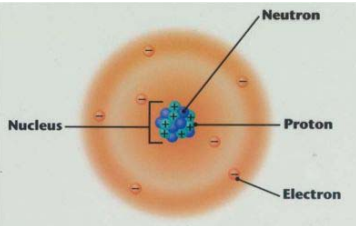




ЛЕСОТЕХНИЧЕСКИ УНИВЕРСИТЕТ

***3 РАЗПРЕДЕЛЕНИЕ НА
ЕЛЕКТРОНИТЕ И ИЗГРАЖДАНЕ
НА ЕЛЕКТРОННАТА ОБВИВКА
НА АТОМИТЕ.
ПЕРИОДИЧЕН ЗАКОН И
ПЕРИОДИЧНА СИСТЕМА***

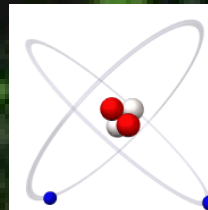
*Проф. Надка Игнатова
nadia_ignatova@abv.bg*

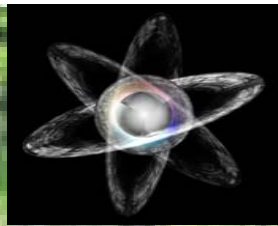
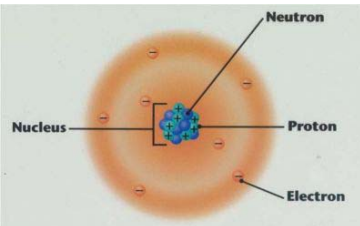


Въведение



При многоелектронните атоми, енергията на атомните орбитали зависи не само от главното квантово число n (най-общо E нараства с увеличаване на n), но се намесва и влиянието на орбиталното квантово число l чрез електростатични и магнитни взаимодействия между електроните, екранира се влиянието на положителното ядро от атомните орбитали и се променя силата на връзката ядро – електрон.



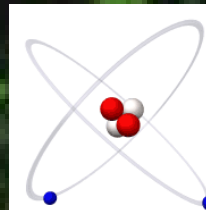


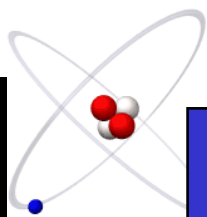
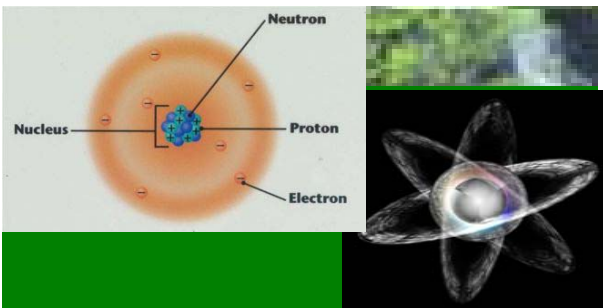
Правило на Клечковски



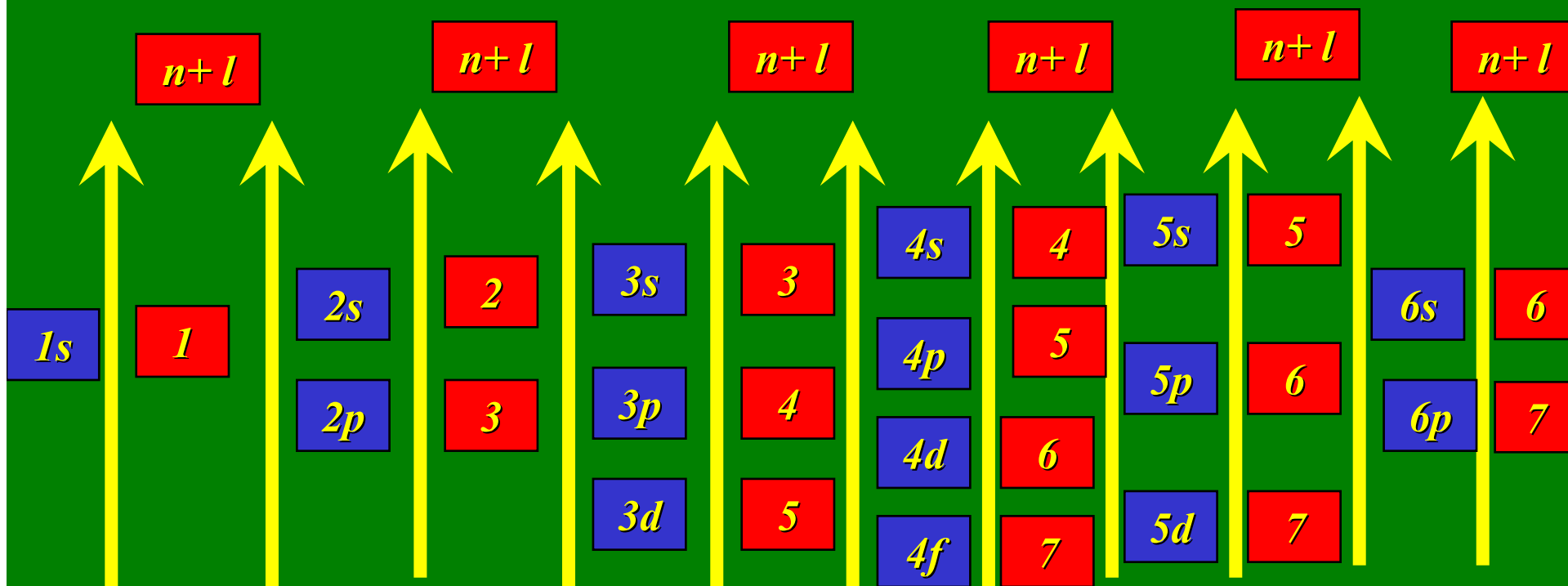
Според правилото на Клечковски, редът на заемане на нивата от електроните се определя от стойностите на сумата $n + l$.

