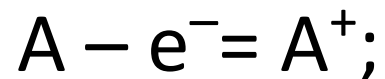


Свойства нейтральных атомов

- **Потенциал ионизации** — энергия, которую надо затратить для отрыва 1 моля электронов от одного моля атомов в газообразном состоянии с образованием моля газообразных положительных ионов, заряд которых увеличивается на единицу:



Различают первый, второй и т. д. потенциалы ионизации, соответствующие удалению первого, второго и т. д. электронов из соответствующих частиц.

Энергия ионизации E — минимальная энергия, необходимая для удаления электрона из частицы на бесконечное расстояние. Энергия ионизации связана с потенциалом ионизации U соотношением: $E = Ue$, где e — заряд электрона. Энергия ионизации, выраженная в эВ, численно совпадает с потенциалом ионизации, выраженным в В.

Сродство к электрону — это энергия, которая выделяется (или поглощается) при присоединении одним молем атомов в газообразном состоянии одного моля электронов с образованием одного моля отрицательно заряженных ионов:



Электроотрицательность определяют как величину, характеризующую способность атома к поляризации ковалентных связей.

Если в двухатомной молекуле А–В электроны, образующие связь, притягиваются к атому В сильнее, чем к атому А, то атом В считается более электроотрицательным, чем атом А

Для количественной оценки электроотрицательности атомов элементов удобнее пользоваться определением Малликена, по которому электроотрицательность (ЭО) равна полусумме потенциала ионизации (ПИ) и сродства к электрону (СЭ).

Закономерности изменения ЭИ, СЭ и ЭО

Химическая связь

Общие положения

Химическая связь – это совокупность сил, удерживающих вместе два или несколько атомов или ионов.

Химическая связь – это результат одновременного действия притяжения и отталкивания сближающихся атомов

Притяжение – а) электростатическое взаимодействие между противоположно заряженными ионами или частичными (эффективными) зарядами, б) электронное взаимодействие с образованием связывающих орбиталей, в) дисперсионные (дипольные) силы.

Отталкивание – а) электростатическое взаимодействие одноименно заряженных ионов или частичных зарядов, б) электронное взаимодействие замкнутых оболочек, в) электростатическое отталкивание сблизившихся ядер.

Силы, объединяющие атомы в молекулы

1. Электростатические взаимодействия:

взаимодействия зарядов

2. Ковалентные взаимодействия:

перераспределение электронной плотности

3. Дипольное взаимодействие:

ван-дер-ваальсовы силы

1	→	Ионная связь
2	→	Ковалентная связь
3	→	Ван-дер-ваальсова связь

Ковалентная связь

Методы описания ковалентной связи:

MBC

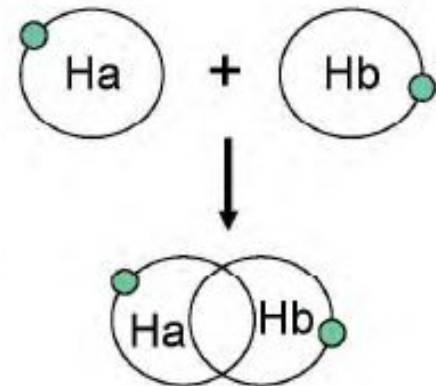
ММО

Метод валентной связи (Льюис, Полинг, Лондон, Гайтлер, Слэйтер)

Общий подход:

Волновая функция электронной пары есть наложение волновых функций отдельных фрагментов

$$\Psi_{\text{H}_2} = \underbrace{\varphi_{\text{Ha}}(1) \cdot \varphi_{\text{Hb}}(2)}_{\text{индивидуальные}} + \underbrace{\varphi_{\text{Ha}}(2) \cdot \varphi_{\text{Hb}}(1)}_{\text{взаимодействие}}$$



