

Задание 1. Кристаллические ячейки и энергии кристаллических решеток

- 1.1 Параметр ячейки хлорида натрия равняется 564 пм. Исходя из этого, посчитайте плотность хлорида натрия в кг/м^3 .
- 1.2 Соединение AgX имеет такую же кристаллическую структуру, что и хлорид натрия. Плотность этого соединения равна 6477 кг/м^3 и параметр его ячейки – 577.5 пм. Определите X.
- 1.3 Если радиус катиона лития составляет 90 пм и радиус аниона иода – 206 пм, укажите координационное число лития и оцените расстояние между ближайшими анионами.
- 1.4 Посчитайте радиус аниона фтора, если межатомные расстояния в NaI и NaF составляют 323 пм и 231 пм, соответственно.
- 1.5 Мы с вами знаем, что соединения алюминия и магния с низкими степенями окисления (I) не существуют при обычных условиях. Если мы предположим, что радиусы ионов Al^+ и Mg^+ одинаковы и равны радиусу иона Na^+ , то мы можем приравнять энергии кристаллических решеток для трех соединений типа MCl (где M – обозначает металл). Используя эту информацию и информацию, приведенную в таблице ниже, посчитайте энтальпию образования (D_fH°) для AlCl(тв) и MgCl(тв) .

Значения для пункта 1.5 (все значения даны в кДж/моль)

	Na	Mg	Al
$D_{\text{атм}}H^\circ$	108	148	326
I_1	494	736	326
$(1/2)D(\text{Cl-Cl})$	122	122	122
$-E(\text{Cl})$	-349	-349	-349
$D_fH^\circ(\text{NaCl, тв})$	-411		

- 1.6 Энтропия образования NaCl(тв) равна $-90.6 \text{ Дж/(моль}\cdot\text{К)}$. Предположив, что энтропии образования AlCl(тв) и MgCl(тв) равны энтропии образования NaCl(тв) , рассчитайте изменения энергий Гиббса для этих трех ионных соединений. Попробуйте дать объяснение неустойчивости низкозарядных соединений алюминия и магния.
- 1.7 Допустим, что у нас есть анион, к которому прилегают 6 катионов в октаэдрическом расположении. Все катион-анионные связи равны по длине и все углы между связями равны 90° . Предположим, что у нас нет других ионов, кроме описанных выше и что заряды на катионах и анионах равны +1 и -1, соответственно. Посчитайте константу Маделунга для данного случая.
- 1.8 Сделайте то же самое, что и в предыдущем пункте, но уже принимая во внимание условие электронейтральности.

Задание 2. Кристаллы полимеров

Полимеры принимают молекулярную кристаллическую структуру. В такой структуре, полимеры упаковываются также, как и ионные соединения, только в виде свернутых в клубок витков вместо ионов.

- 2.1 Посчитайте энтальпию реакции полимеризации для поливинилхлорида, если энергия двойной углерод-углеродной связи равна 680 кДж/моль, а энергия простой углерод-углеродной связи равна 370 кДж/моль.
- 2.2 Образец полимера имеет среднюю степень полимеризации (n) равную 750. Определите среднюю длину клубка полимера по формуле $L = l\sqrt{2n}$, где L — это средняя длина клубка, l — длина связи углерод-углерод и n — средняя степень полимеризации. Длину углерод-углеродной связи примите равной 0.154 нм.
- 2.3 Рассчитайте среднюю длину полностью размотанного полимера (L_{ext}).
- 2.4 Посчитайте число атомов углерода и атомов водорода в кристаллической ячейке полиэтилена с параметрами 0.255 нм × 0.494 нм × 0.741 нм. Примите, что плотность данной кристаллической структуры равна 0.9979 г/см³.
- 2.5 Белки — это биологические полимеры, которые могут принимать глобулярную структуру, схожую с клубком, о котором мы говорили выше. Предположим, у нас есть белковое соединение типа АВ, где А — это глобулярный белок А, а В — это глобулярный белок В. Обнаружено, что данный белок принимает структуру хлорида натрия. Рассчитайте долю занятого пространства в кристаллической ячейке данного белкового соединения АВ, если радиус глобулярного белка А составляет 0.78 нм, а радиус глобулярного белка В — 1.32 нм.
- 2.6 Какими силами клубки полимеров держатся в кристаллической структуре?