Ако за няколко орбитали тази сума е еднаква, най-напред се запълват орбиталите с по-малка стойност на n .



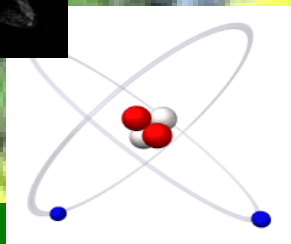
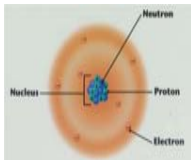


Правило на Клечковски



По нарастване на енергията електроните се подреждат в нивата както следва: $1s < 2s < 2p < 3s < 3p < 4s < 3d < 4p < 5s < 4d < 5p < 6s < 5d < 4f < 6p < 7s \dots$

След 7 s атомните орбитали имат почти еднаква енергия

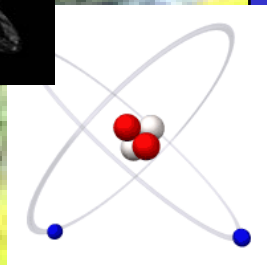
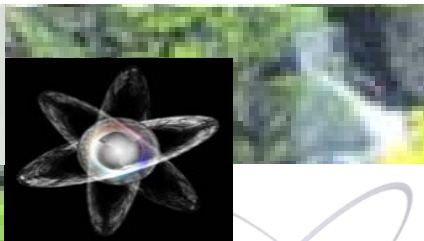
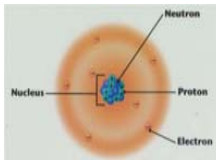


Общи правила за разпределение на електроните

Като се приеме, че в основно състояние на атома, електроните заемат най-нискоенергетичните нива, съществуват следните правила за разпределение на електроните по атомните орбитали:

- 1. Електроните заемат нивата с по-ниска енергия, защото те са по-стабилни;**
- 2. Принцип на Паули- в една атомна система не може да има два електрона в едно и също състояние, на което 4-те квантови числа да са еднакви. Максималният брой електрони в квантов подслой е $2(2l + 1)$, а в квантов слой $2n^2$**

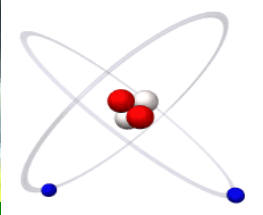
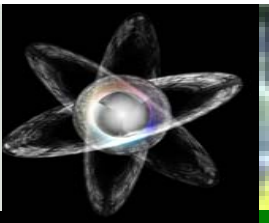
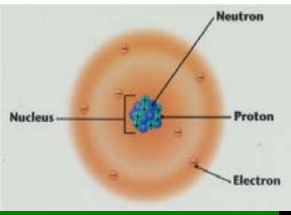
Общи правила за разпределение на електроните - продължение



3. Правило на Хунд- сумата от спиновите квантови числа на електроните, заемащи даден подслой, трябва да е максимална;

4. Правило на Клечковски- редът на заемане на нивата от електроните се определя от стойностите на сумата $n + l$. Ако за няколко орбитали тази сума е еднаква, най-напред се запълват орбиталите с по-малка стойност на n .

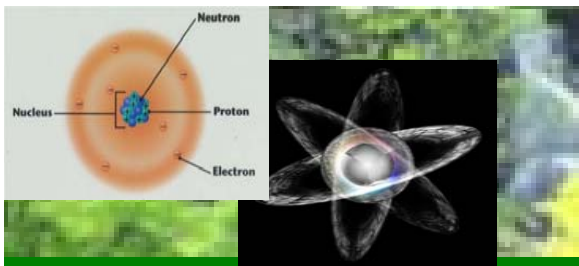
Йонизационна енергия



Необходимата енергия за отстраняване на даден електрон на безкрайно голямо разстояние от ядрото, така че атомът да се превърне в положително натоварена частица, се нарича йонизационна енергия (I).

За отделяне на втори електрон от вече йонизиран атом, йонизационната енергия е много по-висока, а на трети- още по-вече.

