



ПОВЕДЕНИЕ МАТЕРИАЛОВ В СИЛЬНЫХ ПОЛЯХ

Квантовые числа для электрона в атоме:

главное квантовое число	n
орбитальное квантовое число	l
магнитное квантовое число	m_l
спиновое квантовое число	m_s

Энергетический уровень (n)	Число подуровней, равное n	Тип орбитали	Число орбиталей		Максимальное число электронов	
			в подуровне	в уровне, равное n^2	на подуровне	на уровне, равное $2n^2$
$K (n = 1)$	1	1s	1	1	2	2
$L (n = 2)$	2	2s	1	4	2	8
		2p	3		6	
$M (n = 3)$	3	3s	1	9	2	18
		3p	3		6	
		3d	5		10	
$N (n = 4)$	4	4s	1	16	2	32
		4p	3		6	
		4d	5		10	
		4f	7		14	

Совокупность состояний электрона в атоме с одним и тем же значением n называют **энергетическим уровнем**.

Наибольшее число электронов на энергетическом уровне

$$N = 2n^2,$$

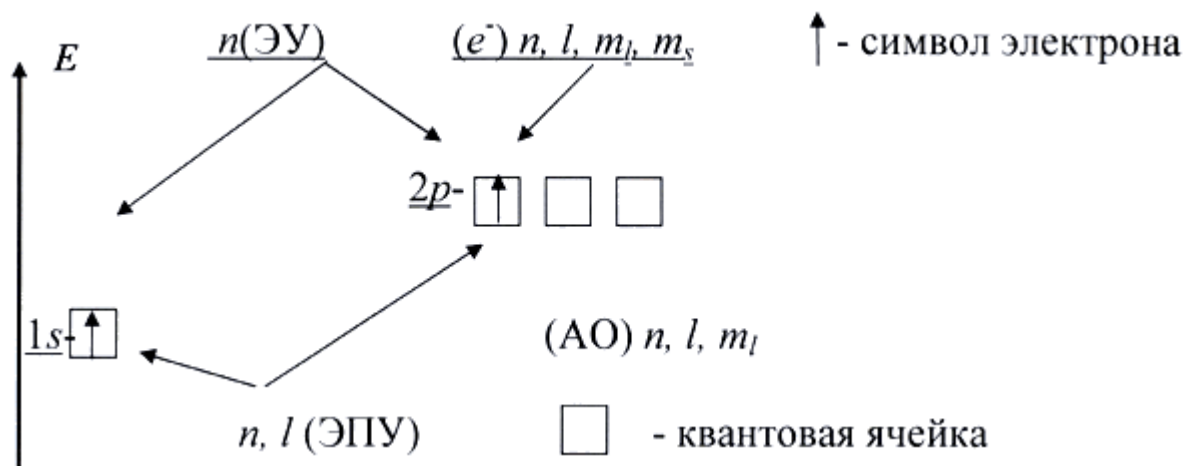
N — максимальное число электронов; n — номер уровня или главное квантовое число.

Энергетический подуровень - совокупность энергетических состояний электрона в атоме, характеризующихся одними и теми же значениями квантовых чисел n и l .

Число подуровней = значению главного квантового числа: первый энергетический уровень имеет один подуровень; второй – два; третий – три; четвертый – четыре подуровня. Подуровни, в свою очередь, образованы орбиталями.

Каждому значению n соответствует число орбиталей, равное n^2 .

ГЛАВНЫЕ КВАНТОВЫЕ ЧИСЛА ДЛЯ ОПИСАНИЯ ЭЛЕКТРОННЫХ ОБОЛОЧЕК АТОМОВ



ЭЛЕКТРООТРИЦАТЕЛЬНОСТЬ

Электроотрицательность – способность атома химического элемента смещать в свою сторону электронное облако при образовании химической связи (в сторону элемента с более высокой электроотрицательностью):

$$\chi = 1/2 (E_i + A_e)$$

A_e – сродство атома к электрону

E_i – энергия (потенциал) ионизации атома

ПРАВИЛО КЛЕЧКОВСКОГО

Правило Клечковского (также **Правило $n + l$** ; также используется название **правило Маделунга**) - эмпирическое правило, описывающее энергетическое распределение орбиталей в многоэлектронных атомах.

Заполнение электронами орбиталей в атоме происходит в порядке возрастания суммы **главного** и **орбитального квантовых чисел ($n+l$)**. При одинаковой сумме раньше заполняется орбиталь с меньшим значением .

По мере увеличения суммарного числа электронов в атомах (при возрастании зарядов их ядер, или порядковых номеров химических элементов) атомные орбитали заселяются таким образом, что появление электронов на орбитали с более высокой энергией зависит только от главного квантового числа n и не зависит от всех остальных квантовых чисел, в том числе и от l .



В многоэлектронных атомах в результате эффекта межэлектронных взаимодействий происходит энергетическое расщепление (расхождение) орбиталей различного типа, но с одним и тем же значением главного квантового числа ($3s < 3p < 3d$ и т. д.).

Если бы это расщепление было небольшим и меньшим расщепления по энергии атомных орбиталей под воздействием изменения главного квантового числа n , то энергетическая последовательность атомных орбиталей выглядела бы так:

$$1s \ll 2s < 2p \ll 3s < 3p < 3d \ll 4s < 4p < 4d < 4f \ll 5d \dots$$

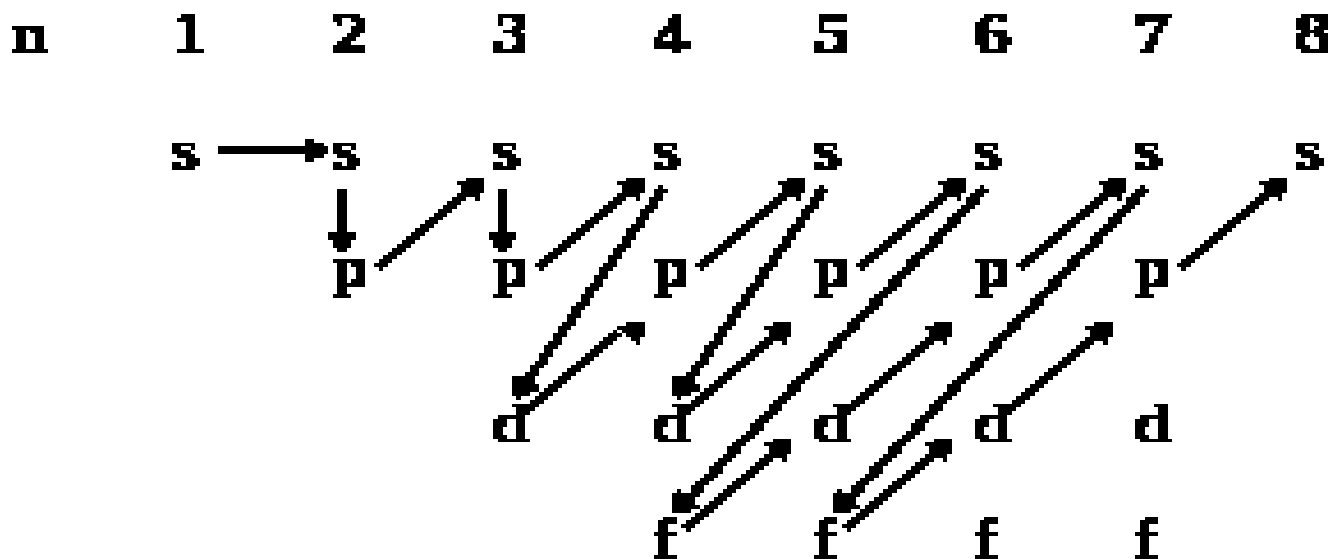
Межэлектронное взаимодействие приводит к резко усложнённой (по сравнению с вышеописанной) энергетической последовательности заселяющихся электронами атомных орбиталей. Строгая квантовомеханическая теория электронного строения атомов и экспериментальная спектроскопия обнаруживают энергетическую последовательность атомных орбиталей в следующем виде:

$$1s < 2s < 2p < 3s < 3p < 4s < 3d < 4p < 5s < 4d < 5p < 6s < 4f \cong 5d < 6p < 7s < 5f \cong 6d < 7p < 8s$$

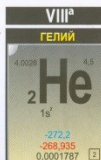
Энергетическая последовательность орбиталей в изолированных атомах

$(n+l)$	n	l	Атомные орбитали	
1	1	0	1s	Первый период
2	2	0	2s	
3	2	1	2p	Второй период
	3	0	3s	
4	3	1	3p	Третий период
	4	0	4s	
5	3	2	3d	Четвёртый период
	4	1	4p	
	5	0	5s	
6	4	2	4d	Пятый период
	5	1	5p	
	6	0	6s	
7	4	3	4f	Шестой период
	5	2	5d	
	6	1	6p	
	7	0	7s	
8	5	3	5f	Седьмой период
	6	2	6d	
	7	1	7p	
	8	0	8s	

Приведённую в таблице очередность заполнения электронами атомных орбиталей
удобно представить в виде схемы:



Периодическая система химических элементов Д.И. Менделеева



ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИЙ РЯД АКТИВНОСТИ МЕТАЛЛОВ

Eu, Sm, Li, Cs, Rb, K, Ra, Ba, Sr, Ca, Na, Ac, La, Ce, Pr, Nd, Pm, Gd, Tb, Mg, Y, Dy, Am, Ho, Er, Tm, Lu, Sc, Pu, Th, Np, U, Hf, Be, Al, Ti, Zr, Yb, Mn, V, Nb, Pa, Cr, Zn, Ga, Fe, Cd, In, Tl, Co, Ni, Te, Mo, Sn, Pb, H, W, Sb, Bi, Ge, Re, Cu, Tc, Te, Rh, Po, Hg, Ag, Pd, Os, Ir, Pt, Au

