛОХІМІЯ. БУДОВА РЕЧОВИНИ

Суми – 2019

Практичне заняття № 1

Будова атома. Хвильові властивості матеріальних частинок. Радіоактивність.

1. Наукові відкриття, що сприяли створенню будови атома. Моделі будови атома.
2. Двоїста природа світла. Теорія будови атома Н. Бора.
3. Корпускулярно-хвильовий дуалізм. Принцип невизначеності. Хвильове рівняння Шредінгера.
4. Хвильові функції та електронні орбіталі. Система квантових чисел як характеристика енергетичного стану електрона.

Контрольні питання

1. Обчислити енергію квантів випромінювання з довжиною хвилі 300 нм у джоулях, електронвольтах і джоулях/моль.
2. Знайти масу фотону: а) червоних променів світла ($\lambda=700$ нм); б) рентгенівських променів ($\lambda=25$ пм); в) γ -променів ($\lambda=1,24$ пм).
3. Незбуджений атом Гідрогену поглинає квант випромінювання з довжиною хвилі $\lambda=102,6$ нм. Розрахувати, користуючись теорією Бора, радіус електронної орбіти збудженого атома Гідрогену.
4. Знайти швидкість електрона, вибитого квантом світла з енергією 15 еВ з атома Гідрогену, що перебуває в основному стані.
5. Спектральний аналіз.
6. Обчислити потенціал йонізації атома Гідрогену.
7. Обчисліть невизначеність швидкості електрона в атомі, якщо невизначеність його координати прийняти рівною радіусу другої борівської орбіти. Порівняти невизначеність швидкості зі швидкістю електрона.
8. Складіть електронну формулу та електронно-графічну схему двох зовнішніх енергетичних рівнів для таких частинок: а) атома Ag; б) йона S^{2-} ; в) йона K^+ ; г) йона Zn^{2+} . Які з наведених частинок є ізоелектронними? Відповідь поясніть.

Практичне заняття № 2

Будова та властивості атомних ядер

1. Склад і будова атомних ядер.
2. Радіоактивність та види радіоактивних перетворень. Ядерні реакції.

Контрольні питання

1. Що таке ізотопи, ізобари, ізотони? Навести приклади.
2. Дати визначення нуклонного числа та дефекту маси.
3. Що таке енергія зв'язку ядра? Як її обчислюють?
4. Природній Галій складається з ізотопів ^{71}Ga та ^{69}Ga . В якому кількісному співвідношенні знаходяться між собою числа атомів цих ізотопів, якщо середня атомна маса Галію дорівнює 69,82 а.о.м.?
5. Обчисліть енергію зв'язку в ядрах ізотопів Гідрогену. Який із ізотопів є найменш стійким?
6. Знайти енергію, що виділяється при реакції $^7_3\text{Li} + ^2_1\text{H} \rightarrow ^8_4\text{Be} + ^1_0\text{n}$
7. Написати схеми радіоактивних перетворень:
а) $^{235}_{92}\text{U} \xrightarrow{-\alpha}$; б) $^{86}_{37}\text{Rb} \xrightarrow{-\beta^-}$; в) $^{239}_{94}\text{Pu} \xrightarrow{-\alpha}$; г) $^{11}_6\text{C} \xrightarrow{-\beta^+}$;
д) $^{152}_{62}\text{Sm} \xrightarrow{?} ^{148}_{60}\text{Nd}$; е) $^{111}_{46}\text{Sm} \xrightarrow{?} ^{111}_{47}\text{Nd}$;
ж) $^{61}_{28}\text{Ni} + ^1_1\text{H} \rightarrow ? \rightarrow ? + ^1_0\text{n}$; з) $^{27}_{13}\text{Al} + ^1_1\text{H} \rightarrow ? + ^4_2\text{He}$.
9. На чому базується метод радіоактивної індикації?
10. Яка маса ізотопу ^{81}Sr ($T_{1/2} = 8,5$ год.) залишиться через 25,5 год. зберігання, якщо початкова маса його була 200 мг?
11. Середня тривалість життя радіоактивного елемента 86,4 год. Обчислити період його піврозпаду.

Практичне заняття № 3

Основні характеристики хімічного зв'язку.

Метод валентних зв'язків.

3. Розвиток уявлень про хімічний зв'язок.
4. Причини утворення хімічного зв'язку.
5. Основні характеристики хімічного зв'язку (енергія, кратність, довжина та полярність).
6. Основні положення методу валентних зв'язків.