С отдалечаване от ядрото, йонизационната енергия намалява, за това в Периодичната система йонизационната енергия намалява отгоре надолу по групи, поради отдалечаване на електрона от ядрото



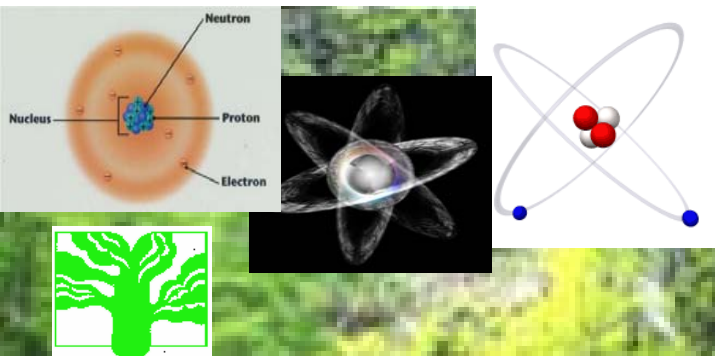
Електронно сродство



Електронното сродство е мярка за стремежа на атомите да приемат електрони и да се превръщат в отрицателно натоварени йони и се изразява числено с йонизационната енергия на отрицателен едновалентен йон, но с противоположен знак:



В зависимост от броя на присъединяваните електрони различаваме първично, вторично, третично и т. н. електронно сродство. Обикновено първичното електронно сродство е положително число, но вторичното може да е и отрицателно.



Електронно сродство- продължение

Електронното сродство също намалява при увеличаване на поредния номер в периодичната система отгоре надолу, тъй като най-нискоенергетичната електронна орбитала остава все по-отдалечена от ядрото.

Тази тенденция се наблюдава най-ясно при алкалните и алкалоземните метали



Електроотрицателност

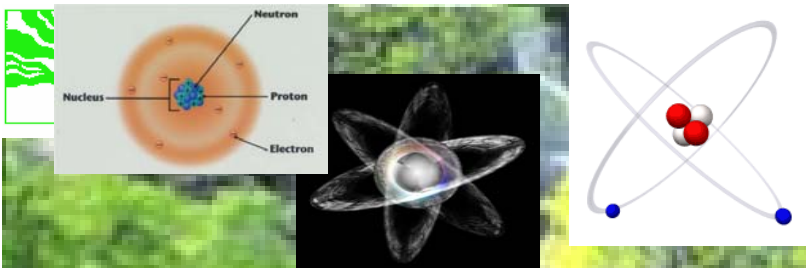
Електроотрицателността (λ) на елементите е мярка за стремежа на атома в молекулата да привлича електрони. Това е свойство на атома, намиращ се в обкръжение на други атоми. Тя зависи от степента му на окисление в молекулата и от обкръжението му в конкретното съединение и е равна на половината от сумата на йонизационната енергия и електронното сродство :

$$\lambda = (I + A) / 2$$

Електроотрицателността намалява отгоре на долу и отдясно наляво в периодичната система.

Колкото повече се различават по електроотрицателност отделните елементи, толкова по-силно взаимодействат помежду си.

Периодичен закон

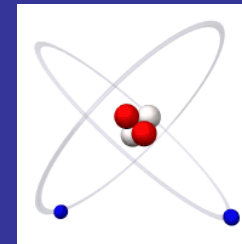


Периодичният закон е отражение на фундаменталния факт за периодичното изменение на свойствата на елементите, разположени в естествен ред по нарастване на числената стойност на атомната маса или поредния номер.

Той гласи, че **свойствата на простите вещества и съединенията на елементите са в периодична зависимост от заряда на ядрото на атомите на елементите.**

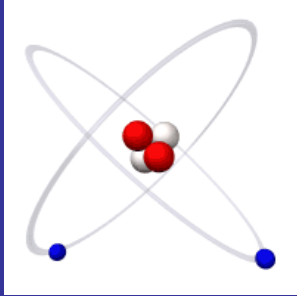


Периодична система



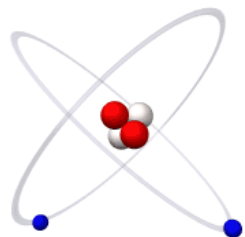
В периодичната система елементите са подредени в периоди и групи, а в разгънатата форма са обособени и секции от s-, p-, d- и f- елементи, които съдържат във всеки ред съответно 2, 6, 10 и 14 елемента, съответстващо на структурата на електронните обвивки на елементите.

В зависимост от броя на електроните във външния квантов слой на атома в основно състояние, елементите в Периодичната система на Менделеев са разделени на 8 групи. Принадлежността на s- и p- елементите към дадена група се определя от общия брой на електроните в слоя.