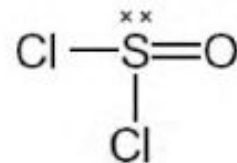
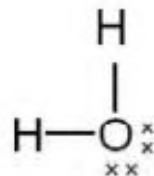
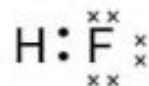
Концепция Льюиса

Согласно Льюису:

Ковалентная связь образуется, если два соседних атома имеют общую электронную пару

$A-B$	1 электронная пара	одинарная связь
$A=B$	2 электронные пары	двойная связь
$A\equiv B$	3 электронные пары	тройная связь

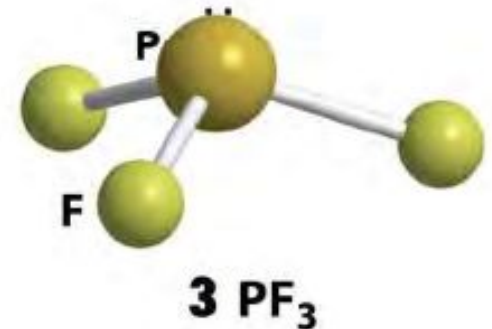
Графическое представление:
структуры Льюиса



Концепция Льюиса

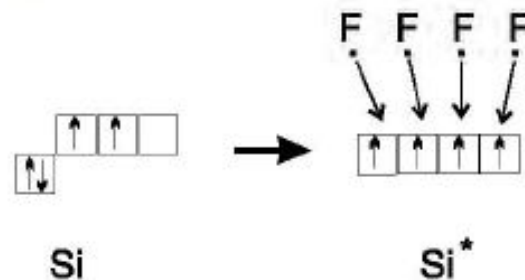
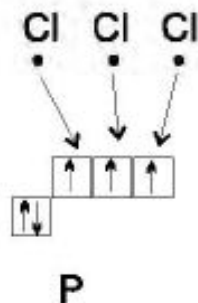
Правило октета:

Каждый атом объединяет электроны с соседними атомами, стремясь к достижению **8-электронной** валентной конфигурации



Насыщаемость связи:

Поделенные электронные пары образуются до тех пор, пока не реализуется **октет**

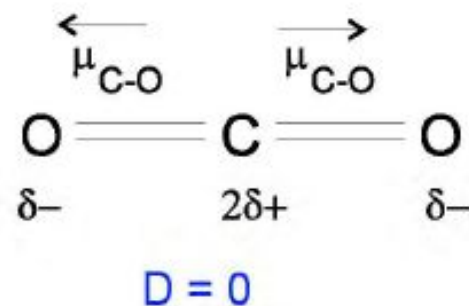
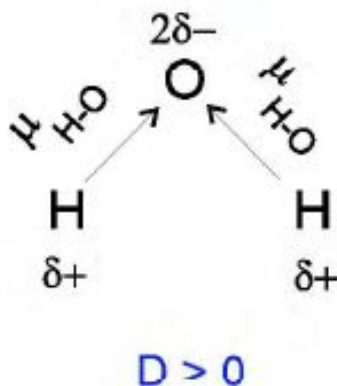
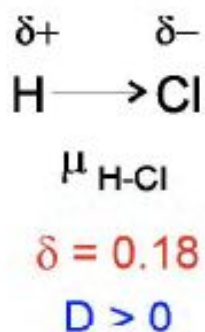


Поляризуемость связи

Когда химическая связь образуется между элементами с разной электроотрицательностью, электронная плотность между атомами смещена в сторону более **электроотрицательного** атома.

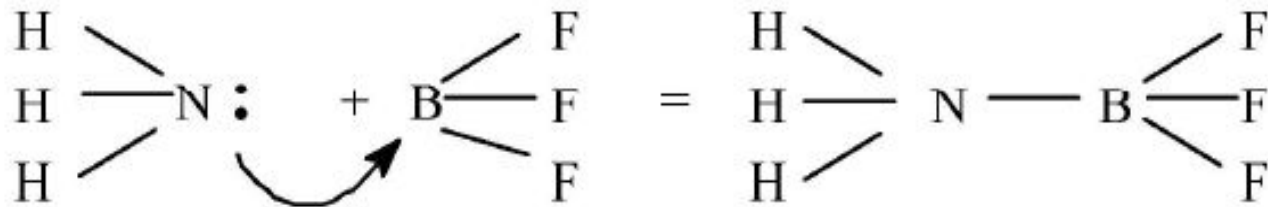
Такая связь называется **полярной**.