РЯД ЭЛЕКТРООТРИЦАТЕЛЬНОСТИ НЕМЕТАЛЛОВ

Si, As, H, P, Se, I, C, S, Br, Cl, N, O, F

III^a БОР 5 B [He]2s ² 2p ¹ 10,81 2,40 2,340	IV^a УГЛЕРОД 6 C [He]2s ² 2p ² 12,01 2,35 2,342	V^a АЗОТ 7 N [He]2s ² 2p ³ 14,01 5,2 2,344	VI^a КИСЛОРОД 8 O [He]2s ² 2p ⁴ 15,99 3,44 2,342	VII^a ФТОР 9 F [He]2s ² 2p ⁵ 18,99 3,98 2,344	VIII^a НЕОН 10 Ne [He]2s ² 2p ⁶ 20,179 4,4 2,344
III^b АЛЮМИНИЙ 13 Al [Ne]3s ² 3p ¹ 26,982 1,81 2,686	IV^b КРЕМНИЙ 14 Si [Ne]3s ² 3p ² 28,086 1,90 2,342	V^b ФОСФОР 15 P [Ne]3s ² 3p ³ 30,974 2,41 2,344	VI^b СЕРА 16 S [Ne]3s ² 3p ⁴ 32,06 2,58 2,342	VII^b ХЛОР 17 Cl [Ne]3s ² 3p ⁵ 35,453 3,16 2,344	VIII^b АРГОН 18 Ar [Ne]3s ² 3p ⁶ 39,948 4,3 2,344
IV^c КАЛИЙ 19 K [Ar]4s ¹ 39,098 0,76 2,344	V^c КАЛЬЦИЙ 20 Ca [Ar]4s ² 40,078 0,93 2,344	III^d СКАНДИЙ 21 Sc [Ar]3d ¹ 4s ² 44,956 1,36 2,344	IV^d ТИТАН 22 Ti [Ar]3d ² 4s ² 47,867 1,54 2,344	V^d ВАНАДИЙ 23 V [Ar]3d ³ 4s ² 50,941 1,63 2,344	VI^d ХРОМ 24 Cr [Ar]3d ⁵ 4s ¹ 51,996 1,96 2,344
VII^d МАРГАНЕЦ 25 Mn [Ar]3d ⁵ 4s ² 54,938 1,55 2,344	VIII^d ЖЕЛЕЗО 26 Fe [Ar]3d ⁶ 4s ² 55,847 1,83 2,344	IX^d КОБАЛЬТ 27 Co [Ar]3d ⁷ 4s ² 58,93 1,88 2,344	X^d НИКЕЛЬ 28 Ni [Ar]3d ⁸ 4s ² 58,69 1,91 2,344	II^e МЕДЬ 29 Cu [Ar]3d ¹⁰ 4s ¹ 63,546 1,90 2,344	III^e ЦИНК 30 Zn [Ar]3d ¹⁰ 4s ² 65,39 1,65 2,344
IV^e ГАЛЛИЙ 31 Ga [Ar]3d ¹⁰ 4s ² 4p ¹ 69,72 1,81 2,344	V^e ГЕРМАНИЙ 32 Ge [Ar]3d ¹⁰ 4s ² 4p ² 72,59 1,96 2,344	VI^e АРСЕН 33 As [Ar]3d ¹⁰ 4s ² 4p ³ 74,922 2,4 2,344	VII^e СЕЛЕН 34 Se [Ar]3d ¹⁰ 4s ² 4p ⁴ 78,96 2,55 2,344	VIII^e БРОМ 35 Br [Ar]3d ¹⁰ 4s ² 4p ⁵ 79,904 2,96 2,344	IX^e КРИПТОН 36 Kr [Ar]3d ¹⁰ 4s ² 4p ⁶ 83,80 3,0 2,344
V^f РУБИДИЙ 37 Rb [Kr]5s ¹ 85,468 0,72 2,344	VI^f СТРОНЦИЙ 38 Sr [Kr]5s ² 87,62 0,79 2,344	VII^f ИТТРИЙ 39 Y [Kr]4d ¹ 5s ² 88,906 1,22 2,344	VIII^f ЦИРКОНИЙ 40 Zr [Kr]4d ² 5s ² 91,224 1,63 2,344	IX^f НИОБИЙ 41 Nb [Kr]4d ⁴ 5s ¹ 92,906 1,90 2,344	X^f МОЛИБДЕН 42 Mo [Kr]4d ⁵ 5s ¹ 95,94 2,16 2,344
XI^f ТЕХНЕЦИЙ 43 Tc [Kr]4d ⁵ 5s ² 98 1,9 2,344	II^g РУТЕНИЙ 44 Ru [Kr]4d ⁸ 5s ¹ 101,07 2,2 2,344	III^g РОДИЙ 45 Rh [Kr]4d ⁸ 5s ¹ 102,905 2,21 2,344	IV^g ПАЛЛАДИЙ 46 Pd [Kr]4d ¹⁰ 5s ⁰ 106,42 2,28 2,344	V^g СЕРЕБРО 47 Ag [Kr]4d ¹⁰ 5s ¹ 107,87 1,93 2,344	VI^g КАДМИЙ 48 Cd [Kr]4d ¹⁰ 5s ² 112,41 1,79 2,344
VII^g ИНДИЙ 49 In [Kr]4d ¹⁰ 5s ² 5p ¹ 114,82 1,78 2,344	VIII^g ОПОВО 50 Sn [Kr]4d ¹⁰ 5s ² 5p ² 118,71 1,96 2,344	IX^g СУРЬМА 51 Sb [Kr]4d ¹⁰ 5s ² 5p ³ 121,75 2,21 2,344	X^g ТЕЛЛУР 52 Te [Kr]4d ¹⁰ 5s ² 5p ⁴ 127,80 2,4 2,344	XI^g ЙОД 53 I [Kr]4d ¹⁰ 5s ² 5p ⁵ 126,90 2,66 2,344	II^h КСЕНОН 54 Xe [Kr]4d ¹⁰ 5s ² 5p ⁶ 131,29 2,9 2,344
II^h ЦЕЗИЙ 55 Cs [Xe]6s ¹ 132,905 0,79 2,344	III^h БАРИЙ 56 Ba [Xe]6s ² 137,327 0,79 2,344	IV^h ЛАНТАНОИДЫ 57 La [Xe]5d ¹ 6s ² 138,905 1,39 2,344	V^h ГАФНИЙ 72 Hf [Xe]4f ¹⁴ 5d ² 6s ² 178,49 1,39 2,344	VI^h ТАНТАЛ 73 Ta [Xe]4f ¹⁴ 5d ³ 6s ² 180,947 1,59 2,344	VII^h ВОЛЬФРАМ 74 W [Xe]4f ¹⁴ 5d ⁴ 6s ² 183,85 2,3 2,344
VIII^h РЕНИЙ 75 Re [Xe]4f ¹⁴ 5d ⁵ 6s ² 186,21 1,99 2,344	IX^h ОСМИЙ 76 Os [Xe]4f ¹⁴ 5d ⁶ 6s ² 190,2 2,29 2,344	X^h ИРИДИЙ 77 Ir [Xe]4f ¹⁴ 5d ⁷ 6s ² 192,22 2,29 2,344	XI^h ПЛАТИНА 78 Pt [Xe]4f ¹⁴ 5d ⁹ 6s ¹ 195,08 2,28 2,344	IIⁱ ЗОЛОТО 79 Au [Xe]4f ¹⁴ 5d ¹⁰ 6s ¹ 196,97 2,84 2,344	IIIⁱ ТАЛЛИЙ 81 Tl [Xe]4f ¹⁴ 5d ¹⁰ 6s ² 6p ¹ 204,383 1,63 2,344
IVⁱ СВИНЕЦ 82 Pb [Xe]4f ¹⁴ 5d ¹⁰ 6s ² 6p ² 207,2 1,89 2,344	Vⁱ ВИСМУТ 83 Bi [Xe]4f ¹⁴ 5d ¹⁰ 6s ² 6p ³ 208,980 2,02 2,344	VIⁱ ПОЛОНИЙ 84 Po [Xe]4f ¹⁴ 5d ¹⁰ 6s ² 6p ⁴ 209 2,39 2,344	VIIⁱ АСТАТ 85 At [Xe]4f ¹⁴ 5d ¹⁰ 6s ² 6p ⁵ 209,9871 2,50 2,344	VIIIⁱ РАДОН 86 Rn [Xe]4f ¹⁴ 5d ¹⁰ 6s ² 6p ⁶ 222,0176 2,50 2,344	
II^j ФРАНЦИЙ 87 Fr [Rn]7s ¹ 223 0,7 2,344	III^j РАДИЙ 88 Ra [Rn]7s ² 226 0,9 2,344	IV^j АКТИНОИДЫ 89 Ac [Rn]5f ¹⁴ 6d ¹ 7s ² 227,03 1,99 2,344	V^j РЕЗЕРФОРДИЙ 104 Rf [Rn]5f ¹⁴ 6d ² 7s ² 261 1,99 2,344	VI^j ДУБИНИЙ 105 Db [Rn]5f ¹⁴ 6d ³ 7s ² 268 1,99 2,344	VII^j СИБОРГИЙ 106 Sg [Rn]5f ¹⁴ 6d ⁴ 7s ² 271 1,99 2,344
VIII^j БОРИЙ 107 Bh [Rn]5f ¹⁴ 6d ⁵ 7s ² 267 1,99 2,344	IX^j БОРИЙ 107 Bh [Rn]5f ¹⁴ 6d ⁵ 7s ² 267 1,99 2,344	X^j ХАССИЙ 108 Hs [Rn]5f ¹⁴ 6d ⁶ 7s ² 269 1,99 2,344	XI^j МЕЙТТЕРИЙ 109 Mt [Rn]5f ¹⁴ 6d ⁷ 7s ² 276 1,99 2,344	II^k ДАРШТАДИЙ 110 Ds [Rn]5f ¹⁴ 6d ⁸ 7s ² 281 1,99 2,344	III^k РЕНТГЕНИЙ 111 Rg [Rn]5f ¹⁴ 6d ⁹ 7s ² 282 1,99 2,344
IV^k УНУНРИЙ 113 Uut [Rn]5f ¹⁴ 6d ¹⁰ 7s ² 7p ¹ 284 1,99 2,344	V^k УНУНКВАДИЙ 114 Uuq [Rn]5f ¹⁴ 6d ¹⁰ 7s ² 7p ² 289 1,99 2,344	VI^k УНУНПЕНТИЙ 115 Uup [Rn]5f ¹⁴ 6d ¹⁰ 7s ² 7p ³ 289 1,99 2,344	VII^k УНУНГЕСИЙ 116 Uuh [Rn]5f ¹⁴ 6d ¹⁰ 7s ² 7p ⁴ 293 1,99 2,344	VIII^k УНУНСЕПТИЙ 117 Uus [Rn]5f ¹⁴ 6d ¹⁰ 7s ² 7p ⁵ 294 1,99 2,344	IX^k УНУНОКТИЙ 118 Uuo [Rn]5f ¹⁴ 6d ¹⁰ 7s ² 7p ⁶ 294 1,99 2,344

ВОЛЬФРАМ (W) [Xe]4f¹⁴5d⁴6s²

Радиус атома (в пм): 138,36

Атомная масса: 183,85

Атомный номер: 74

Хар-ные степени окисления: +2, +3, +4, +5, +6

Температура плавления, °C: 3410

Температура кипения, °C: 5660

Плотность, г/см³: 19,3

Символ элемента: W

Электронная конфигурация: [Xe]4f¹⁴5d⁴6s²

Распределение электронов: 2, 8, 18, 32, 10, 2

Латинское название элемента: Wolframium

Название элемента: Вольфрам

Электроотрицательность (по Полю): 2,3

Свойства:

- нметаллы
- щелочные металлы
- щелочноземельные металлы
- переходные металлы
- другие металлы
- полуметаллы
- галогены
- инертные газы
- лантаноиды
- актиноиды

ПЕРИОДИЧЕСКАЯ СИСТЕМА ХИМИЧЕСКИХ ЭЛЕМЕНТОВ Д.И.МЕНДЕЛЕЕВА

www.calc.ru



Д.И. Менделеев
1834–1907

Периоды	Ряды	Г Р У П П Ы Э Л Е М Е Н Т О В																Энергетические уровни
		I		II		III		IV		V		VI		VII		VIII		
		а	б	а	б	а	б	а	б	а	б	а	б	а	б	а		
1	1	H водород 1,008															He гелий 4,003	2
2	2	Li литий 6,941	Be бериллий 9,0122	B бор 10,811	C углерод 12,011	N азот 14,007	O кислород 15,999	F фтор 18,998									Ne неон 20,179	10
3	3	Na натрий 22,99	Mg магний 24,312	Al алюминий 26,982	Si кремний 28,086	P фосфор 30,974	S сера 32,064	Cl хлор 35,453									Ar аргон 39,948	18
4	4	K калий 39,102	Ca кальций 40,08	Sc скандий 44,956	Ti титан 47,956	V ванадий 50,941	Cr хром 51,996	Mn марганец 54,938	Fe железо 55,849	Co кобальт 58,933	Ni никель 58,7							
	5	Cu медь 63,546	Zn цинк 65,37	Ga галлий 69,72	Ge германий 72,59	As мышьяк 74,922	Se селен 78,96	Br бром 79,904										Kr криптон 83,8
5	6	Rb рубидий 85,468	Sr стронций 87,62	Y иттрий 88,906	Zr цирконий 91,22	Nb ниобий 92,906	Mo молибден 95,94	Tc технеций [99]	Ru рутений 101,07	Rh родий 102,906	Pd палладий 106,4							
	7	Ag серебро 107,868	Cd кадмий 112,41	In индий 114,82	Sn олово 118,69	Sb сурьма 121,75	Te теллур 127,6	I иод 126,905										Xe ксенон 131,3
6	8	Cs цезий 132,905	Ba барий 137,34	La-Pr лантаноиды	Hf гафний 178,49	Ta тантал 180,948	W вольфрам 183,85	Re рений 186,207	Os осмий 190,2	Ir иридий 192,22	Pt платина 195,09							
	9	Au золото 196,967	Hg ртуть 200,59	Tl таллий 204,37	Pb свинец 207,19	Bi висмут 208,98	Po полоний [210]	At астат [210]										Rn радон [222]
7	10	Fr франций [223]	Ra радий [226]	Ac-Lr актиноиды	Rf резерфордий [261]	Db дубний [262]	Sg сиборгий [263]	Bh борий [262]	Hn ханний [265]	Mt мейтнерий [265]								
Высшие оксиды		R_2O	RO	R_2O_3	RO_2	R_2O_5	RO_3	R_2O_7									RO_4	
Летучие водородные соединения					RH_4	RH_3	H_2R	HR										

СИМВОЛ ЭЛЕМЕНТА ПОРЯДКОВЫЙ НОМЕР



НАЗВАНИЕ ЭЛЕМЕНТА
ОТНОСИТЕЛЬНАЯ АТОМНАЯ МАССА

РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ЭЛЕКТРОНОВ ПО СЛОЯМ

- s-элементы
- p-элементы
- d-элементы
- f-элементы

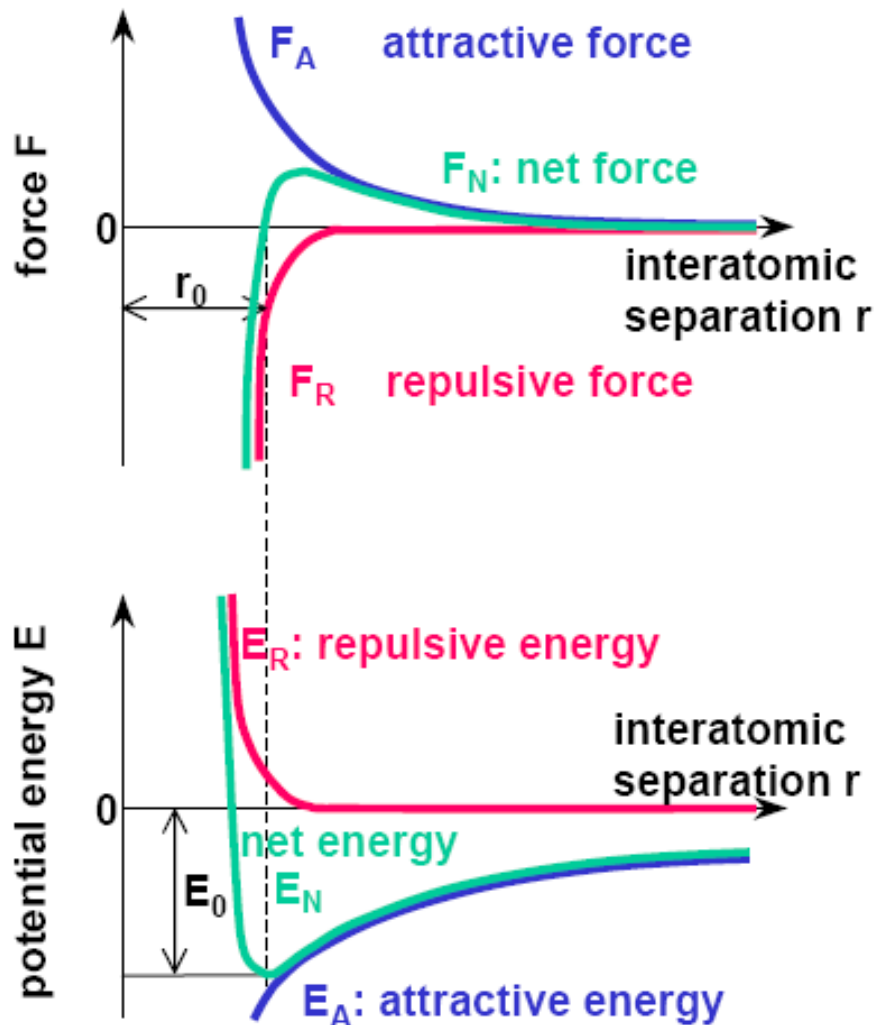
Л А Н Т А Н О И Д Ы

57 La лантан 138,906	58 Ce церий 140,12	59 Pr празеодим 140,908	60 Nd неодим 144,24	61 Pm прометий [145]	62 Sm самарий 150,4	63 Eu европий 151,96	64 Gd гадолиний 157,25	65 Tb тербий 158,926	66 Dy диспрозий 162,5	67 Ho гольмий 164,93	68 Er эрбий 167,26	69 Tm тулий 168,934	70 Yb иттербий 173,04	71 Lu лютеций 174,97
-----------------------------------	---------------------------------	--------------------------------------	----------------------------------	-----------------------------------	----------------------------------	-----------------------------------	-------------------------------------	-----------------------------------	------------------------------------	-----------------------------------	---------------------------------	----------------------------------	------------------------------------	-----------------------------------

А К Т И Н О И Д Ы

89 Ac актиний [227]	90 Th торий 232,038	91 Pa протактиний [231]	92 U уран 238,29	93 Np нептуний [237]	94 Pu плутоний [244]	95 Am амерций [243]	96 Cm кюрий [247]	97 Bk берклий [247]	98 Cf калифорний [251]	99 Es эйнштейний [254]	100 Fm фермий [257]	101 Md менделевий [258]	102 No нобелий [259]	103 Lr лоуренсий [260]
----------------------------------	----------------------------------	--------------------------------------	-------------------------------	-----------------------------------	-----------------------------------	----------------------------------	--------------------------------	----------------------------------	-------------------------------------	-------------------------------------	----------------------------------	--------------------------------------	-----------------------------------	-------------------------------------

МЕЖАТОМНЫЕ СВЯЗИ



$$E_{\text{прит}} = q^+ q^- / (4\pi r \epsilon_0)$$

$$F = -\left(\frac{dE}{dr}\right)_{r=r_0} = 0$$

$$E_{\text{отт}} = B / r^n$$

$$E = E_{\text{прит}} + E_{\text{отт}}$$

Равновесная энергия взаимодействия между ионами:

$$E_0 = -\frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 r_0} \left(1 - \frac{1}{n}\right)$$

Энергия решетки, построенной из N молекул, равна

$$E_{\text{реш}} = -NA \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 r_0} \left(1 - \frac{1}{n} \right),$$

где A – **постоянная Моделунга**, учитывающая энергию взаимодействия молекулы с ее соседями в кристалле.