Електронна конфигурация

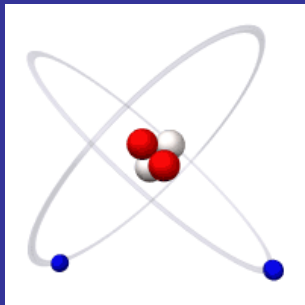
Например ${}_{15}\text{P}$ с електронна конфигурация
в последния квантов слой $3s^2 3p^3$ е вторият
представител на пета група



ЛЕСОТЕХНИЧЕСКИ УНИВЕРСИТЕТ

**4 ХИМИЧНА ВРЪЗКА И СТРОЕЖ НА
МОЛЕКУЛИТЕ.
ЙОННА ВРЪЗКА- ХАРАКТЕРНИ
ОСОБЕНОСТИ**

Проф. Надка Игнатова
nadia_ignatova@abv.bg

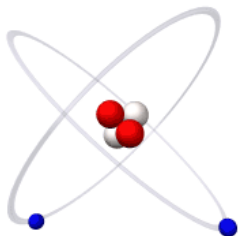


Въведение



Освен атомите, съществуват и молекули, изградени от атоми, някои от които остават стабилни, недисоциирани, дори при много високи температури. Това означава, че между атомите действат здрави сили на привличане, наричани **химични връзки**.

Основните характеристики на всяка молекула са валентните ъгли между химичните връзки, формата на молекулата, дължината на връзката и нейната енергия.

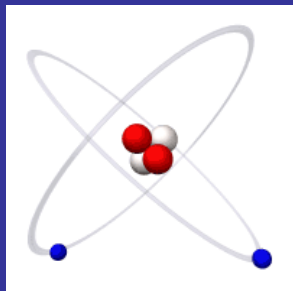


Химична връзка

Валентните ъгли са ъглите между правите линии, съединяващи атомните ядра, най-често 90, 109, 120 и 180 градуса.

Дължината на химичната връзка се определя от разстоянието между атомните ядра и зависи от здравината на връзката между тях- по-слаби връзки съответстват на по-големи дължини и обратно.

Енергията на химичната връзка зависи от типа на връзката (σ или π), от разликата в електроотрицателността на атомите в молекулата (полярност), от кратността на свързване между атомите и от степента на делокализация на връзката



Химична връзка

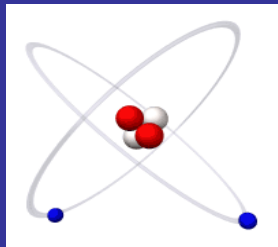


Валентният ъгъл, дължината и енергията на химичната връзка остават сравнително постоянни за двойка атоми в сходни съединения.

Съществуват две теории за строежа на молекулата:

Теория на Косел (1916) за йонната връзка;

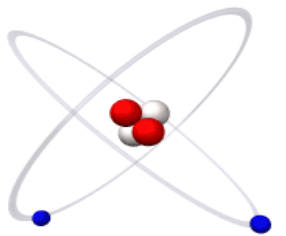
Теория на Люис за ковалентната връзка



Йонна връзка

Според **Косел**, в хода на химичните взаимодействия, електронеутралните атоми обменят по един или няколко електрона, превръщайки се в разноименно натоварени йони, които взаимодействат помежду си по законите на електростатиката.

Основната причина за електронния обмен е стремежът на атомите да придобият конфигурацията на инертен газ с 2 или 8 електрона в най-външния си електронен слой. При образуването на йонната връзка важна роля играят йонизационната енергия и електронното сродство като мярка за възможността единият атом да отдава, а другият да приема електрони



Пример



$$\Delta E = E_1 - E_2 = 5.14 - 3.61 = +1.53 \text{ eV}$$

Трябва да се внесе енергия отвън, а това не е изгодно.

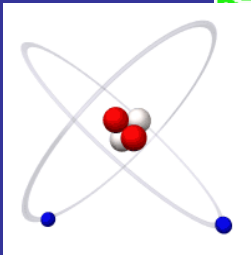


Този баланс се отнася за допускането, че двата атома са на безкрайно голямо разстояние един от друг.

Ако двата атома са разположени близо един до друг, между йоните им настъпва кулоново взаимодействие с енергия $E_3 = 5.18 \text{ eV}$

$$\Delta E = E_1 - E_2 - E_3 = 5.14 - 3.61 - 5.18 = -3.65 \text{ eV}$$

Това допълнително електростатично взаимодействие се нарича “Кулонова стабилизация” като едновременно с образуването на йони настъпва и тяхното привличане в молекула.



Посока на преминаване на електрона

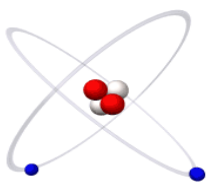
Посоката на преминаване на e^- от единия атом към другия зависи от електроотрицателността (χ) на атомите, участващи във връзката:



Или ако $\chi_A = I_A + E_A > \chi_B = I_B + E_B \rightarrow A^- B^+$

$\chi_A = I_a + E_A < \chi_B = I_B + E_B \rightarrow A^+ B^-$

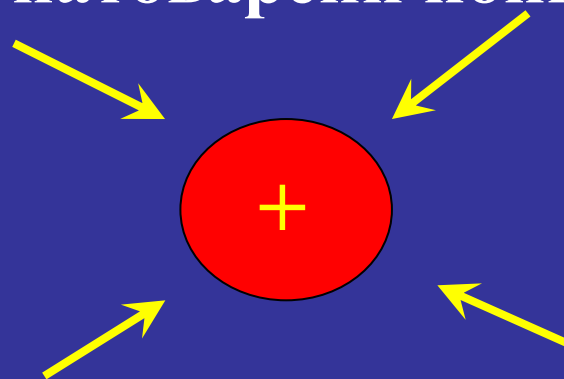
Следователно по-електроотрицателният атом изтегля електроните към себе си.