Перераспределение электронной плотности приводит к возникновению **частичных зарядов** на атомах

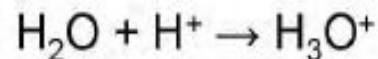
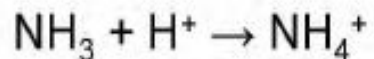


Донорно-акцепторное взаимодействие

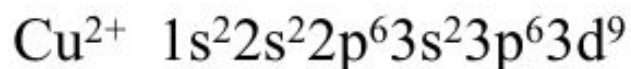
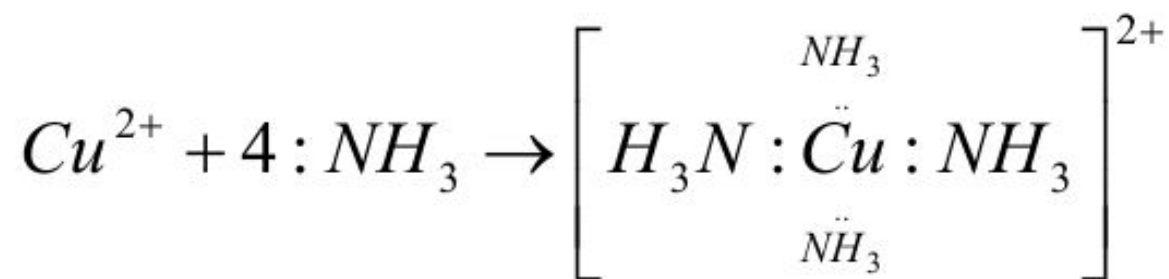
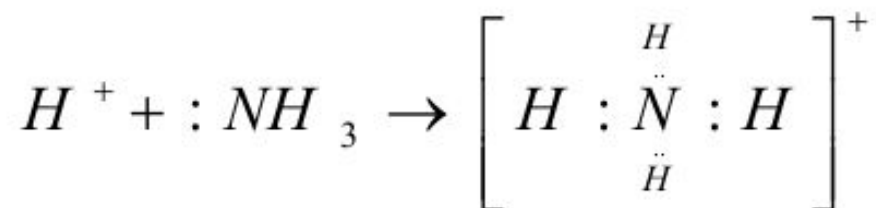
Донорно-акцепторным называется взаимодействие неподеленной электронной пары атома одной молекулы со свободной орбиталью атома другой молекулы.



донор предоставляет электронную пару,
акцептор – свободную орбиталь



Донорно-акцепторная связь



Недостатки МВС

1. Не рассматривается связь, образованная другим числом электронов



2. Нельзя объяснить магнитные свойства молекул



3. Нельзя предсказать и объяснить спектральные свойства молекул

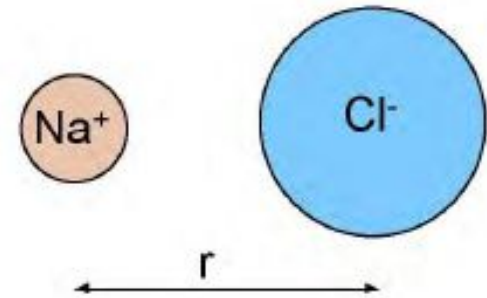
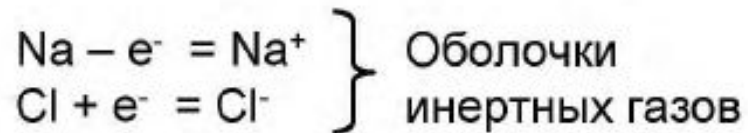