Контрольні питання

8. Пояснити в чому полягає відмінність між поняттями ступінь окиснення та валентність, ефективний заряд атома, заряд йона, координаційне число? Порівняти їх значення на прикладі BaF_2 , CO_2 , NH_3 , NH_4^+ , HNO_3 , BF_4^- .
9. Назвати причину існування полярних і неполярних зв'язків. Чи завжди молекули з полярними зв'язками є полярними? пояснити на прикладах сполук: BF_3 , CH_4 , NH_3 , H_2O , CO_2 .
10. Що таке дипольний момент і в яких випадках він утворюється?
11. Дипольні моменти молекул CO_2 і CS_2 дорівнюють нулю, а COS – досить високий. Зобразить схеми молекул.
12. Обчислити полярність сполуки HBr , якщо довжина диполя її молекули дорівнює 0,018 нм, а довжина зв'язку – 0,144 нм.
13. Поляризація та поляризованість хімічного зв'язку.
14. Ковалентний зв'язок та механізми його утворення.
15. Насиченість та напрямленість ковалентного зв'язку.
16. Сформулювати поняття про σ - і π -зв'язування. Що таке кратні зв'язки? Охарактеризувати причину напрямленості σ -зв'язків та відсутності напрямленості у π -зв'язків.
17. Зобразити способи позитивного, негативного, нульового та σ -, π - та δ -перекривання s - s -, s - p -, p - p -, s - d -, d - d -орбіталей.
18. Охарактеризувати види гібридизації атомних орбіталей та пояснити чим вона зумовлена.

19. З позицій методу валентних зв'язків поясніть геометричну форму частинки, вкажіть тип гібридизації орбіталей центрального атома, наявність σ - і π -зв'язків, зобразіть частинку: BeF_2 , BCl_3 , CF_4 , SCl_2 , PF_5 .
20. Загальнонаукове значення методу ВЗ, його переваги та недоліки.

Практичне заняття № 4

Метод молекулярних орбіталей.

1. Назвіть основні положення методу МО?
2. Назвіть відмінності цього методу МО від методу ВС.

Контрольні питання

1. У чому відмінність між зв'язуючими та розпушуючими орбіталями? Зобразіть просторові конфігурації σ - і π -зв'язуючих і розпушуючих орбіталей.
2. Енергетичні діаграми молекулярних орбіталей двохатомних молекул, що складаються з однакових атомів. Як змінюється кратність зв'язку у простих двохатомних молекул, утворених атомами елементів другого періоду?
3. Поясніть з позицій методу молекулярних орбіталей, як змінюється енергія і довжина зв'язку в ряду частинок N_2^+ , N_2 , N_2^- . Розташуйте частинки в порядку збільшення міцності. Як змінюється при цьому довжина зв'язку?
4. Яка форма запису в методі МО відображає будову молекулярного йона O_2^{2-} ? Чому дорівнює порядок зв'язку в O_2^{2-} , O_2^- , O_2 , O_2^+ ? Які з цих частинок діамагнітні та які парамагнітні?
5. Сформулюйте правила побудови енергетичних діаграм молекулярних орбіталей двохатомних та багатоатомних молекул, що складаються з різних атомів.
6. Розглянути з позиції метода МО можливість утворення молекул B_2 , F_2 , BF . Яка з цих молекул є найбільш стійкою?

7. Чим пояснити близькість значень енергій дисоціації молекул N_2 та CO , CO_2 та N_2O ?
8. Поясніть чому зв'язок атомів галогенів з карбоном слабший, ніж з силіцієм. Які методи можна застосувати для пояснення відмінності в міцності зв'язків?
9. Назвіть переваги та недоліки методу молекулярних орбіталей.

Практичне заняття № 5

Водневий зв'язок. Міжчастинкові взаємодії.

1. Водневий зв'язок. Особливості утворення.
2. Ван-дер-Ваальсова взаємодія молекул.
3. Йонно-молекулярна взаємодія частинок.

Контрольні питання

1. Як впливає наявність водневого зв'язку на будову та властивості речовин? Пояснити на прикладах.
2. Чому водневий зв'язок впливає на властивості NH_3 , H_2O та HF , але не впливає на властивості PH_3 , H_2S і HCl ?
3. Чи можуть одноосновні кислоти утворювати кислі солі? Пояснити чому, навести приклади.
4. В чому полягає причина того, що H_2O_2 кипить при значно більшій температурі ($150\text{ }^\circ C$) ніж вода, хоча їх температури кипіння приблизно однакові ($-0,46\text{ }^\circ C$ та $0\text{ }^\circ C$)?
5. Які факти стверджують про існування міжчастинкових сил?
6. Який газ гірше розчиняється у воді та чому?
7. Чим можна пояснити підвищення температури кипіння зі збільшенням порядкового номеру інертного газу?

