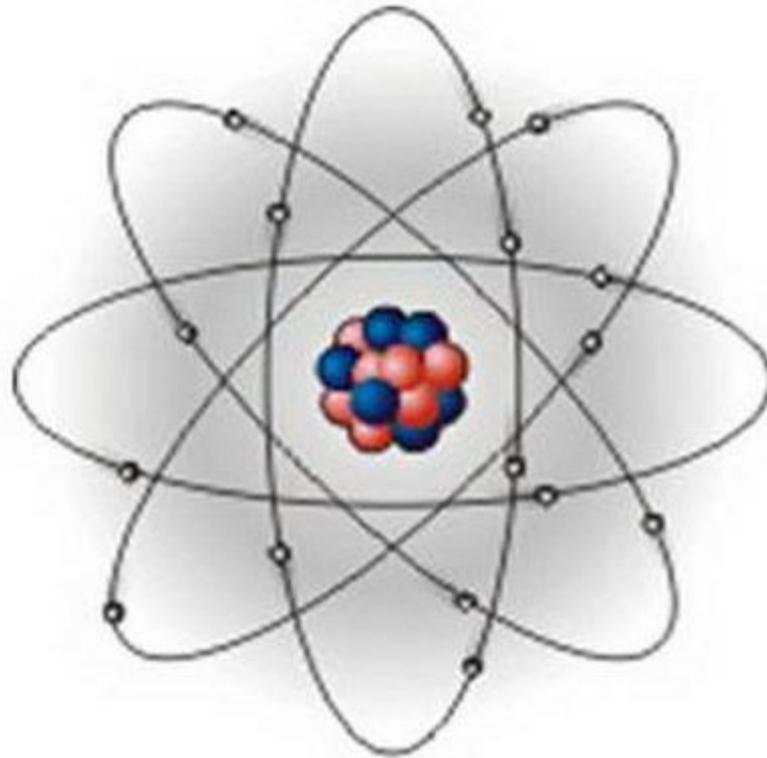


# Строение атома.

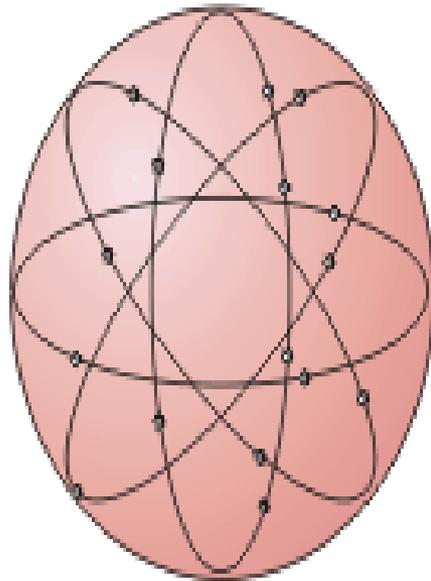
## Химическая связь.