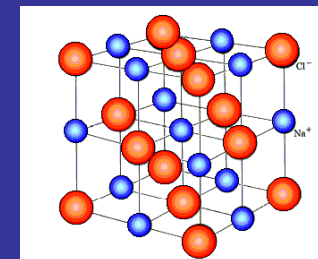
Особености на йонната връзка



1. Не е пространствено насочена, защото е формирана от йони, върху които е възможна атака от всички страни от противоположно натоварени йони



2. Няма свойството да се насища, защото около всеки йон има симетрично магнитно поле и се формира кристална решетка, в която всеки йон е обграден от разноименно натоварени йони и понятието “молекула” не съществува

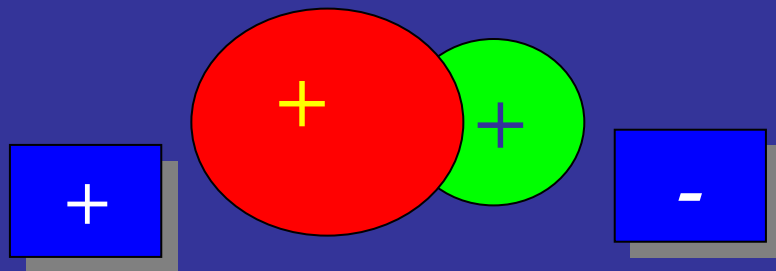




Особености на йонната връзка

Йонната връзка е възможна само при атоми със силно различаваща се електроотрицателност (χ).

На практика не се извършва пълна обмяна на електрони и чиста йонна връзка не съществува, а става припокриване на електронните обвивки на двата атома, наречено “екраниране”.



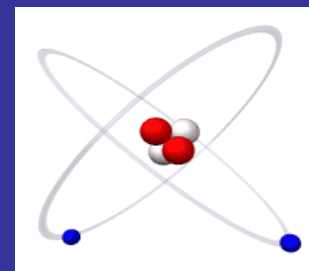
С теорията на Косел се обяснява образуването на химична връзка между силно отличаващи си по електроотрицателност атоми, каквито са металите, но тя не е приложима към молекули, образувани от еднакви атоми, като H_2 , O_2 , N_2 и др.



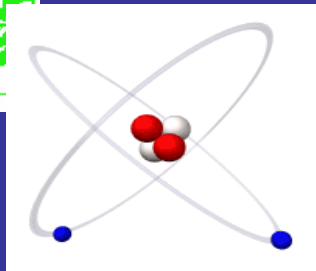
ЛЕСОТЕХНИЧЕСКИ УНИВЕРСИТЕТ

***5 КОВАЛЕНТНА ВРЪЗКА. НЕПОЛЯРНИ И
ПОЛЯРНИ КОВАЛЕНТНИ ВРЪЗКИ.
МЕХАНИЗЪМ НА ОБРАЗУВАНЕ.
ВАЛЕНТНОСТ И ВАЛЕНТНИ
ЕЛЕКТРОНИ***

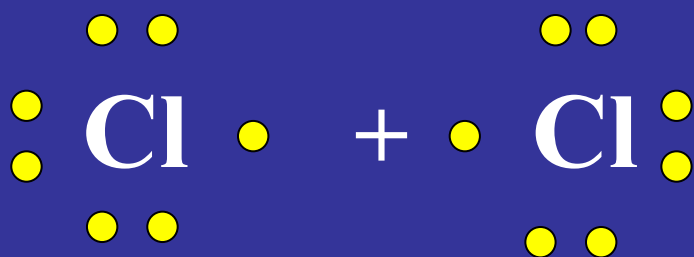
***Проф. Надка Игнатова
nadia_ignatova@abv.bg***



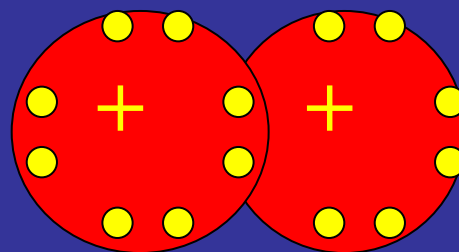
Ковалентна връзка



Съгласно структурната теория на Люис, при химичните взаимодействия между атомите се създават общи електронни двойки, обикалящи около двете ядра. Причината отново е свързана със стремежа на всеки атом към конфигурация на идеален, инертен газ



$3s^2 3p^5$



Cl_2

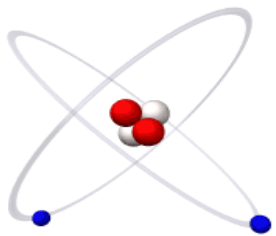
Всеки атом има по 8 e-



Неполярна и полярна връзка

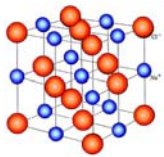
В хомоядрената двуатомна молекула (N_2 , Cl_2 , O_2) разпределението на електричните заряди в молекулата е симетрично, молекулата е хомеополярна, няма диполен момент, а химичната връзка е **неполярна**.