Таблица 1 – экспериментальные значения энергии связи ряда ионных кристаллов и значения, вычисленные по формуле. Расхождения не превышают 1–2 %, что свидетельствует о хорошем согласии теории с опытом.

Кристалл	$U_0, 10^{-3}$ Дж/моль	
	экспериментальное	теоретическое
Хлористый натрий (NaCl)	-752	-754
Иодистый калий (KI)	-650	-630
Бромистый рубидий (RbBr)	-635	-645
Йодистый цезий (CsI)	-595	-585

ТИПЫ МЕЖАТОМНЫХ СВЯЗЕЙ

Химическая связь – взаимодействие двух атомов, осуществляемое путем обмена электронами.

- ИОННАЯ
- КОВАЛЕНТНАЯ
- МЕТАЛЛИЧЕСКАЯ
- ВОДОРОДНАЯ

Валентность – число химических связей, которыми данный атом соединен с другими атомами в молекуле.

Тип связи в значительной степени определяется разностью электроотрицательностей ($\Delta\chi$) элементов, участвующих в ее образовании:

$$\Delta\chi = \chi_A - \chi_B,$$

где χ_A и χ_B – электроотрицательности атомов А и В.

Основные типы химических связей

Ионная связь

$$\Delta\chi > 2$$

Ковалентные связи

$$\Delta\chi < 2$$

Полярная
ковалентная
связь

$$2 > \Delta\chi > 0.5$$

Неполярная и
слабополярная
ковалентные связи *

$$0.5 > \Delta\chi = 0$$

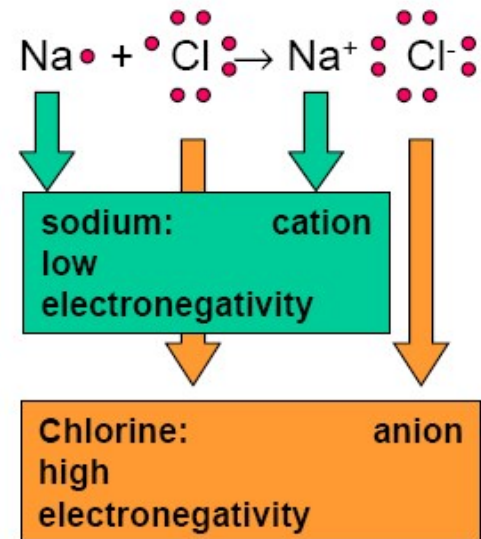
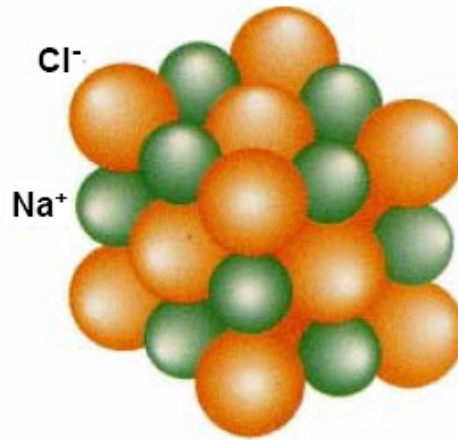
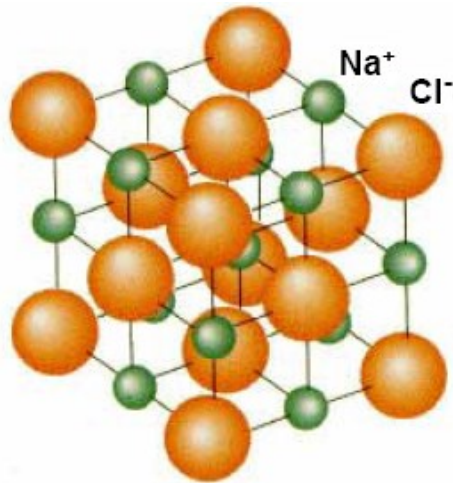
← Увеличение различий в электроотрицательности ($\Delta\chi$)
связанных атомов

ИОННАЯ СВЯЗЬ

Возникает при большой разнице в электроотрицательностях связываемых атомов ($\Delta\chi > 2$), когда менее электроотрицательный атом почти полностью отдает свои валентные электроны и превращается в катион, а другой, более электроотрицательный атом, эти электроны присоединяет и становится анионом.

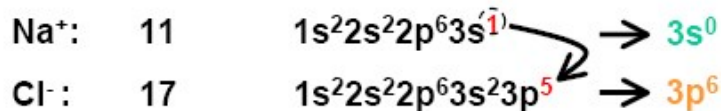
Типичные представители - галогениды щелочных металлов (NaCl, CsCl)

Хлорид натрия NaCl – $\Delta\chi = 3,0(\text{Cl}) - 0,9(\text{Na}) = 2,1$



<i>ion</i>	<i>atomic number</i>
Na ⁺ :	11
Cl ⁻ :	17

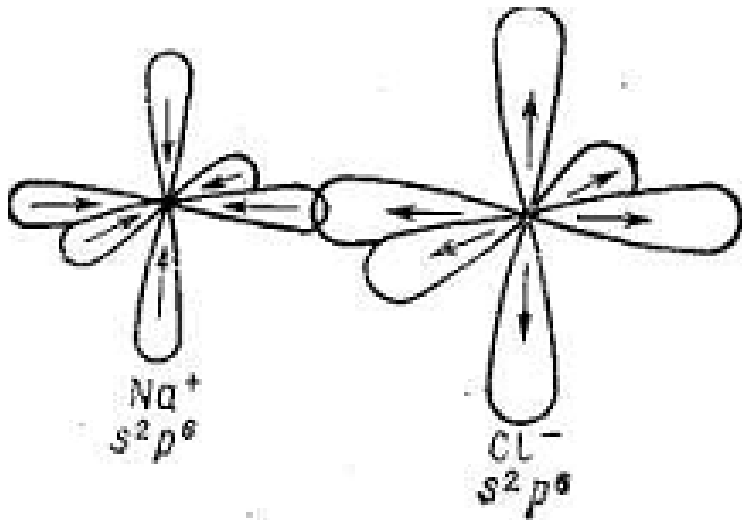
electron configuration



КООРДИНАЦИОННОЕ ЧИСЛО

Число ионов противоположного знака, которое составляет ближайшее окружение данного иона в кристалле – **координационное число (К)**

Координационное число	12	8	6	4	2
Возможные величины отношений r_A/r_B	1	$1 > r_A/r_B > 0,73$	$0,73 > r_A/r_B > 0,41$	$0,41 > r_A/r_B > 0,22$	$0,22 > r_A/r_B$



Ионный механизм образования межатомных связей в структурах типа NaCl. Стрелками показаны направления сдвига электронной плотности

ИОННАЯ СВЯЗЬ

- Не имеет **пространственной направленности**, так как каждый ион связан с некоторым числом противоионов, сила действия которых зависит от расстояния (закон Кулона). Ионно-связанные соединения не имеют молекулярного строения и представляют собой твердые вещества, образующие ионные кристаллические решетки, с высокими температурами плавления и кипения, они высокополярны, часто солеобразны, в водных растворах электропроводны. Соединений с чисто ионными связями практически не существует.
- Важная особенность ионной связи – ее **поляризуемость**, вызванная поляризуемостью ионов

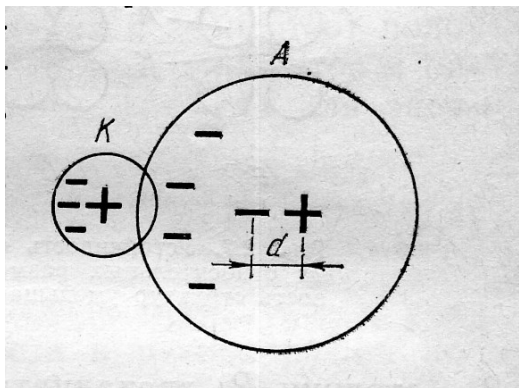


Схема поляризации ионов:
К – катион (положительный заряд иона); А – анион (отрицательный заряд иона)

Дипольный момент

$$M = \alpha^* E = Z_e d$$

α^* – поляризуемость,

E – напряженность электрического поля, возникающая в ионе при смещении зарядов.

$$1 [\text{Д}] = 10^{-30} [\text{Кл} \cdot \text{м}]$$

ИОННАЯ СВЯЗЬ

Для возникновения ионной связи необходимо, чтобы сумма значений энергии ионизации E_i (для образования катиона) и сродства к электрону A_e (для образования аниона) должна быть энергетически выгодной. Это ограничивает образование ионной связи атомами активных металлов (элементы IA- и IIA- групп, некоторые элементы IIIA- группы и некоторые переходные элементы) и активных неметаллов (галогены, халькогены, азот).

Энергия ионной связи

Энергия, которая выделяется при образовании ионного соединения из бесконечно удаленных друг от друга газообразных противоположно заряженных ионов.

При возникновении ионной связи между двумя свободными ионами энергия их притяжения определяется **законом Кулона**:

$$E_{(\text{прит.})} = q^+ q^- / (4\pi r \epsilon),$$

где q^+ и q^- - заряды взаимодействующих ионов, r - расстояние между ними, ϵ - диэлектрическая проницаемость среды.

$$E_{(\text{отт.})} = B / r^n,$$

где B - некоторая константа, n может принимать значения от 5 до 12.

КОВАЛЕНТНАЯ (ГОМЕОПОЛЯРНАЯ) СВЯЗЬ

Ковалентная связь возникает у атомов с близкой электроотрицательностью.

При образовании связи – **обобществление электронов** связываемых атомов.

Связывающие электроны находятся преимущественно в пространстве между связываемыми атомами. За счет притяжения ядер атомов к этим электронам образуется химическая связь.

В зависимости от степени различий в электроотрицательностях связанных атомов ковалентные связи подразделяются на *полярные* и *неполярные*.

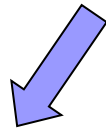
Ковалентная связь обладает **направленностью** (от атома к атому).

Основной характерной особенностью ковалентных кристаллов является то, что количество ковалентных связей, образуемых каждым атомом со своими соседями, равно количеству неспаренных внешних электронов атома в свободном состоянии или в возбужденном валентном состоянии (**насыщенность связи**).

Типичными представителями кристаллов с чисто ковалентной связью: **алмаз, кремний, германий, серое олово**, которые построены по типу алмаза. Ковалентные кристаллы как правило являются полупроводниками.

КОВАЛЕНТНАЯ (ГОМЕОПОЛЯРНАЯ) СВЯЗЬ

Ковалентная связь - между атомами с относительно малыми различиями в электроотрицательностях за счет обобществления пары электронов связываемых атомов



ПОЛЯРНАЯ (НЕСИММЕТРИЧНАЯ)

Связь между атомами с различной электроотрицательностью ($2 > \Delta\chi > 0,5$) и несимметричным распределением общей электронной пары.

Дипольный момент $M \neq 0$.



НЕПОЛЯРНАЯ (СИММЕТРИЧНАЯ)

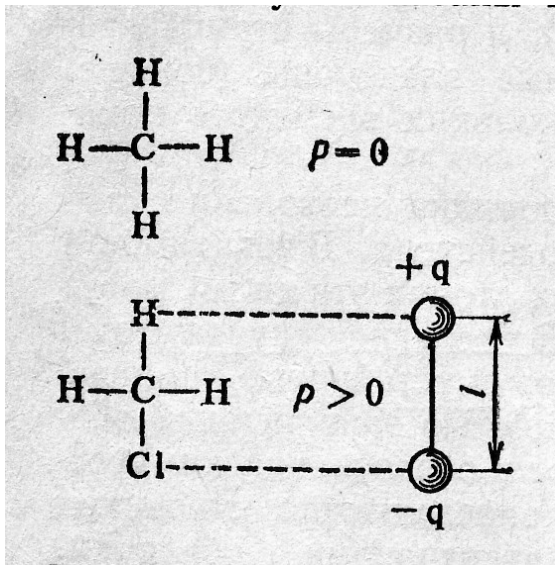
Связь между атомами с равной электроотрицательностью ($\Delta\chi = 0$), равномерным распределением электронной плотности между ядрами атомов.

Дипольный момент $M = 0$.

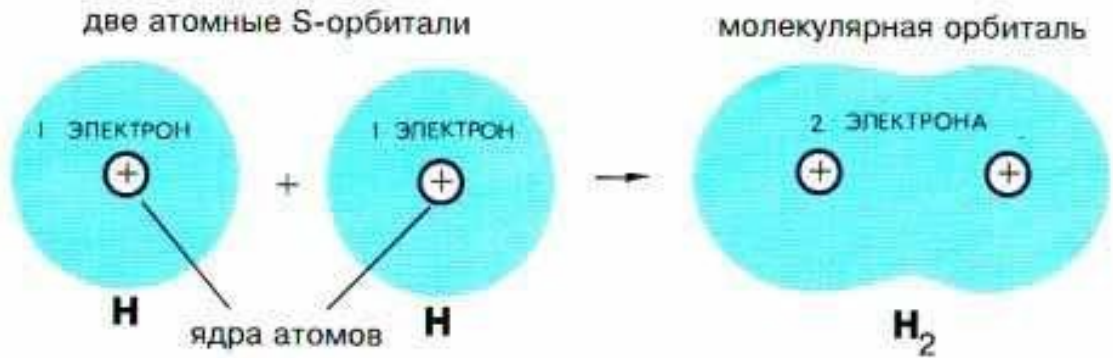
СВОЙСТВА: направленность, насыщенность, полярность, поляризуемость

НЕПОЛЯРНЫЕ И ПОЛЯРНЫЕ (ДИПОЛЬНЫЕ) МОЛЕКУЛЫ

Для ковалентных кристаллов типичны энергии связи от 3 до 5 эВ/ат.