4. Нельзя правильно интерпретировать гипервалентные соединения



Ионная связь

Ионная связь это взаимодействие противоположных зарядов



Характеристики ионной связи:

- 1) Ненаправленность
- 2) Недеформируемость электронных оболочек
- 3) Значимость кристаллического строения:

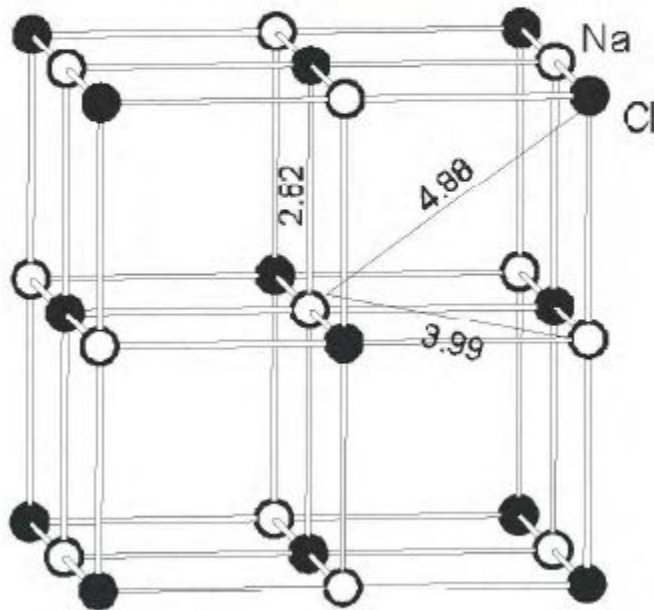
$$E_{\text{крист}} = A \cdot (|Z_+| \cdot |Z_-| \cdot e^2) / r$$

A – константа Маделунга

$$E = (|Z_+| \cdot |Z_-| \cdot e^2) / r$$

Константа Маделунга

Кристаллическая структура NaCl

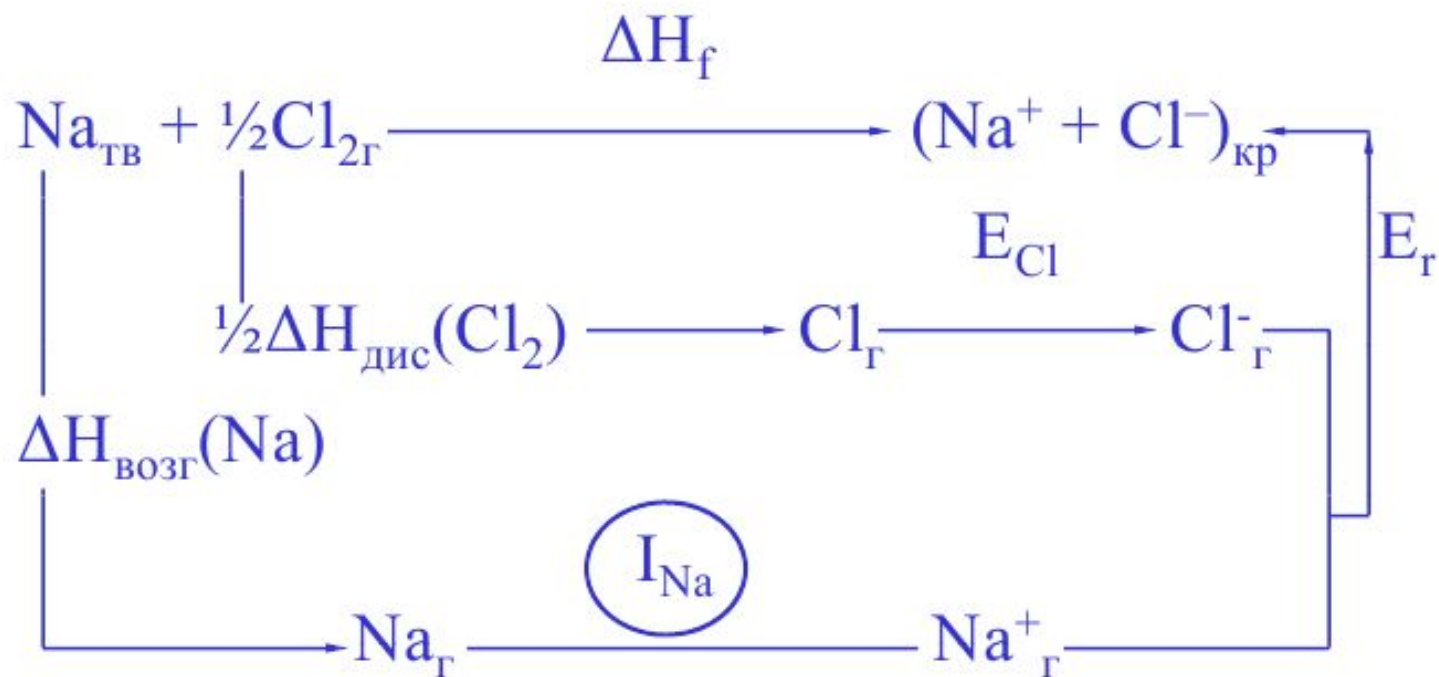
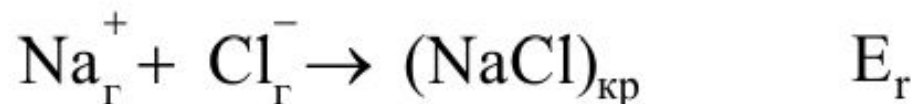