Лекция для студентов медико - биологического  
факультета

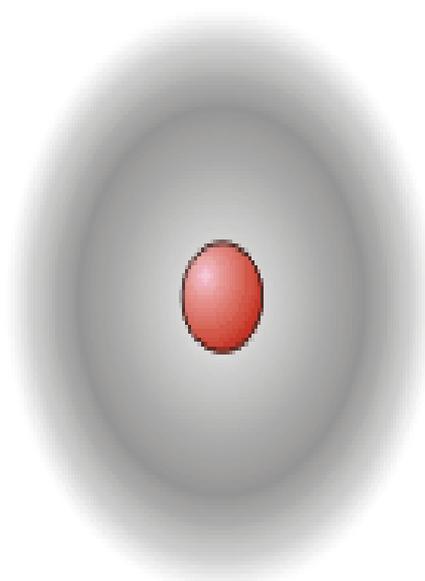
# Строение атома



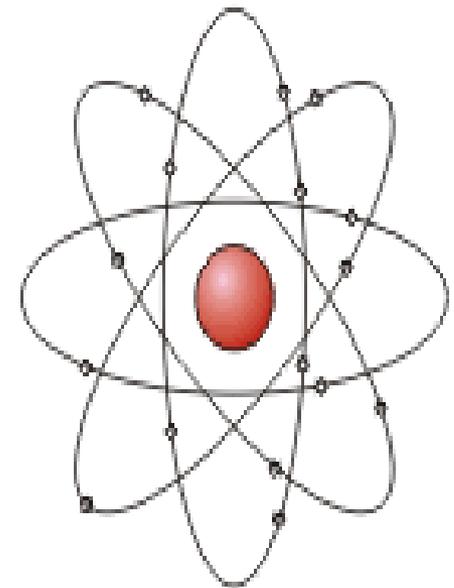
## Устаревшие модели атома



Модель Томсона



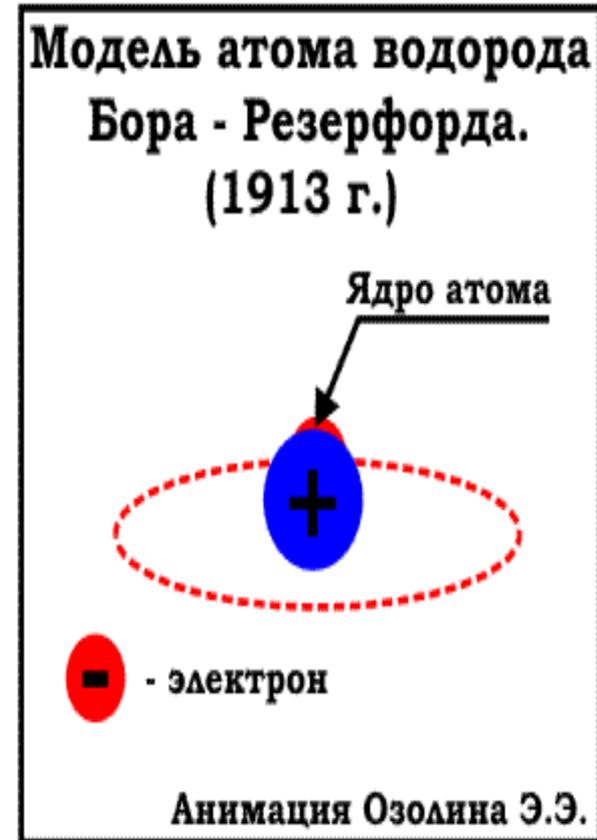
Модель Нагаоки



Модель Резерфорда

# Модель Бора

- Электрон может вращаться по определённым круговым орбитам, не излучая энергии.
- Ближайшая к ядру орбита отвечает нормальному, наиболее устойчивому состоянию атома.
- Поглощение и излучение атомом энергии происходят лишь при перескоке электрона с одной орбиты на другую.



# Дуалистическая природа электрона: частица и волна

- Уравнение Луи Де Бройля объединило свойства электрона как частицы и как волны
  - $\lambda = h/mv$



# Принцип неопределенности Гейзенберга



$$\Delta p \cdot \Delta x \geq \frac{h}{2\pi}$$

# Волновое уравнение Шредингера

$$-\frac{\hbar^2}{8\pi^2 m} \cdot \nabla^2 \Psi + (E - U) \Psi = 0$$

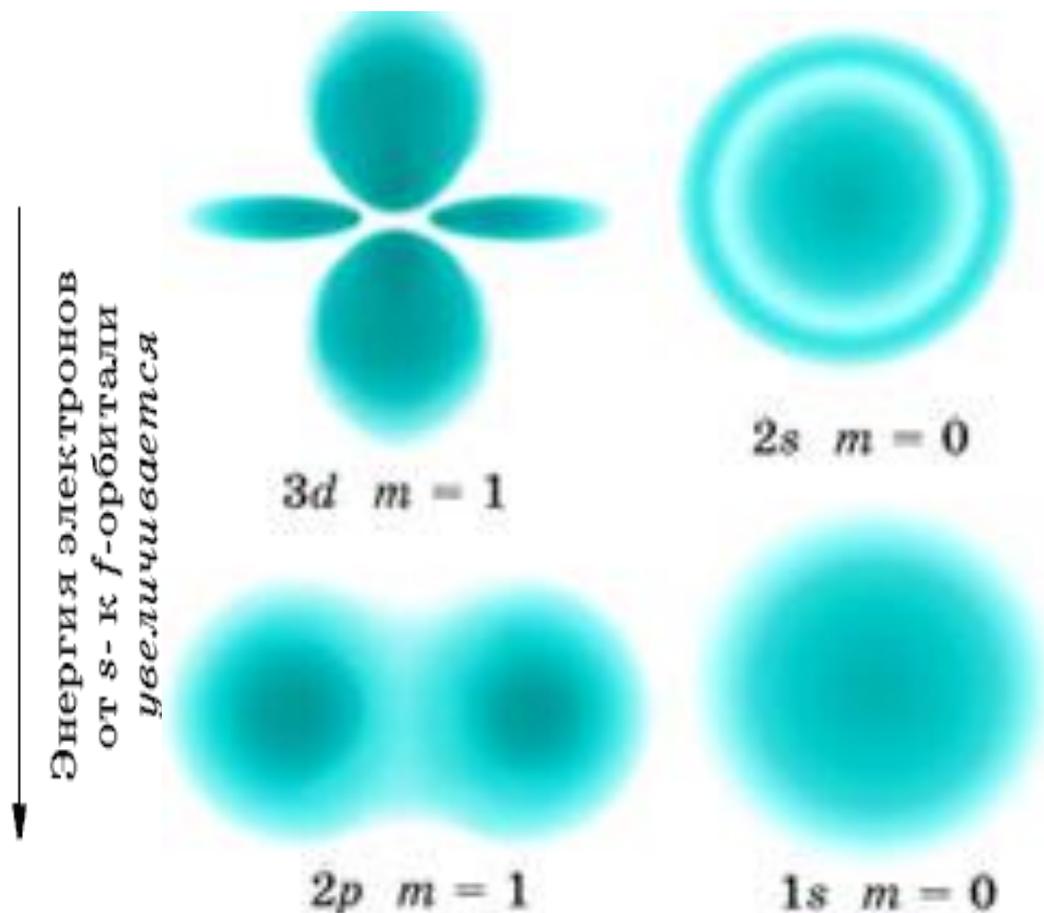
$E$  – полная энергия,  $U$  –  
потенциальная энергия  
электрона,  $\nabla^2 \Psi$  – вторая  
производная волновой функции  
по осям  $x, y, z$