Примеры неполярной (симметричной) и полярной (несимметричной) молекул



Возникновение ковалентной связи при образовании молекулы водорода из двух атомов водорода. Электронные оболочки атомов водорода (с одним s-электроном у каждого атома) сливаются в общее электронное облако (молекулярную орбиталь). Новая электронная оболочка подобна завершённой электронной оболочке инертного газа гелия из двух электронов: $1s^2$.

Графическое изображение химической связи в молекуле H₂



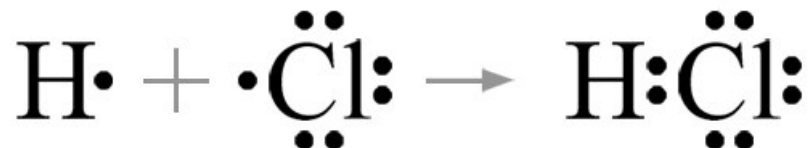
Образование молекулы S₂, между атомами которой – двойная ковалентная связь



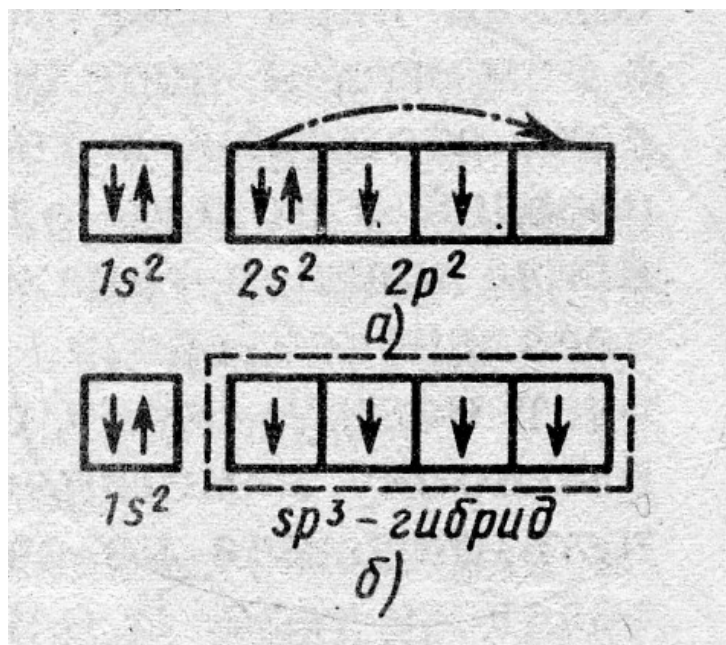
Образование молекулы N₂, между атомами которой – тройная ковалентная связь



Образование молекулы HCl, между атомами которой – ковалентная полярная связь



ГИБРИДИЗАЦИЯ ЭЛЕКТОННЫХ ОРБИТ



Распределение валентных электронов по орбиталям в углероде:

- электронная оболочка атома углерода в свободном состоянии;
- возбужденное состояние

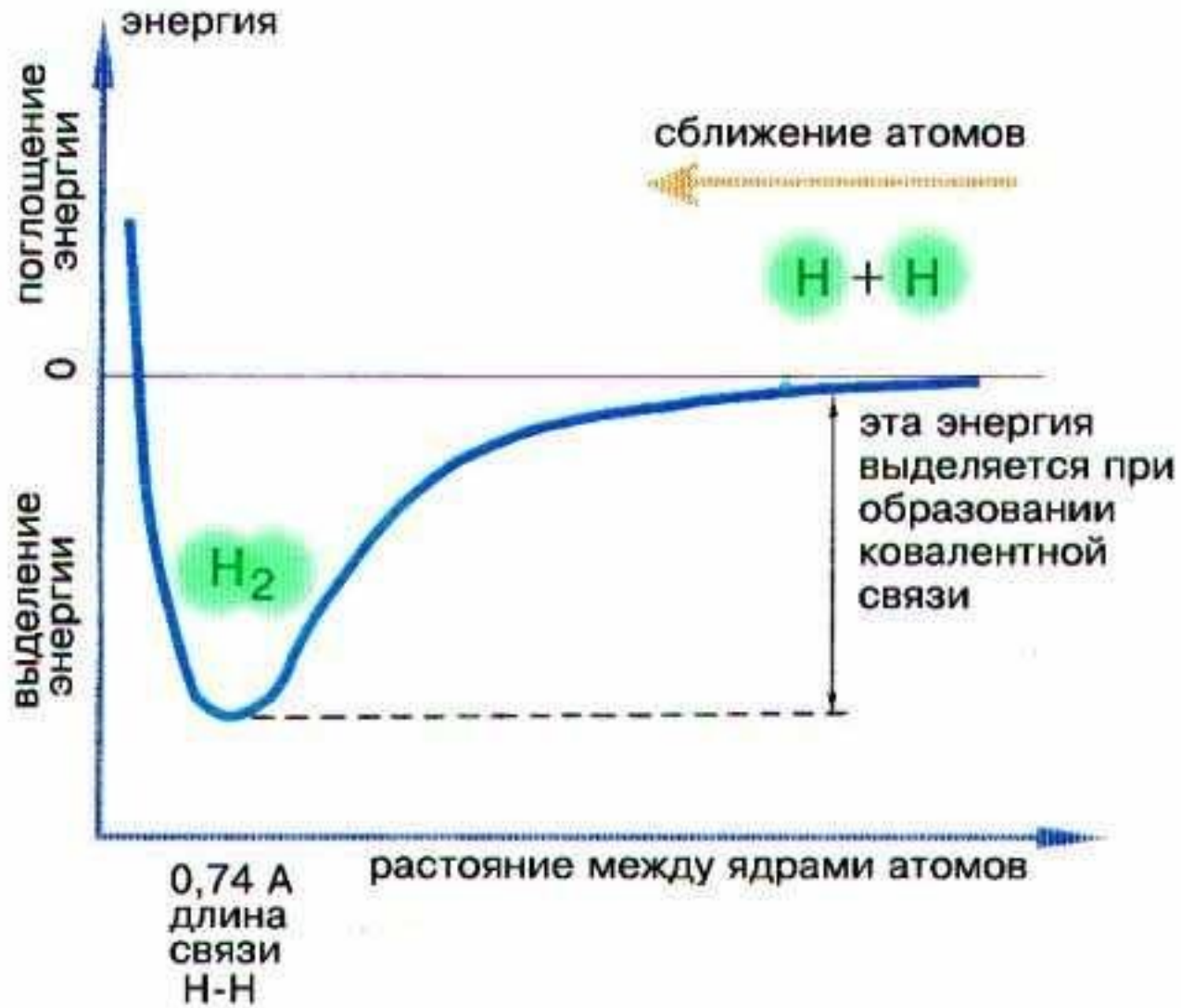
Гибридизация — процесс перераспределения электронных плотностей близких по энергии орбиталей, которые приводят к их полной равноценности.

Гибридизация АО — это взаимодействие (смешение) разных по типу, но близких по энергии атомных орбиталей данного атома с образованием гибридных орбиталей одинаковой формы и энергии.

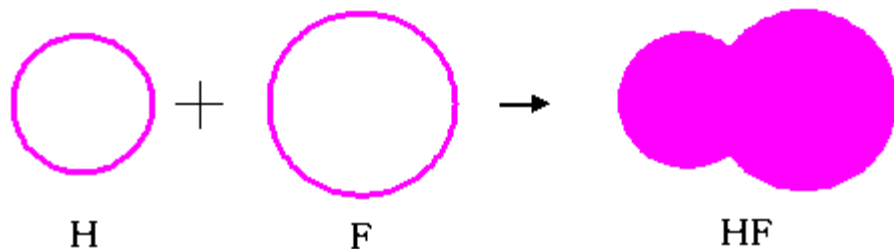
Например, смешение $2s$ -АО с $2p$ -АО дает две гибридные $2sp$ -АО:



Изменение потенциальной энергии при взаимодействии двух атомов водорода с образованием молекулы водорода

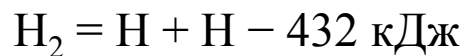
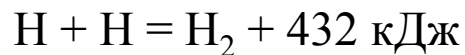


Длина химической связи



Длины некоторых простых и кратных связей

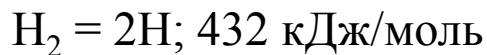
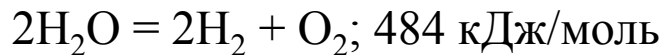
Связь	Длина (пм)	Связь	Длина (пм)
C-C	154	C-O	143
C=C	133	C=O	123
C≡C	131	C≡O	113



Энергия ковалентной связи

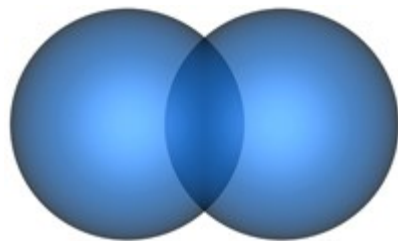
Чем выше энергия химической связи, тем прочнее связь.

	HF	HCl	HBr	HI
Длина связи, пм	92	128	141	160
Энергия связи, кДж/моль	565	431	364	217

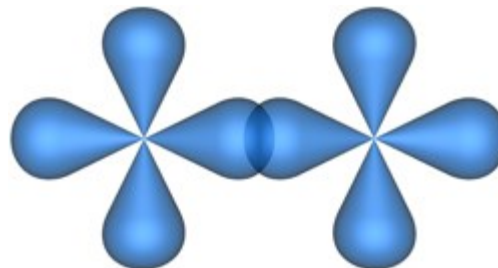


Поскольку электронные облака имеют различную форму, их взаимное перекрывание может осуществляться разными способами. В зависимости от способа перекрывания и симметрии образующегося облака различают σ -, π - и δ -связи.

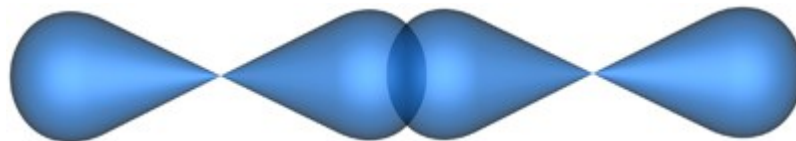
σ -Связь (Сигма-связь) осуществляется при перекрывании облаков вдоль линии соединения атома



σ -Связь между s -орбиталями



σ -Связь между d -орбиталями

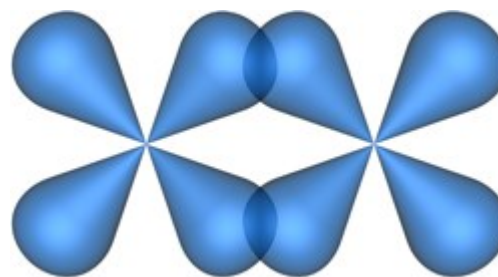


σ -Связь между p -орбиталями

π-Связь (Пи-связь) возникает при перекрывании электронных облаков по обе стороны от линии соединения атомов

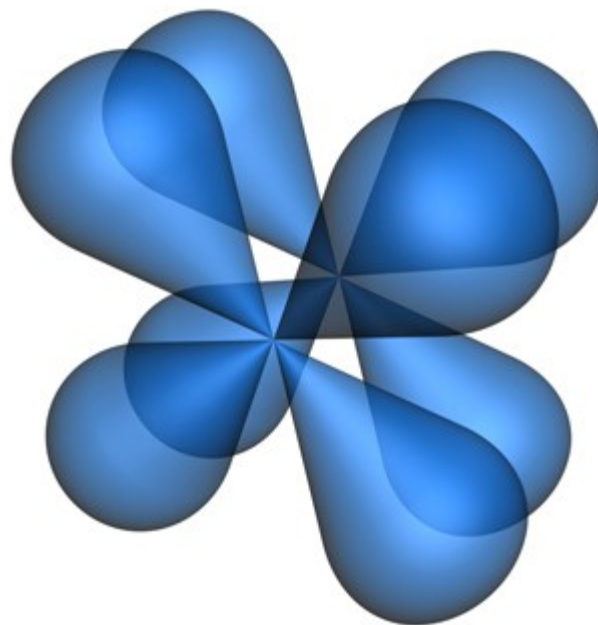


π -Связь между *p*-орбиталями



π -Связь между *d*-орбиталями

δ-Связь (Дельта-связь) обязана перекрыванию всех четырех лепестков *d*-электронных облаков, расположенных в параллельных плоскостях



δ -Связь между *d*-орбиталями

Электроны *s*-орбиталей могут участвовать лишь в σ -связывании, *p*-электроны – уже в σ - и π -связывании, а *d*-электроны – как в σ - и π -, так и в δ -связывании.

Атомные орбитали с большой разницей в энергии (например, $1s$ и $2p$) в гибридизацию не вступают.

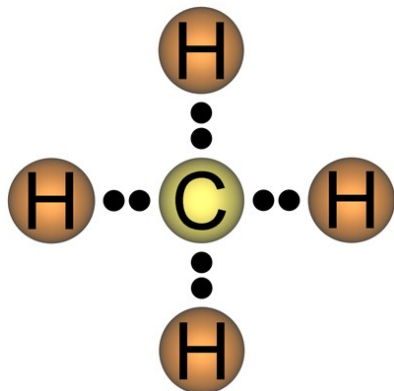
В зависимости от числа участвующих в гибридизации p -АО возможны следующие виды гибридизации:

для атомов углерода и азота – sp^3 , sp^2 и sp ;

для атома кислорода – sp^3 , sp^2 ;

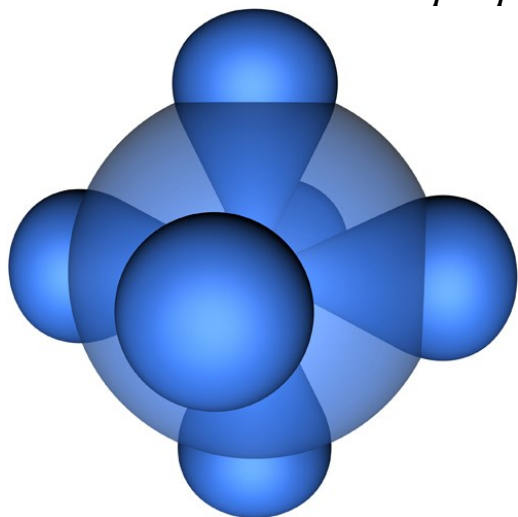
для галогенов – sp^3 .