Константа Маделунга зависит только от взаимного расположения атомов в кристаллической структуре

Величины константы Маделунга

Состав	A	К.Ч.
CsCl	1.763	8:8
CaF ₂	2.519	8:4
NaCl	1.748	6:6
TiO ₂	2.408	6:3
ZnS(s)	1.638	4:4
ZnS(w)	1.641	4:4

Энергия кристаллической решетки



$$\Delta H_{\text{возг}}(\text{Na}) + I_1(\text{Na}) + \frac{1}{2} \cdot \Delta H_{\text{дисс}}(\text{Cl}_2) + \\ + E(\text{Cl}^-) + E_r = \Delta H_f^{\circ}$$

$$E_r = 769 \text{ кДж/моль}$$

Ненаправленность ионной связи, высокие

$t_{\text{пл}}$ и $t_{\text{кип}}$, диэлектрики, твердость

$t > t_{\text{пл}}$ — проводники

$t < t_{\text{пл}}$ — твердые электролиты

Ван-дер-ваальсовы силы

Ван-дер-ваальсовы силы существуют всегда между атомами и молекулами, но могут быть пренебрежимо малы при наличии ионных или ковалентных взаимодействий

Три типа ван-дер-ваальсовых сил:

- 1) **Диполь-дипольное притяжение**
взаимодействие постоянных диполей
- 2) **Индукционное притяжение**
взаимодействие постоянного и наведенного диполей
- 3) **Дисперсионное притяжение**
взаимодействие мгновенных диполей

Водородная связь

Для водородной связи необходимо наличие двух полярных ковалентных связей, в образовании одной из которых участвует атом водорода, а другой - электроотрицательный атом (кислород, азот, галоген). Водородная связь считается ключевым взаимодействием в супрамолекулярной химии. Она определяет структуру белков, двойной спирали ДНК, воды и льда, супрамолекулярных ансамблей, полимеров, оказывает влияние на свойства многих растворов.

Энергия меняется в широких пределах - от 5 до 100 кДж/моль, однако обычно водородная связь намного слабее ковалентных связей. В зависимости от энергии, водородная связь имеет различный характер - от чисто электростатического (слабые связи) до преимущественно ковалентного (сильные связи).