При разлика в електроотрицателността на атомите, електронната плътност се изтегля към по-електроотрицателния елемент и се формира полярна молекула с **полярна връзка** ($Li^{\delta-}H^{\delta+}$, $H^{\delta+}Cl^{\delta-}$, $Na^{\delta+}Cl^{\delta-}$)



Проста, двойна и тройна връзка

Колкото по-голяма е разликата в електроотрицателността на двата атома, толкова по-силно е изразен полярния характер на ковалентната връзка, формираща йонна връзка. Химичната връзка, образувана от една електронна двойка е проста. Възможно е образуването на двойна връзка, както е в молекулата на O_2 , тройна при N_2 , двойни и тройни връзки в ненаситените въглеводороди и др. В молекулите на комплексните съединения се образуват т.н. Донорно-акцепторни връзки- те са ковалентни, но се отличават по механизма си на образуване.



В многоатомните молекули не може да се реши уравнението на Шрьодингер, но може да се намери функцията ψ , описваща разпределението на електронната плътност.

Потенциалната енергия на система от два атома се изменя при промяна на разстоянието между тях, зависеща от възможността за образуване на връзка.

Приема се, че потенциалната енергия на изолирани атоми е 0. Ако тези атоми могат да образуват молекула, при приближаването им се появяват сили на привличане, водещи до намаляване на потенциалната им енергия.

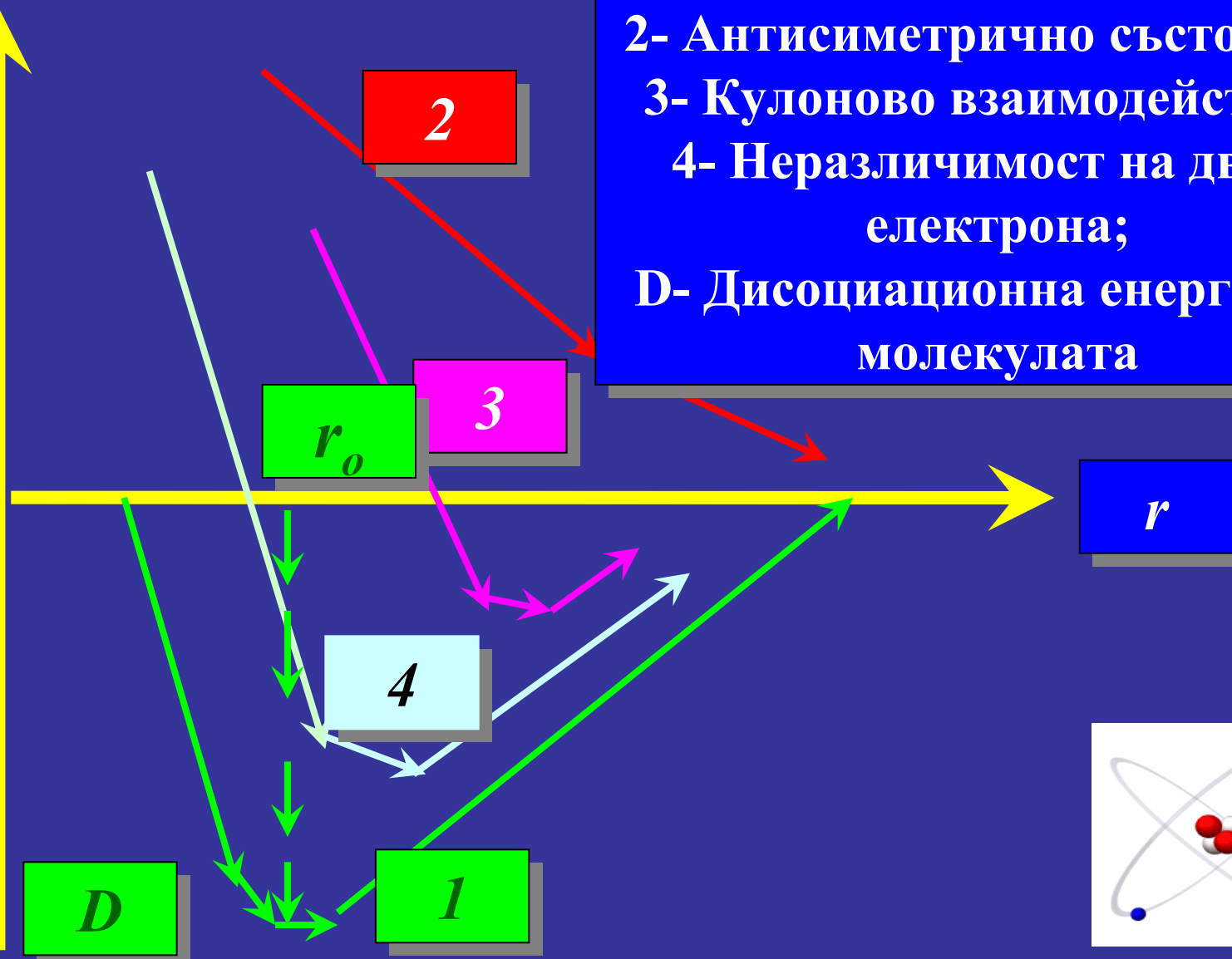
На много малки разстояния могат да възникнат дори сили на отблъскване, повишаващи енергията на системата.