ГИБРИДИЗАЦИЯ ЭЛЕКТОННЫХ ОРБИТ

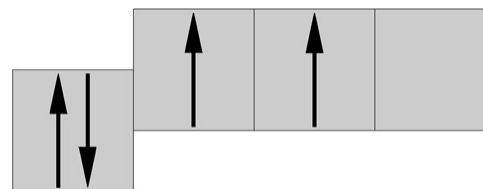


Электронная формула атома углерода: $1s^2 2s^2 2p^2$

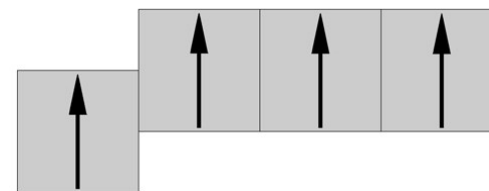
Для образования молекулы метана атом углерода переходит в возбужденное состояние: $C^* 1s^2 2s^1 2p^1 2p^1 2p^1$



Модель внешнего энергетического уровня атома углерода



Графическая электронная формула внешнего энергетического уровня атома углерода

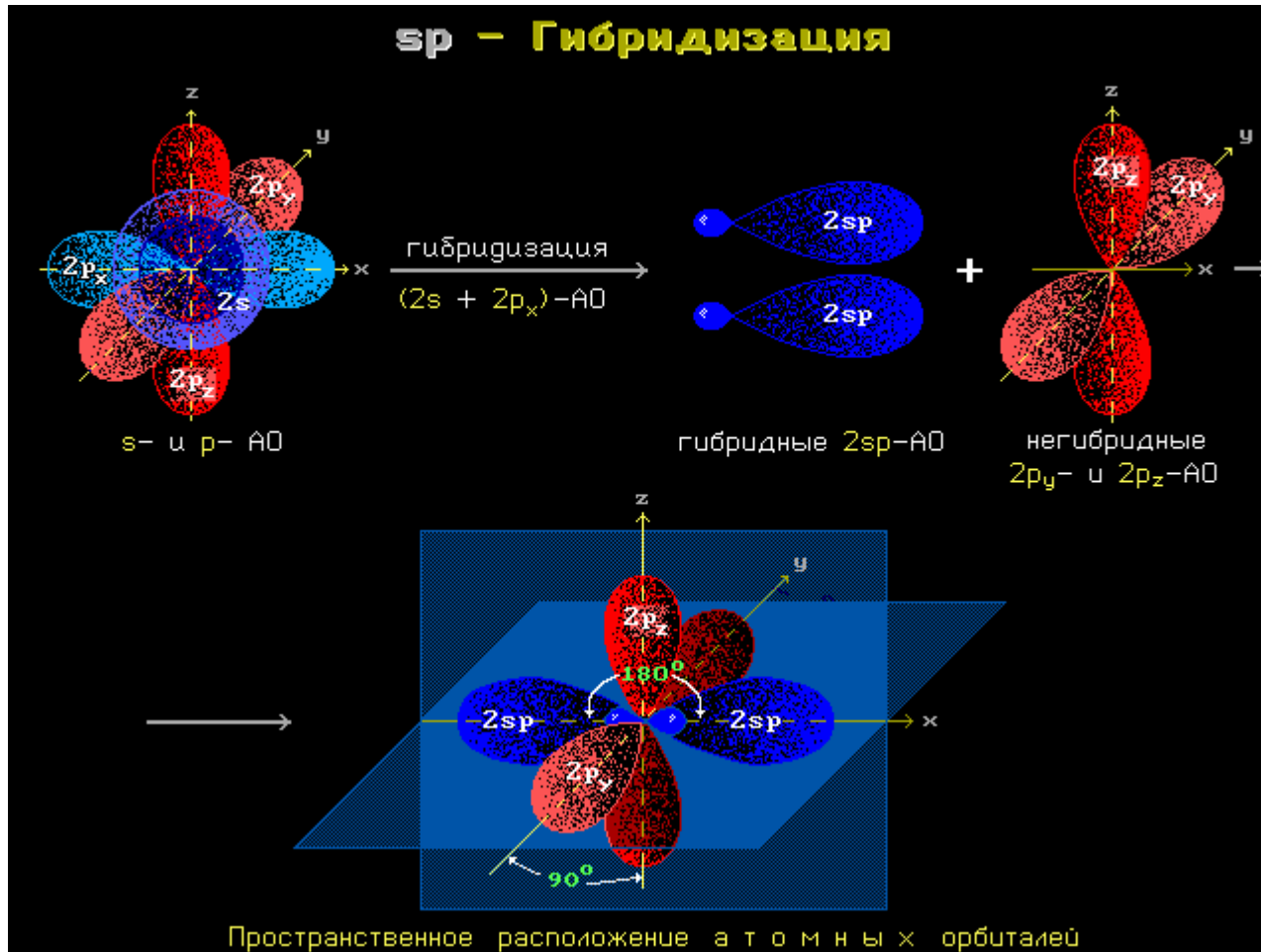


Графическая электронная формула внешнего энергетического уровня атома углерода в возбужденном состоянии

Гибридизация атомных орбиталей – изменение формы и энергии орбиталей атома при образовании ковалентной связи для достижения более эффективного перекрывания орбиталей.

SP-ГИБРИТИЗАЦИЯ (ЛИНЕЙНАЯ)

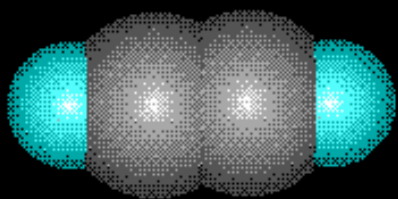
Одна s - и одна p -орбиталь смешиваются, образуя две равноценные sp -орбитали, расположенные под углом 180° , т.е. на одной оси.



Строение молекул с *sp*-атомами отражают их модели:

МОДЕЛИ МОЛЕКУЛ, СОДЕРЖАЩИХ АТОМЫ В *sp*-ГИБРИДИЗОВАННОМ СОСТОЯНИИ

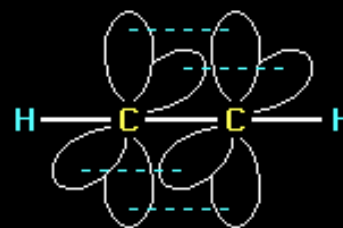
Ацетилен $\text{HC}\equiv\text{CH}$



Масштабная модель
(полусферическая)

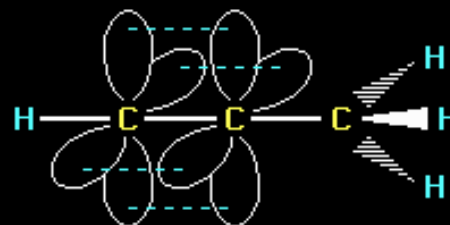
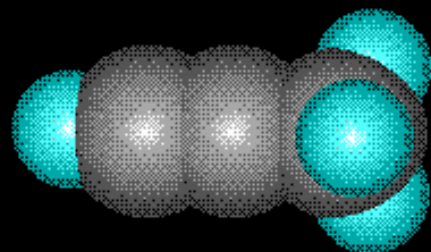


Шаростержневая
модель



Атомно-орбитальная
модель

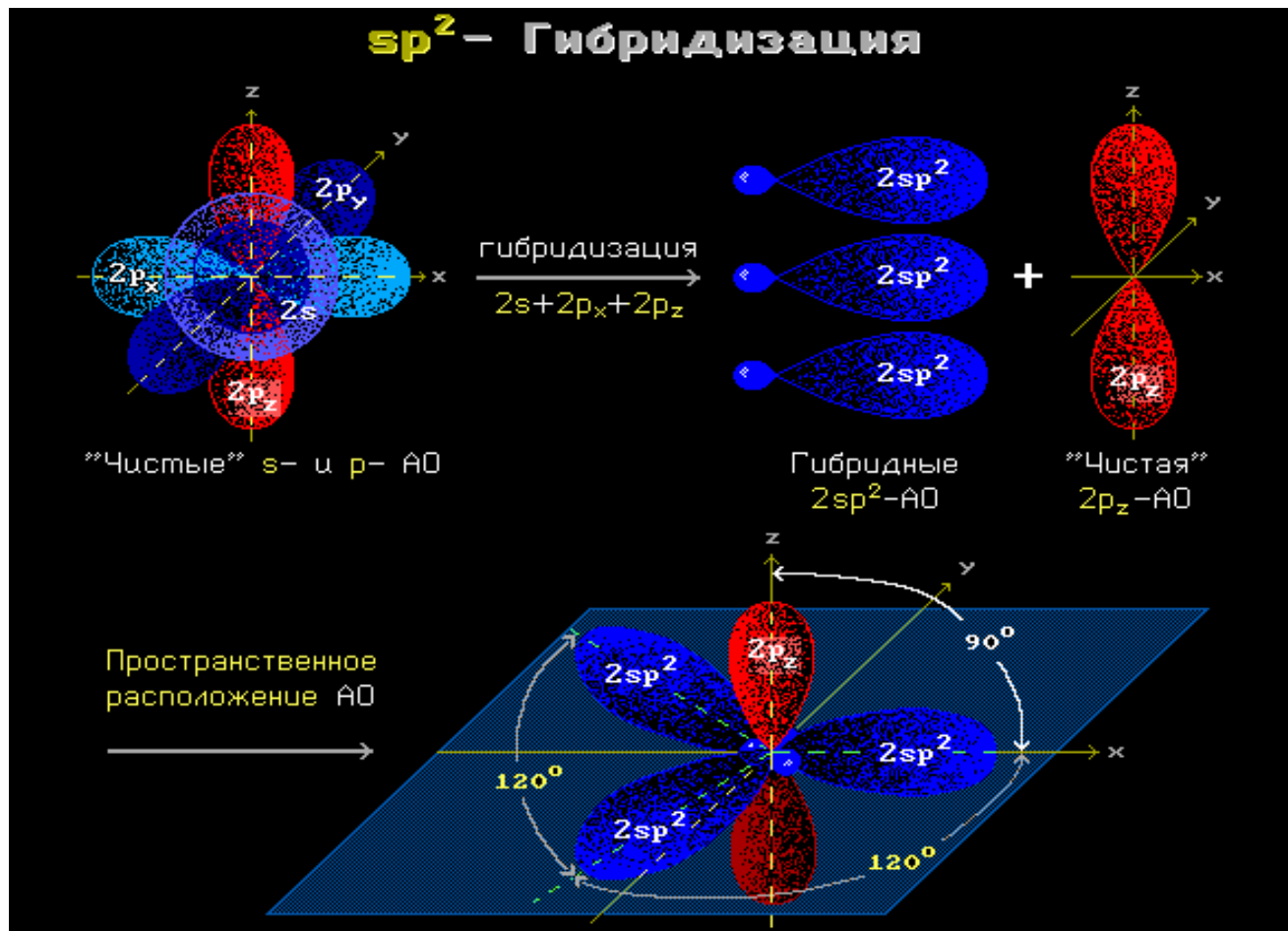
Метилацетилен $\text{HC}\equiv\text{C}-\text{CH}_3$



sp-Гибридное состояние свойственно атому, если сумма числа связанных с ним атомов и числа его неподеленных электронных пар равна 2.

SP²-ГИБРИТИЗАЦИЯ (ПЛОСКОСТНО-ТРИГОНАЛЬНАЯ)

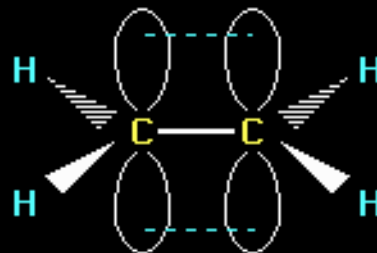
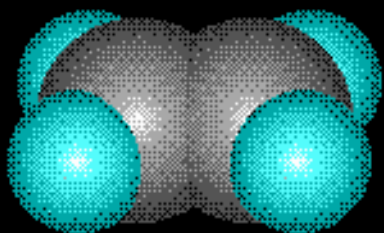
Одна *s*- и две *p*-орбитали смешиваются, и образуются *три* равноценные *sp*²-гибридные орбитали, расположенные в одной плоскости под углом 120°.