Практичне заняття № 6

Кристалічний стан речовини. Симетрія молекул і кристалів.

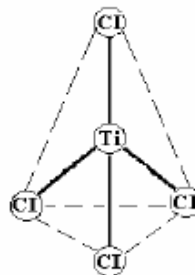
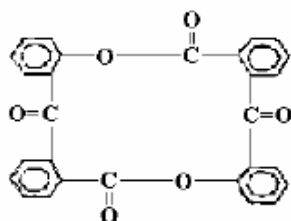
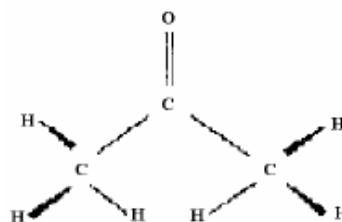
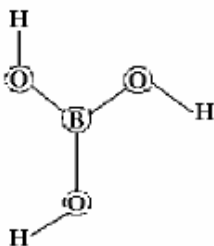
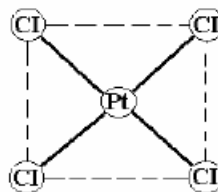
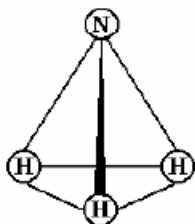
1. Характеристики кристалічного стану речовини.
2. Симетрія. Елементи та операції симетрії.

Контрольні питання

1. Теореми про поєднання елементів симетрії. Розібрати на прикладах.
2. Класи симетрії та їх позначення.
3. Точкові групи симетрії, їх позначення, класифікація та зображення.

Символи Германа-Могена та символи Шенфліса.

4. Позначте формули симетрії кристалічних багатогранників: прямокутного паралелепіпеда; тетраедра; куба; октаедра.
5. Визначте елементи симетрії молекул:

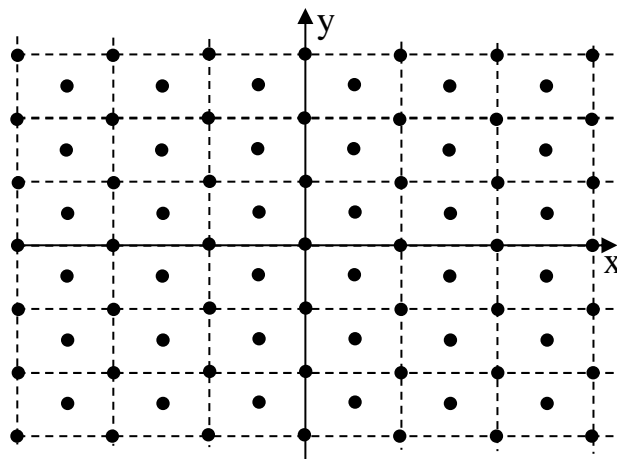


Практичне заняття № 7
Закономірності будови кристалів

1. Просторова гратка та структура кристала.
2. Енергія кристалічної ґратки.

Контрольні питання

1. Ґратки Браве.
2. Шарові пакування.
3. Метод кристалографічного індиціювання:
 - а) символи вузлів;
 - б) символи рядів;
 - в) індекси Міллера.
4. Типи зв'язку в кристалах.
5. Межі стійкості йонних структур.
6. Структурні типи. Опис основних типів структур.
7. Для заданої плоскої сітки записати символи напрямків. Зобразити ці напрямки.



- а) Напрямок, що проходить через початок координат і вузол $[[\frac{3}{2} \frac{1}{2} 0]]$.
 - б) Напрямок, який проходить через вузли $[[\bar{1} 10]]$ та $[[230]]$.
8. Записати індекси Міллера площини, яка відтинає на осях координат відрізки: $2a$, b , $-0.5c$.
 9. Побудувати площину з заданими індексами Міллера: $(\bar{1} 12)$.

Практичне заняття № 8

Елементи кристалохімії. Будова реальних кристалів.

1. Основні поняття кристалохімії:

- а) ізоморфізм;
- б) поліморфізм;
- в) морфотропія.

Контрольні питання

1. Правила зміни міжатомних відстані ізоморфних сумішей.
2. Класифікація дефектів в кристалах.
3. Дефекти в йонних кристалах.
4. Одновимірні дефекти.
5. Дислокації.
6. Визначте структурний тип ґратки, в якій кристалізується проста речовина Ва (кубічна гранецентрована, кубічна об'ємноцентрована або алмазоподібна), використовуючи експериментальні дані ($\rho = 3750 \text{ кг/м}^3$, ребро куба $a = 5,02 \cdot 10^{-10} \text{ м}$), розрахуйте атомний радіус елемента.