При уравнивяване на тези два типа сили се постига равновесното разстояние между атомите

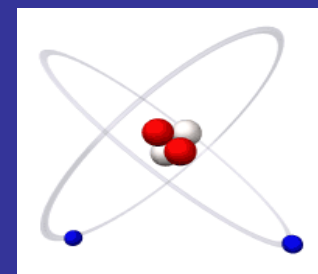
Крива на потенциалната енергия на H_2



$E,$
 eV



1- Экспериментална крива;
2- Антисиметрично състояние;
3- Кулоново взаимодействие;
4- Неразличимост на двата електрона;
D- Дисоциационна енергия на молекулата



Потенциална енергия



Следователно, кривата на потенциалната енергия на система от два атома, които могат да образуват химична връзка, има минимум, на който съответства разстояние между атомите, при което се формира двуатомната молекула.

Минимумът в кривата съответства на енергията на разкъсване на връзката в молекулата с обратен знак и се нарича дисоциационна енергия на молекулата.

Ако два атома не могат да се свържат в молекула, силите на отблъскване преобладават над силите на привличане за всяко разстояние между тях. При всяко намаляване на разстоянието между атомите, енергията на системата се увеличава и обратно – крива 2



Валентност

Валентността се определя от броят на връзките, които даден елемент е способен да образува с атомите на други химични елементи.

Тъй като всяка връзка се разглежда като обща електронна двойка, то валентността се определя от броя на електроните в електронната обвивка, които могат да участват в образуването на връзки и се наричат валентни електрони. Това са електроните от най-външния или двата последни електронни слоя, които **не са сдвоени**

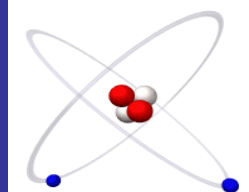
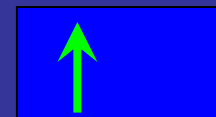
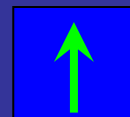
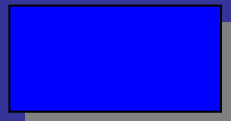
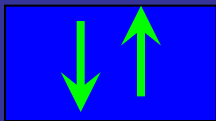
Валентност - примери

H $1s^1$ – 1-ва валентност;

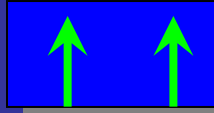
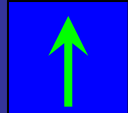
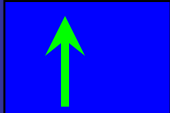
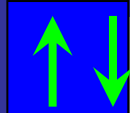
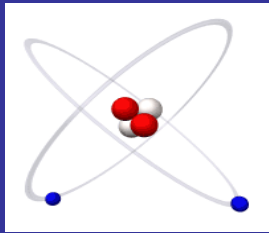
He $1s^2$ – има два сдвоени е-, които не участват във връзки и е от 0-ва валентност;

Li $1s^2 2s^1$ - 1-ва валентност;

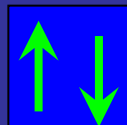
Be $1s^2 2s^2$ – може да се очаква 0-ва валентност, но при приемане на малко енергия в хода на самото взаимодействие, преминава във възбудено състояние и се проявява от 2-ра валентност



Валентност - примери



Не е възможно възбуждане, защото E на 3s е висока и N е от 3-та валентност



2-ра



1-ва



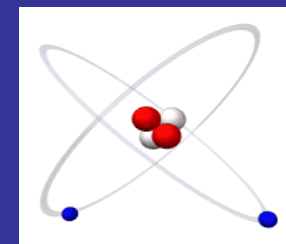
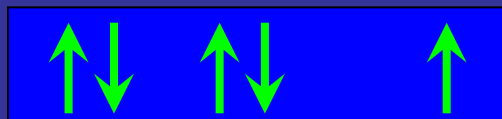
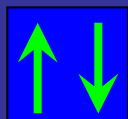
0-ва

Валентност - примери

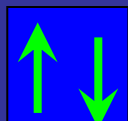
Когато се добавят и D-орбиталите, предсказването на валентността се усложнява