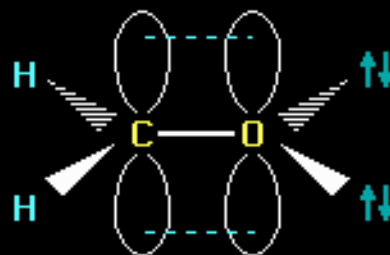
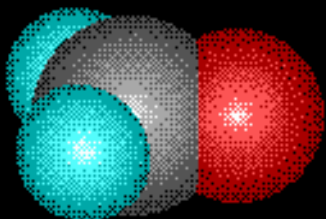
Строение молекул с sp^2 -атомами отражают их модели:

МОДЕЛИ МОЛЕКУЛ, СОДЕРЖАЩИХ АТОМЫ В sp^2 -ГИБРИДИЗОВАННОМ СОСТОЯНИИ

Этилен $H_2C=CH_2$



Формальдегид $H_2C=O:$

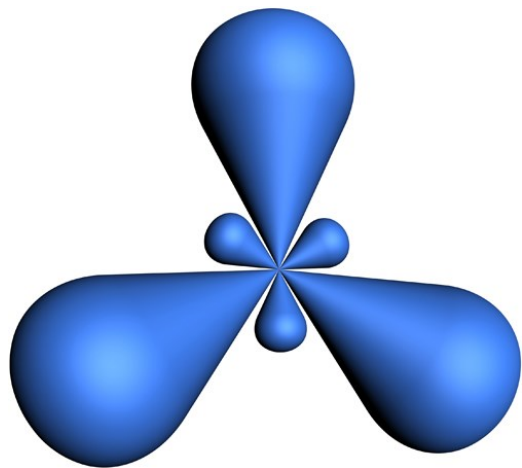


Масштабные модели
(полусферические)

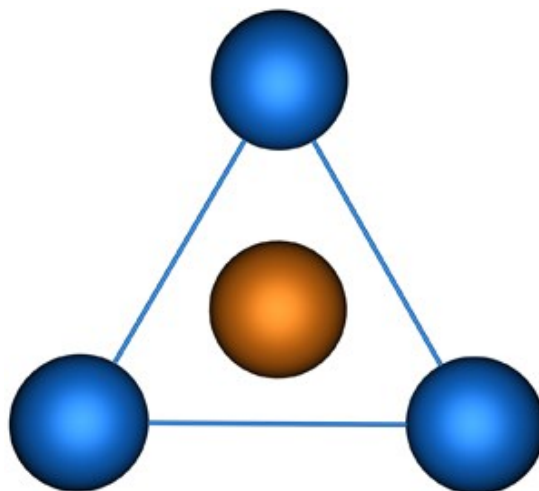
Шаростержневые
модели

Атомно-орбитальные
модели

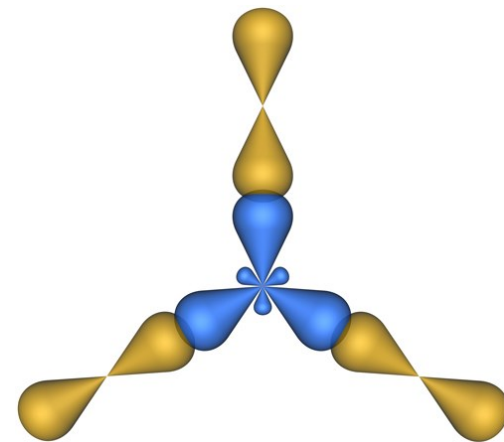
sp^2 -Гибридное состояние свойственно атому, если сумма числа связанных с ним атомов и числа его неподеленных электронных пар равна 3



Модель атома с sp^2 -гибридными орбиталями



Пространственная конфигурация молекулы, центральный атом которой включает в себя sp^2 -гибридные орбитали

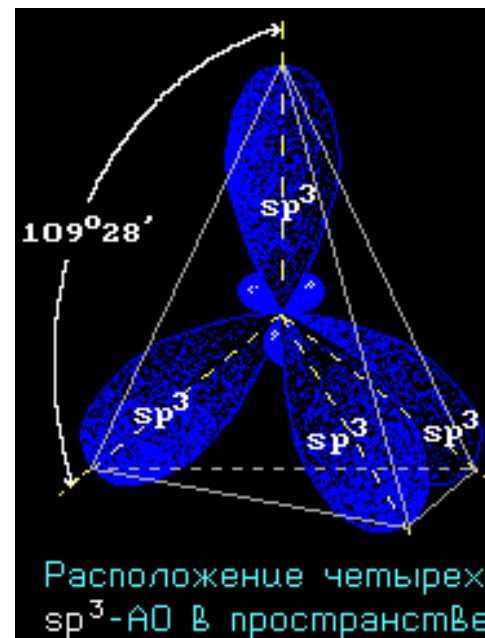
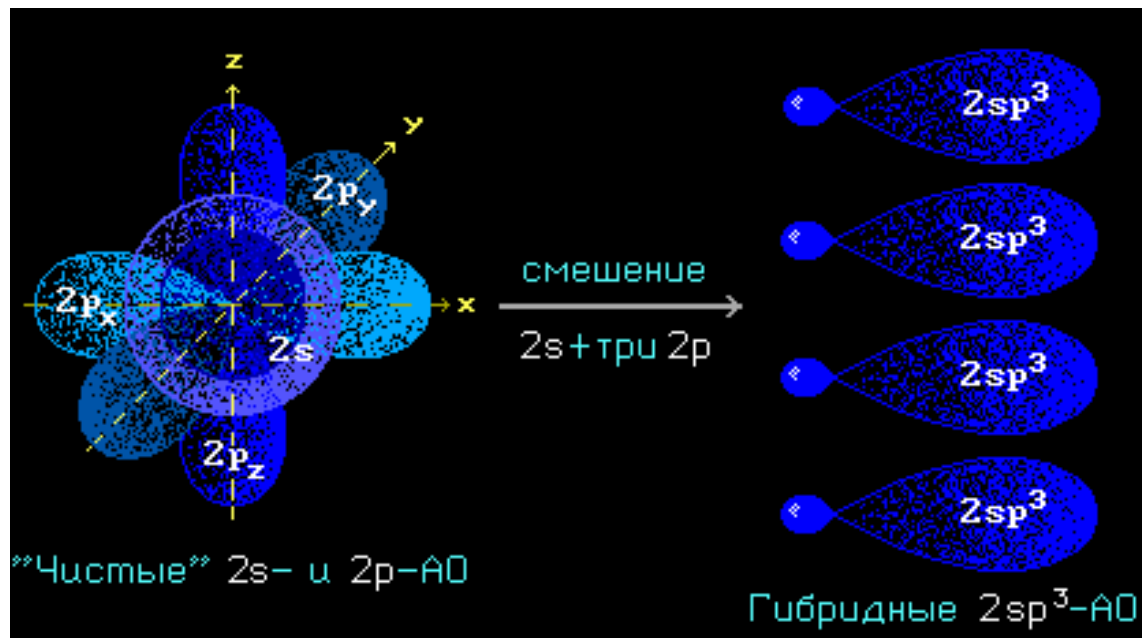


Модель молекулы BCl_3

Примеры соединений, в которых наблюдается sp^2 -гибридизация: SO_3 , BCl_3 , BF_3 , AlCl_3 , CO_3^{2-} , NO_3^- . sp^2 -гибридизация характерна для всех этиленовых углеводородов (алкенов) (общая формула C_nH_{2n}), карбоновых кислот и ароматических углеводородов (аренов) и других органических соединений: C_2H_4 (этилен), C_4H_8 , C_6H_{12} , C_6H_6 (бензол), C_8H_{10} , C_9H_{12} , CH_3COOH , $\text{C}_6\text{H}_5\text{OH}$ (фенол), CH_2O (формальдегид), $\text{C}_5\text{H}_9\text{NO}_4$ (глутаминовая кислота) и др.

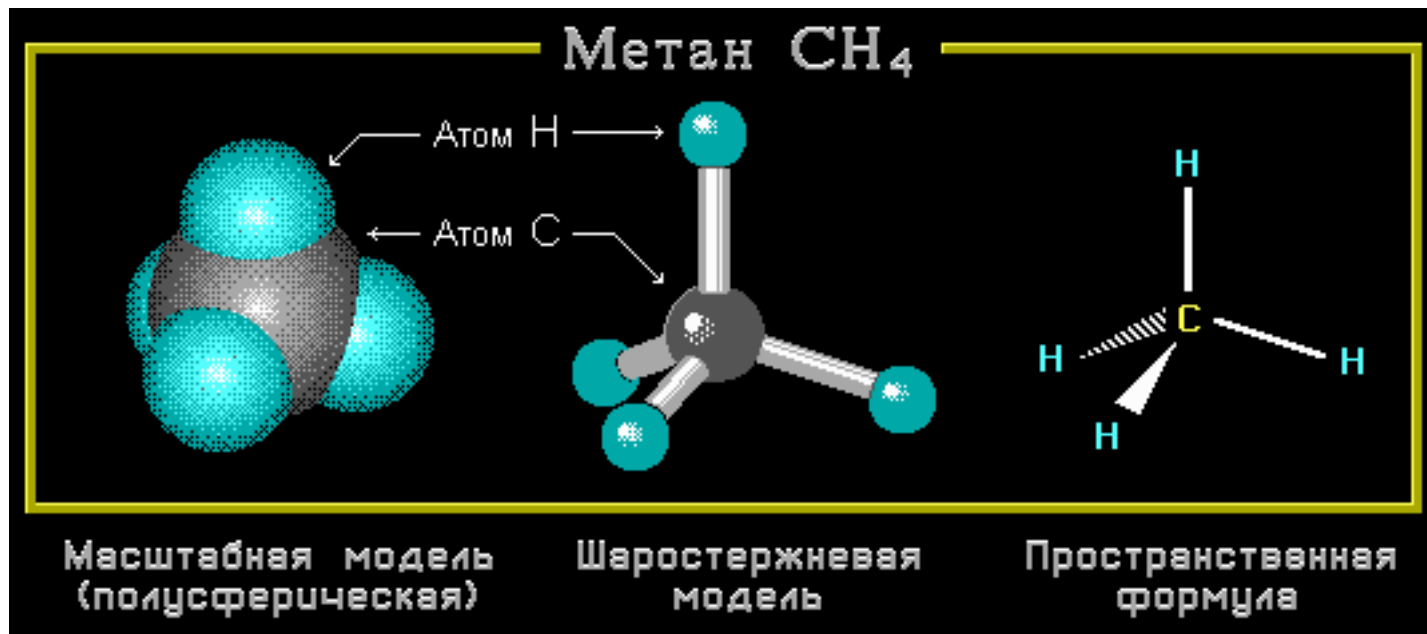
SP³ ГИБРИТИЗАЦИЯ (ТЕТРАЭДРИЧЕСКАЯ)

Одна *s*- и три *p*-орбитали смешиваются, и образуются *четыре* равноценные по форме и энергии *sp*³-гибридные орбитали.



Оси sp^3 -гибридных орбиталей направлены к вершинам правильного тетраэдра. Тетраэдрический угол между ними равен $109^{\circ}28'$, что соответствует наименьшей энергии отталкивания электронов.

На примере молекулы *метана* показаны объемные модели и пространственная (стереохимическая) формула молекулы с sp^3 -углеродным атомом:



sp^3 -Гибризованное состояние свойственно атому, если сумма числа связанных с ним атомов и числа его неподделенных электронных пар равна 4.

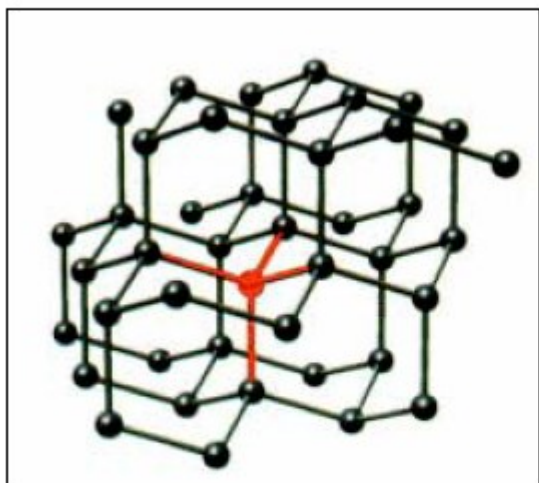
Углерод в sp^3 -гибридном состоянии находится в простом веществе *алмазе* — одной из аллотропных форм углерода.

Это состояние характерно для атомов C, N, O и др., соединенных с другими атомами одинарными связями (sp^3 -атомы выделены красным цветом):

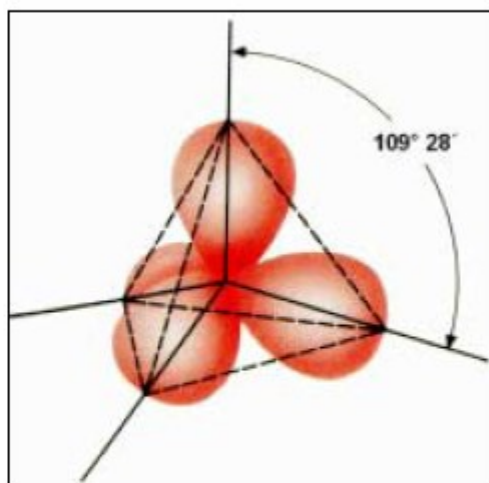
CH₄, **RCH₃**, **NH₃**, **RNH₂**, **H₂O**, **ROH**, **R₂O**;

а также анионам типа: **R₃C⁻**, **RO⁻** и т.п.

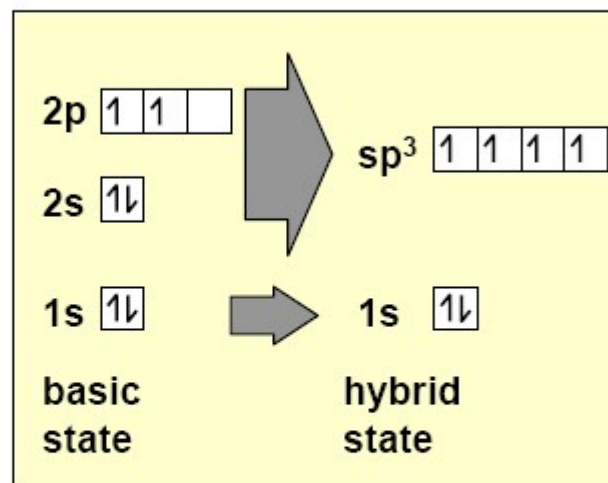
diamond structure (isomorphs: Si, Ge)



coordination number: 4

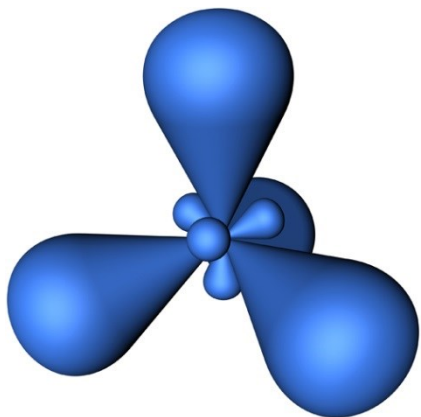


hybrid orbital: sp^3

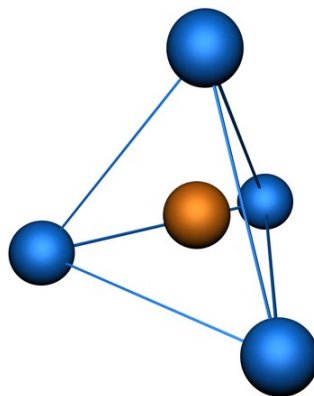


energy levels
of electrons
in C (element)