$$\nabla^2 \Psi = \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2}$$

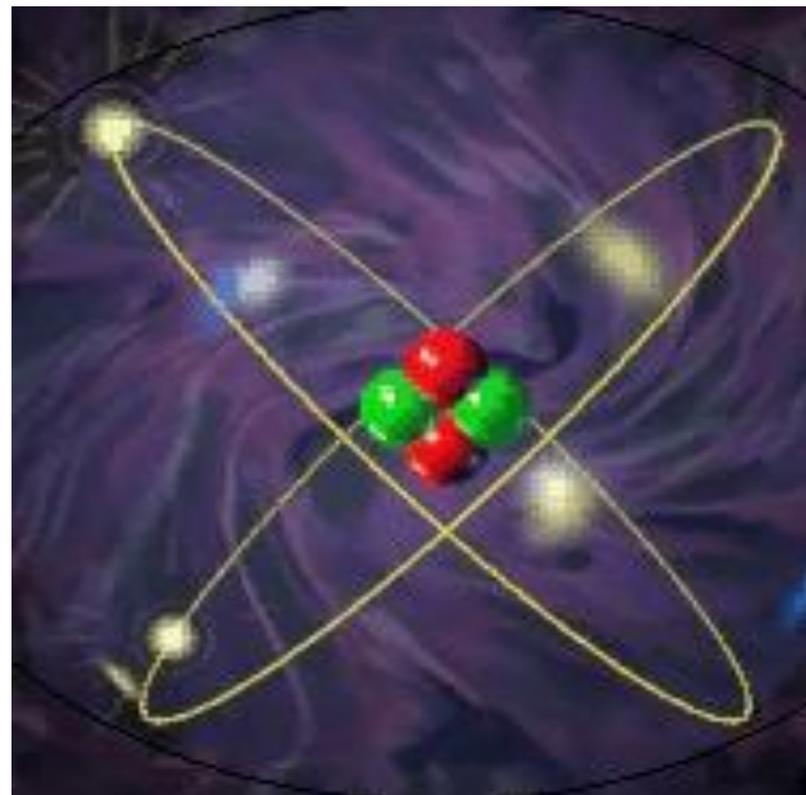
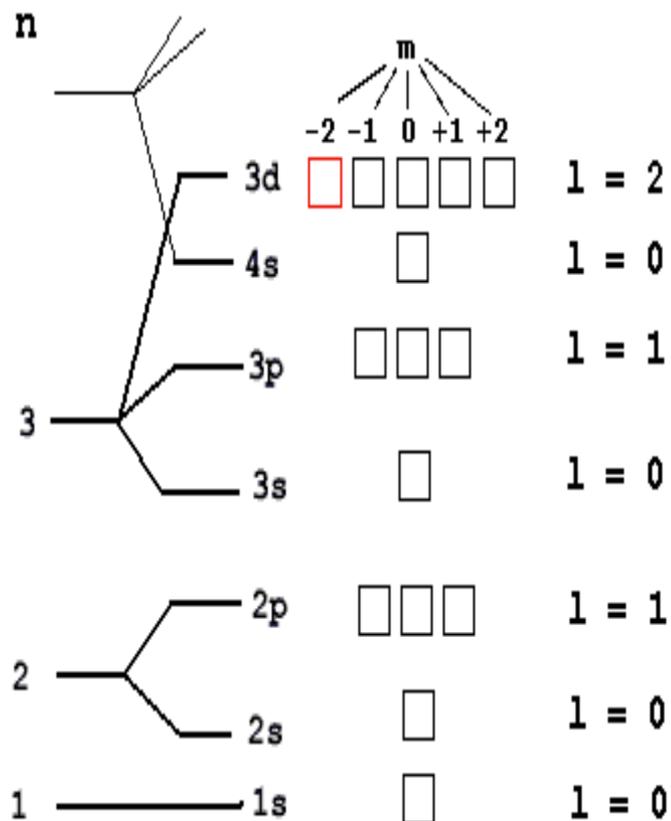