Задание 3. Радон в окружающей среде

Радиоактивные изотопы ²²²Rn и ²²⁰Rn образуются постоянно из-за распада урана и тория в почве и скалах, а также, будучи газообразными, просачиваются из-под земли. Изотопы радона распадаются довольно быстро, в то время как продукты их распада, которые тоже радиоактивны, остаются в воздухе и с течением времени прикрепляются к частицам пыли. При этом радиоактивность, образовавшаяся в воздухе может достигнуть проблематичного уровня в плохо проветриваемых подвальных помещениях, расположенных на земле с высоким содержанием урана и тория.

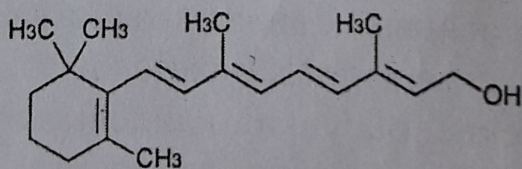
- 3.1 Опишите состав атома ²²²Rn и сравните его с составом атома ²²⁰Rn.
- 3.2 Хотя ²²²Rn и является продуктом распада ²³⁸U, ²²⁰Rn образуется из ²³²Th. Сколько альфа-частиц выделяются при образовании изотопов радона из урана и тория?
- 3.3 Может ли только альфа-распад объяснить образование изотопов радона из ²³⁸U и ²³²Th? Если нет, укажите какие другие типы распада должны произойти.
- 3.4 Напишите уравнения реакций альфа-распада двух изотопов радона и посчитайте произошедшие изменения в массе. Массы атомов ²²²Rn и ²²⁰Rn равны 222.01757 и 220.01140 а.е.м., соответственно. Массы образовавшихся при распаде изотопов полония равны 218.0089 и 216.00192 а.е.м., соответственно.
- 3.5 Определите изменение в энергии при альфа-распаде одного ядра ²²⁰Rn в МэВ и Дж.

- 3.6 Период полураспада ^{222}Rn равен 3.82 дням. Определите начальную активность ^{222}Rn с массой равной 2.00×10^{-8} г в беккерелях.
- 3.7 Какой будет активность ^{222}Rn из пункта 3.6 через 14 дней?
- 3.8 Период полураспада ^{220}Rn составляет 54 с. Больше или меньше будет опасность для здоровья от кратковременного контакта с данным количеством ^{220}Rn , чем с тем же количеством ^{222}Rn ? Какое должно быть соотношение этих двух изотопов радона, чтобы опасность была одинаковой?

Задание 4. Сопряженные молекулы в красках и биологических соединениях

Одним из интересных классов углеродсодержащих молекул являются сопряженные молекулы, у которых структура состоит из последовательности чередующихся простых и двойных связей. Делокализованные электроны в данных молекулах определяют ряд свойств, которые они показывают. Такие молекулы поглощают в видимой и ультрафиолетовой областях спектра. Многие краски и молекулы биологического значения имеют подобную структуру. Свойства этих молекул могут быть приблизительно описаны моделью частицы в ящике, в которой мы предполагаем отсутствие взаимодействия между электронами, постоянную потенциальную энергию по цепи и бесконечную потенциальную энергию вне цепи. Предположим, что длина потенциальной ямы равна Nd , где N – число атомов углерода в цепи и d – половина суммы простой и двойной углерод-углеродных связей. Длина простой углерод-углеродной связи равна 1.54 \AA , а длина двойной углерод-углеродной связи равна 1.32 \AA .

- 4.1 Напишите уравнение для уровней энергии электрона в данной потенциальной яме.
- 4.2 Напишите уравнение волновой функции электрона в данной потенциальной яме.
- 4.3 Напишите уравнение для частоты света необходимой при переходе с ВЗМО на НСМО.
- 4.4 Определите длину волны света при переходе с ВЗМО на НСМО для бутадиена.
- 4.5 Структура витамина А приведена ниже. Определите длину волны света для первого перехода в витамине А.



- 4.6 Структура бета-каротина приведена ниже. Определите длину волны света для первого перехода в бета-каротине.