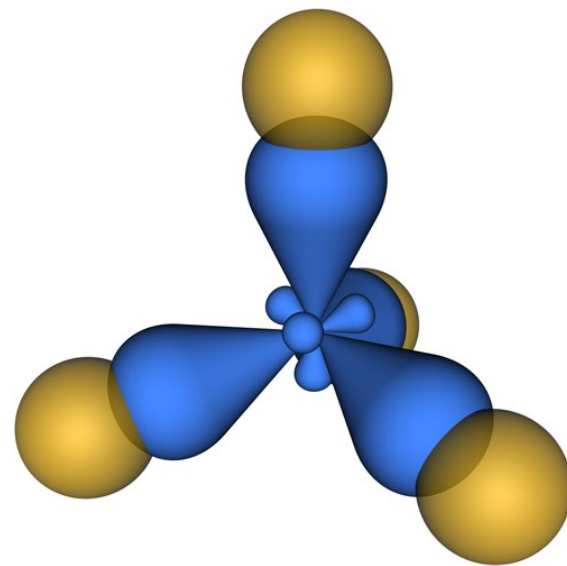
energy levels
of electrons
in C (diamond
structure)



Модель атома с sp^3 -гибридными орбиталями



Тетраэдрическая пространственная конфигурация молекулы, центральный атом которой образован sp^3 -гибридными орбиталями



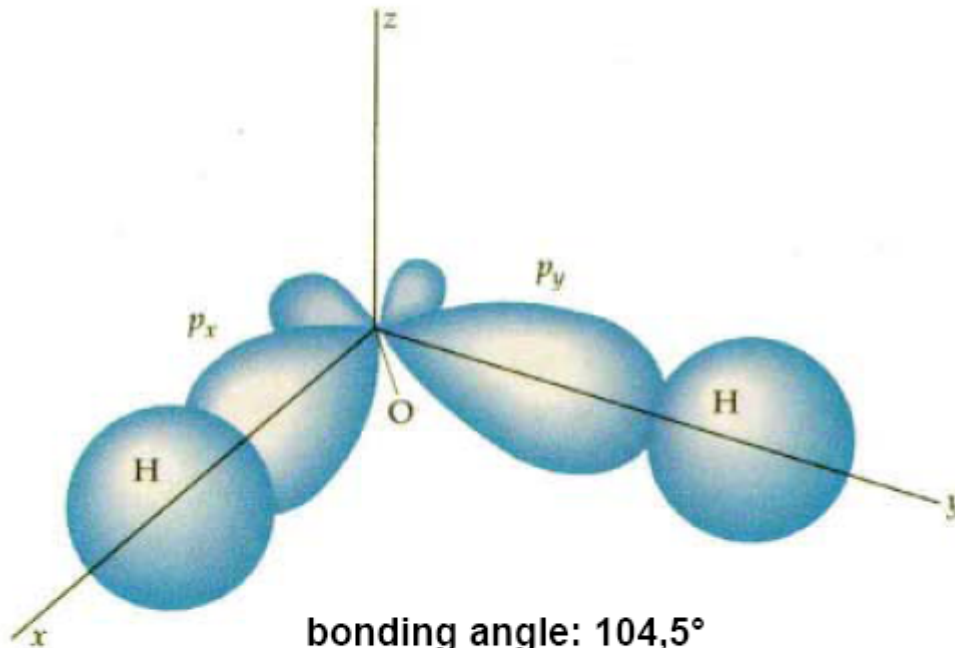
Модель молекулы CH_4

Геометрическая форма частиц

Гибридизация	Геометрическая форма	Угол между связями
sp	Линейная	180°
sp^2	Треугольная	120°
sp^3	Тетраэдрическая	$109,5^\circ$
sp^3d	Тригонально-бипирамидальная	$90^\circ, 120^\circ$
sp^3d^2	Октаэдрическая	90°

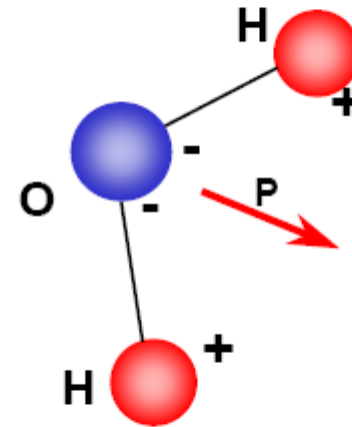
Covalent Bonding of a H₂O Molecule

- electron density distribution



bonding angle: 104,5°
hybrid orbital: sp linear
p_x, p_y - orbitals of oxygen
s - orbitals of hydrogen

- permanent dipole moment



water is a
dielectric material !

ТИПЫ ГИБРИДИЗАЦИИ

Тип гибридизации	Геометрическая форма	Угол между связями	Примеры
sp	линейная	180°	BeCl_2
sp^2	треугольная	120°	BCl_3
sp^3	тетраэдрическая	$109,5^\circ$	CH_4
sp^3d	тригонально-бипирамидальная	$90^\circ; 120^\circ$	PCl_5
sp^3d^2	октаэдрическая	90°	SF_6

Точки между атомами означают связывающие пары электронов (химическую связь).
 К несвязывающим относятся электроны неподделенных пар и неспаренные электроны.

В оболочке атома Н 2 электрона

Внешняя оболочка содержит 8 электронов

Неподделенная пара электронов

Метан

Этилен

Ацетилен

Этан

ПЕРИОДИЧЕСКАЯ СИСТЕМА ХИМИЧЕСКИХ ЭЛЕМЕНТОВ Д.И.МЕНДЕЛЕЕВА

www.calc.ru



Д.И. Менделеев
1834–1907

Периоды	Ряды	Г Р У П П Ы Э Л Е М Е Н Т О В																Энергетические уровни		
		I		II		III		IV		V		VI		VII		VIII				
		а	б	а	б	а	б	а	б	а	б	а	б	а	б	а	б			
1	1	H водород 1,008																He гелий 4,003	2	
2	2	Li литий 6,941	Be бериллий 9,0122	B бор 10,811	C углерод 12,011	N азот 14,007	O кислород 15,999	F фтор 18,998										Ne неон 20,179	10	
3	3	Na натрий 22,99	Mg магний 24,312	Al алюминий 26,982	Si кремний 28,086	P фосфор 30,974	S сера 32,064	Cl хлор 35,453										Ar аргон 39,948	18	
4	4	K калий 39,102	Ca кальций 40,08		Sc скандий 44,956	Ti титан 47,956	V ванадий 50,941	Cr хром 51,996	Mn марганец 54,938	Fe железо 55,849	Co кобальт 58,933	Ni никель 58,7								
	5	Cu медь 63,546	Zn цинк 65,37	Ga галлий 69,72	Ge германий 72,59	As мышьяк 74,922	Se селен 78,96	Br бром 79,904											Kr криптон 83,8	36
5	6	Rb рубидий 85,468	Sr стронций 87,62		Y иттрий 88,906	Zr цирконий 91,22	Nb ниобий 92,906	Mo молибден 95,94	Tc технеций [99]	Ru рутений 101,07	Rh родий 102,906	Pd палладий 106,4								
	7	Ag серебро 107,868	Cd кадмий 112,41	In индий 114,82	Sn олово 118,69	Sb сурьма 121,75	Te теллур 127,6	I иод 126,905											Xe ксенон 131,3	54
6	8	Cs цезий 132,905	Ba барий 137,34	57–71 лантаноиды		Hf гафний 178,49	Ta тантал 180,948	W вольфрам 183,85	Re рений 186,207	Os осмий 190,2	Ir иридий 192,22	Pt платина 195,09								
	9	Au золото 196,967	Hg ртуть 200,59	Tl таллий 204,37	Pb свинец 207,19	Bi висмут 208,98	Po полоний [210]	At астат [210]											Rn радон [222]	86
7	10	Fr франций [223]	Ra радий [226]	89–103 актиноиды		Rf резерфордий [261]	Db дубний [262]	Sg сиборгий [263]	Bh борий [262]	Hn ханний [265]	Mt мейтнерий [265]									
Высшие оксиды		R_2O	RO	R_2O_3	RO_2	R_2O_5	RO_3	R_2O_7	RO_4											
Летучие водородные соединения					RH_4	RH_3	H_2R	HR												

СИМВОЛ ЭЛЕМЕНТА ПОРЯДКОВЫЙ НОМЕР



НАЗВАНИЕ ЭЛЕМЕНТА
ОТНОСИТЕЛЬНАЯ АТОМНАЯ МАССА

РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ЭЛЕКТРОНОВ ПО СЛОЯМ

- s-элементы
- p-элементы
- d-элементы
- f-элементы

Л А Н Т А Н О И Д Ы

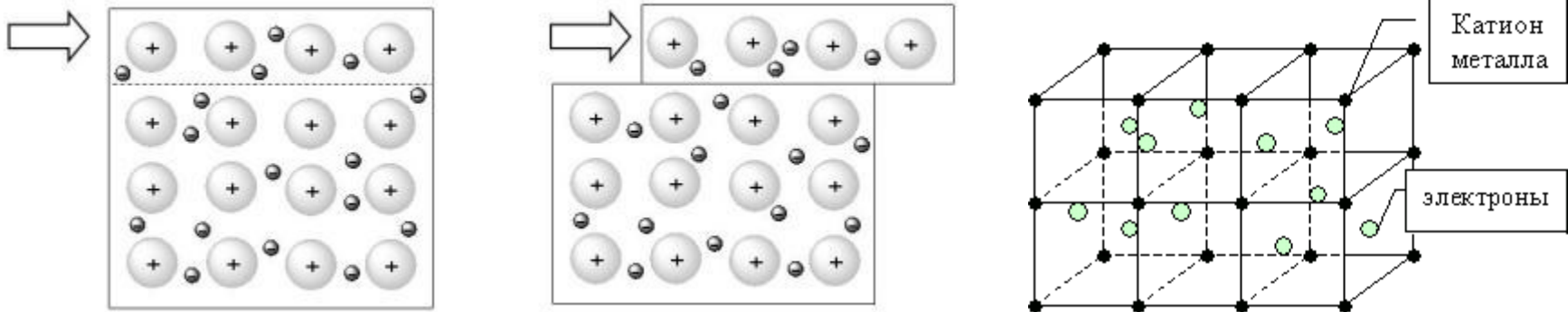
57 La лантан 138,906	58 Ce церий 140,12	59 Pr празеодим 140,908	60 Nd неодим 144,24	61 Pm прометий [145]	62 Sm самарий 150,4	63 Eu европий 151,96	64 Gd гадолиний 157,25	65 Tb тербий 158,926	66 Dy диспрозий 162,5	67 Ho гольмий 164,93	68 Er эрбий 167,26	69 Tm тулий 168,934	70 Yb иттербий 173,04	71 Lu лютеций 174,97
-----------------------------------	---------------------------------	--------------------------------------	----------------------------------	-----------------------------------	----------------------------------	-----------------------------------	-------------------------------------	-----------------------------------	------------------------------------	-----------------------------------	---------------------------------	----------------------------------	------------------------------------	-----------------------------------

А К Т И Н О И Д Ы

89 Ac актиний [227]	90 Th торий 232,038	91 Pa протактиний [231]	92 U уран 238,29	93 Np нептуний [237]	94 Pu плутоний [244]	95 Am амерций [243]	96 Cm кюрий [247]	97 Bk берклий [247]	98 Cf калифорний [251]	99 Es эйнштейний [254]	100 Fm фермий [257]	101 Md менделевий [258]	102 No нобелий [259]	103 Lr лоуренсий [260]
----------------------------------	----------------------------------	--------------------------------------	-------------------------------	-----------------------------------	-----------------------------------	----------------------------------	--------------------------------	----------------------------------	-------------------------------------	-------------------------------------	----------------------------------	--------------------------------------	-----------------------------------	-------------------------------------

МЕТАЛЛИЧЕСКАЯ СВЯЗЬ

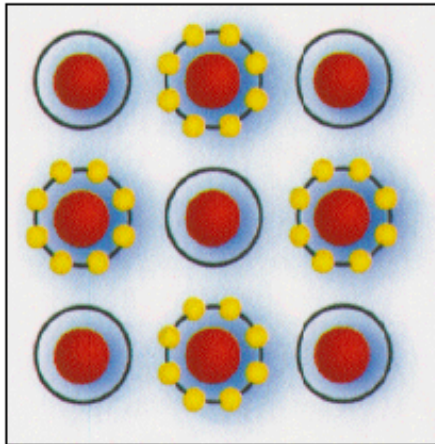
Химическая связь, обусловленная наличием большого количества не связанных с ядрами подвижных электронов



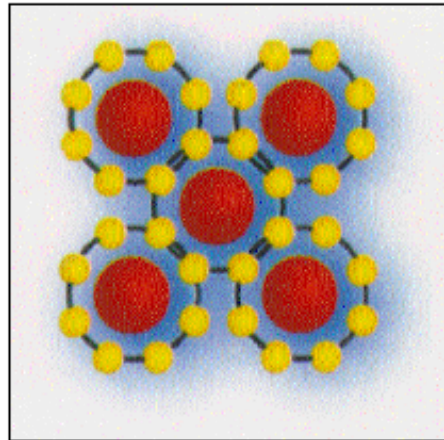
Сдвиг слоев металлического кристалла не приводит к возникновению больших сил отталкивания между ионами металла, так как они омываются "электронным морем"

СВЯЗЬ ИОННАЯ – КОВАЛЕНТНАЯ – МЕТАЛЛИЧЕСКАЯ

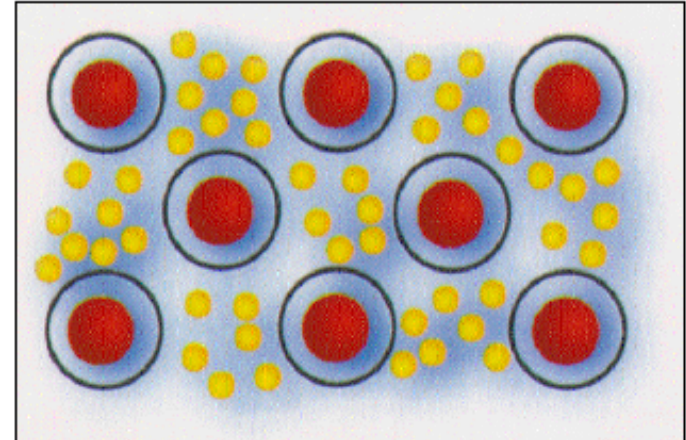
• ИОННАЯ



• КОВАЛЕНТНАЯ



• МЕТАЛЛИЧЕСКАЯ



• binary compounds between group I + VII : NaCl
II + VI : MgO

• semi-conductors GaAs, InSb, SiC

• molecules CH₄...
• elements C, Si, Ge

• intermetallic bonding

• elemental metals

Сравнение металлической связи с ионной и ковалентной

<i>Ковалентная связь</i>	<i>Металлическая связь</i>	<i>Ионная связь</i>
<p>Образование связи за счет общих электронов</p> <p>Пара электронов, образующая связь, принадлежит двум связываемым атомам</p>	<p>Образование связей одновременно между большим числом частиц</p> <p>Электроны, образующие связь, в равной мере принадлежат всем атомам</p>	<p>Образование связей одновременно между большим числом частиц</p> <p>Взаимное притяжение между катионами металлов и электронным газом</p> <p>Взаимное притяжение между катионами и анионами</p>
<p>Взаимное смещение атомов (при ударе) приводит к разрыву связи</p>	<p>Взаимное смещение катионов (при ударе) не приводит к разрыву связи</p>	<p>Взаимное смещение катионов и анионов (при ударе) приводит к разрыву связи</p>