Cl $3s^2 3p^5$

1-ва валентност както F

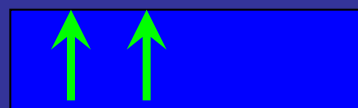
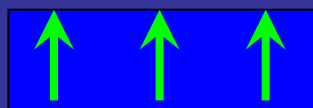
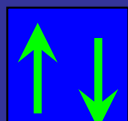


E →



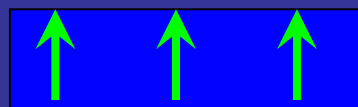
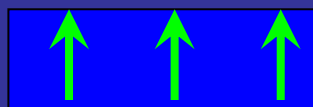
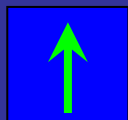
3-та

E →



5-та

E →



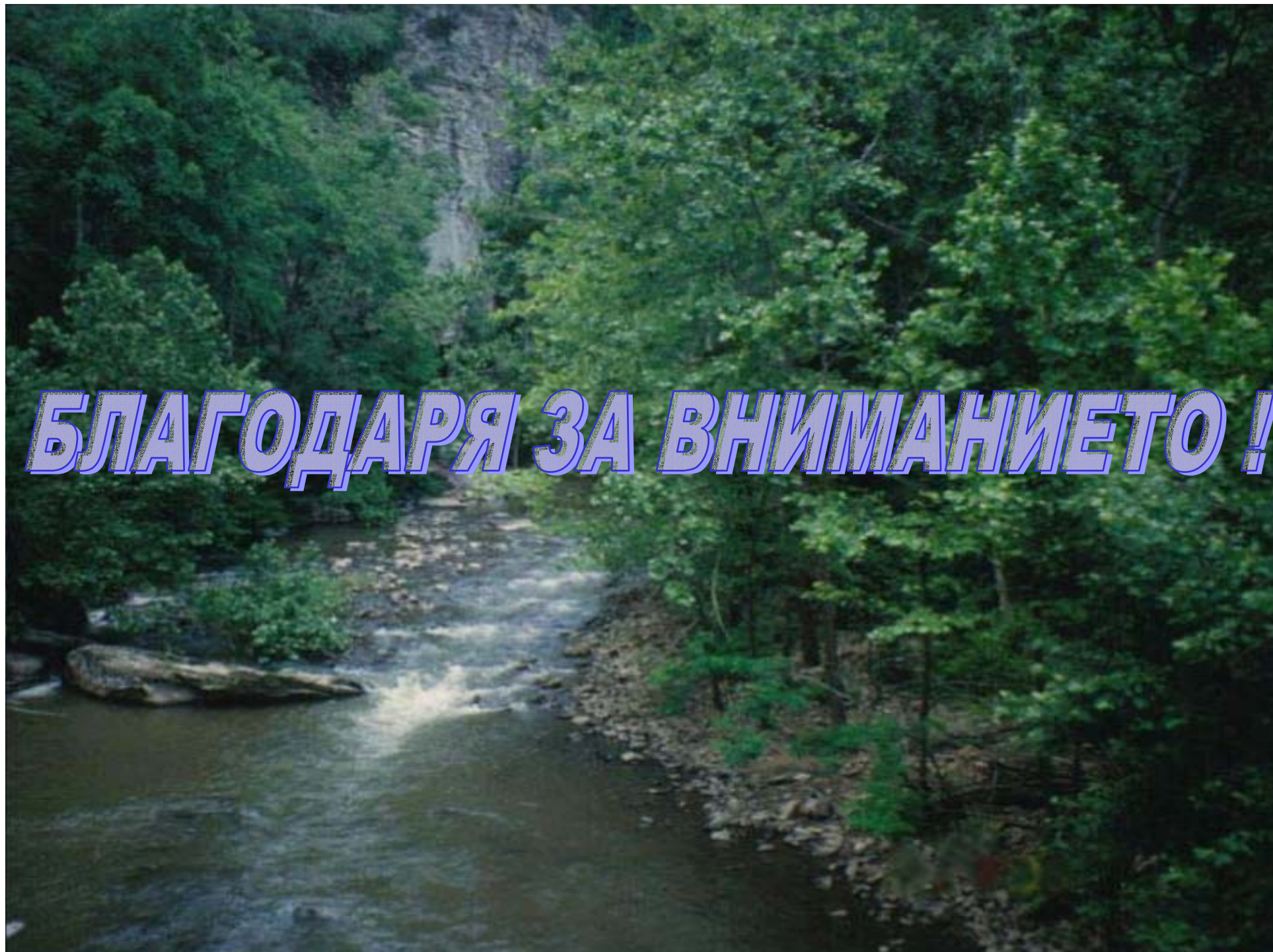
7-ма



Свойства на ковалентната връзка

1. Има насищаемост, защото се образува от обща електронна двойка, а броят им не е неограничен;

1. Има пространствена насоченост, защото се определя от насочеността на електронните облаци на атомите чрез магнитното квантово число m



БЛАГОДАРЯ ЗА ВНИМАНИЕТО !