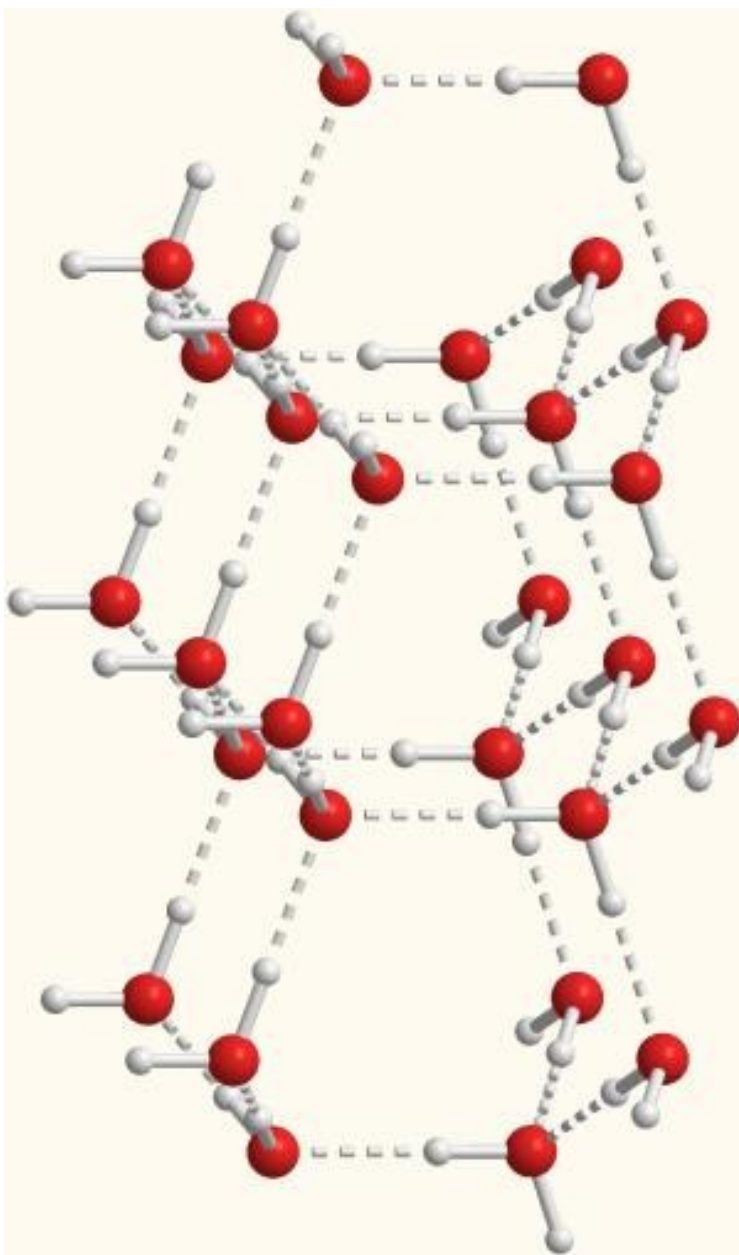
ВОДОРОДНАЯ СВЯЗЬ

Взаимодействие между двумя электроотрицательными атомами одной или разных молекул посредством атома водорода: $A-H \dots B$ (чертой обозначена ковалентная связь, тремя точками - водородная связь)

Водородная связь обусловлена электростатическим притяжением атома водорода (несущим положительный заряд $\delta+$) к атому электроотрицательного элемента, имеющего отрицательный заряд $\delta-$.

Возникает, как правило, между атомами фтора, азота и кислорода (наиболее электроотрицательные элементы), реже - при участии атомов хлора, серы и других неметаллов.

Прочные водородные связи образуются в воде, фтороводороде, кислородсодержащих неорганических кислотах, карбоновых кислотах, фенолах, спиртах, аммиаке.



Модель растущего кристалла льда (красные - атомы кислорода, белые - атомы водорода в молекулах H₂O). Отдельные молекулы воды связаны друг с другом водородными связями (показаны пунктирными линиями) в строгом порядке. Это приводит к причудливым симметричным формам кристаллов. Лёд - молекулярный кристалл.

КЛАССИФИКАЦИЯ КРИСТАЛЛОВ ПО ТИПАМ СВЯЗИ

Тип Кристалла	Пример	Энергия связи, ккал/моль	Свойства
1. Ионные	NaCl LiF	180 240	Диэлектрики (низкая проводимость при низких температурах; при высоких - ионная проводимость); сильное ИК поглощение; твердые, хрупкие.
2. Ковалентные	Алмаз SiC	170 283	Диэлектрики, высокая твердость, высокая температура плавления
3. Металлические	Na Fe	26 94	Высокая электропроводность, высокий коэффициент отражения
4. Молекулярные	Ar CCl ₄	1,8 2,4	Диэлектрики, низкая точка плавления, высокая сжимаемость.
5. С водородными связями	HF Лед	7 12	Тенденция к полимеризации

МЕЖМОЛЕКУЛЯРНОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ

Взаимодействие молекул между собой, не приводящее к разрыву или образованию новых химических связей

Основу **ван-дер-ваальсовых сил** составляют кулоновские силы взаимодействия между электронами и ядрами одной молекулы и ядрами и электронами другой. На определенном расстоянии между молекулами силы притяжения и отталкивания уравниваются друг друга, и образуется устойчивая система.

Почти в чистом виде эти силы появляются между молекулами с насыщенными химическими связями (O_2 , H_2 , N_2 , CH_4 и др.), а также между атомами инертных газов, обуславливая существование их жидкого и твердого состояний.

МЕЖМОЛЕКУЛЯРНОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ

ДИСПЕРСИОННОЕ

ОРИЕНТАЦИОННОЕ

ИНДУКЦИОННОЕ

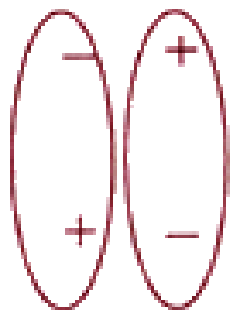
1. ОРИЕНТАЦИОННОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ

Ориентационные силы действуют между полярными молекулами, то есть обладающими дипольными электрическими моментами.



Atomic or molecular dipoles

Взаимодействие диполей зависит от их взаимной ориентации, и поэтому силы дипольного взаимодействия называются ориентационными.

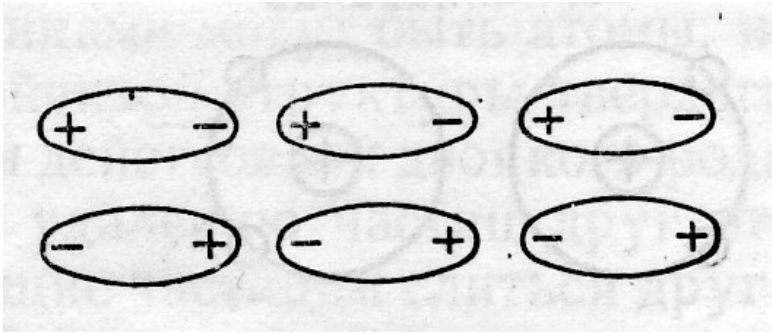


Для взаимодействия двух диполей энергия притяжения между ними (энергия Кеезома) выражается соотношением:

$$E_K = -2 \mu_1 \mu_2 / 4\pi \epsilon_0 r^3$$

μ_1 и μ_2 – дипольные моменты взаимодействующих диполей,
 r – расстояние между ними.

1. ОРИЕНТАЦИОННОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ



Энергия системы, определяемая ориентацией молекул, сильно зависит от температуры

При **низких температурах**, когда достигается полная ориентация молекул, энергия взаимодействия определяется соотношением

$$E_{\text{ор}} = -\frac{M^2}{2\pi\epsilon_0 r^3},$$

M – дипольный момент

r – расстояние между молекулами

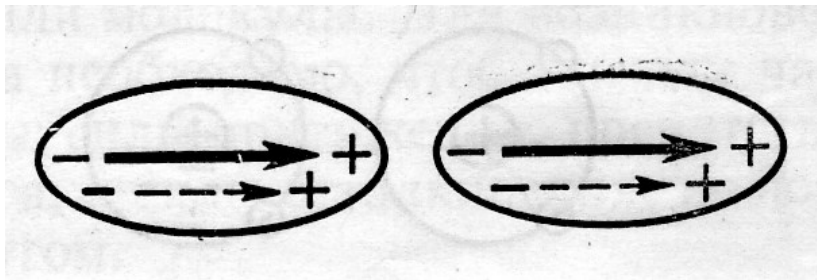
ϵ_0 – диэлектрическая постоянная

Для высоких же температур энергия взаимодействия дипольных молекул выражается формулой

$$E_{\text{ор}} = -\frac{M^4}{24\pi^2 \epsilon_0^2 kT} \frac{1}{r^6}.$$

2. ИНДУКЦИОННОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ

Неполярные молекулы некоторых веществ обладают высокой поляризуемостью, поэтому под влиянием внешнего электрического поля (например, при приближении полярной молекулы) у таких молекул возникает наведенный (индуцированный) электрический момент.



При сближении такие индуцированные диполи будут взаимодействовать друг с другом аналогично взаимодействию жестких диполей (**индуцированное** или **поляризационное** взаимодействие)

Энергия взаимного притяжения, возникающая вследствие взаимодействия между жестким диполем первой молекулы и индуцированным диполем второй молекулы не зависит от температуры и определяется соотношением

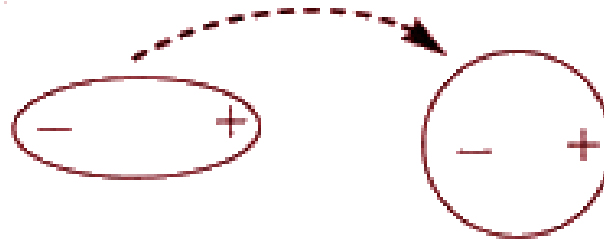
$$E_{\text{инд}} = -\frac{\alpha M^2}{8\pi\epsilon_0^2} \cdot \frac{1}{r^6},$$

M – постоянный дипольный момент молекулы, α – ее поляризуемость

3. ДИСПЕРСИОННОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ

Вид взаимодействия между нейтральными молекулами.

Электроны, которые находятся в постоянном движении, на миг могут оказаться сосредоточенными с одной стороны молекулы, то есть неполярная частица станет полярной. Это вызывает перераспределение зарядов в соседних молекулах, и между ними устанавливаются кратковременные связи:

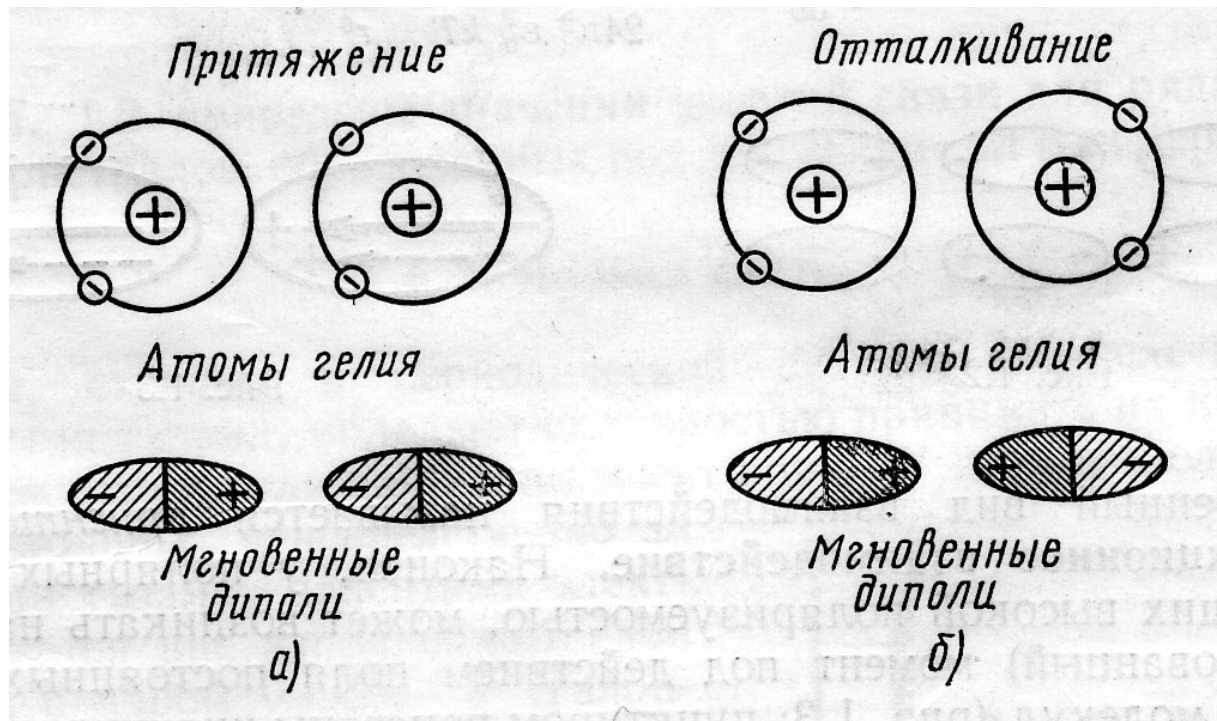


Энергия такого взаимодействия (энергия Лондона):

$$E_{\text{Л}} = -2 \mu_{\text{МГН}}^2 \alpha^2 / r^6$$

где $\mu_{\text{МГН}}$ — момент мгновенного диполя.

3. ДИСПЕРСИОННОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ



Энергии дисперсионного взаимодействия частиц:

$$E_d = -\frac{3}{4} \cdot \frac{\alpha^2 J}{r^6},$$

где α – **полярзуемость** частиц
 J – энергия их возбуждения
 r – расстояние между ними