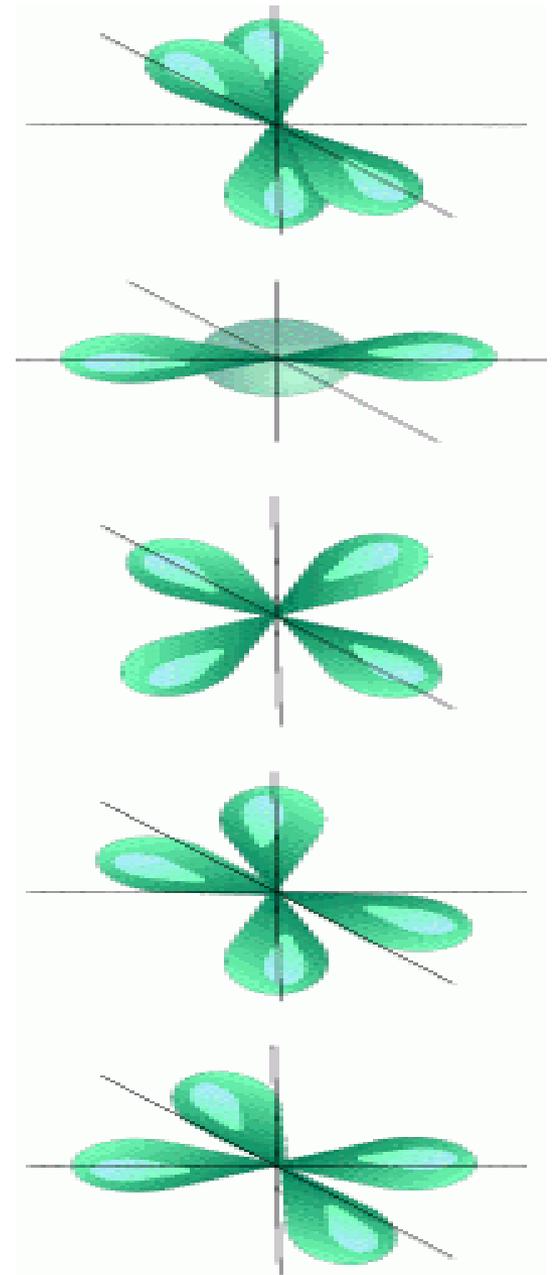
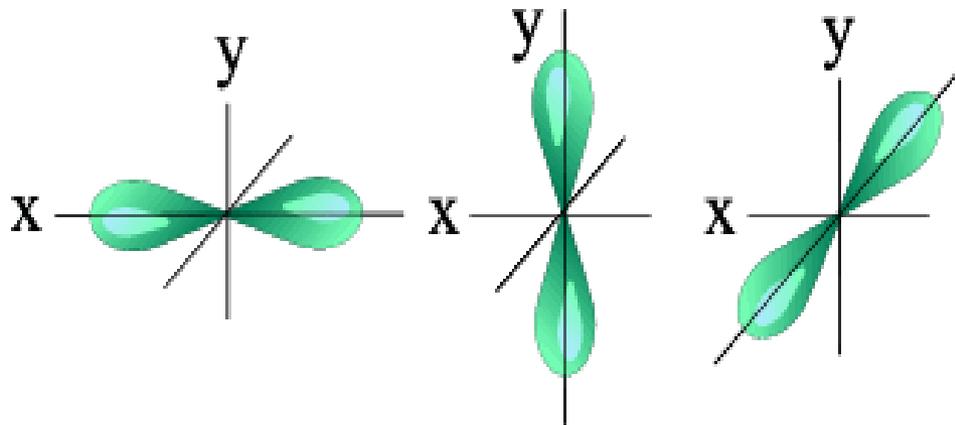
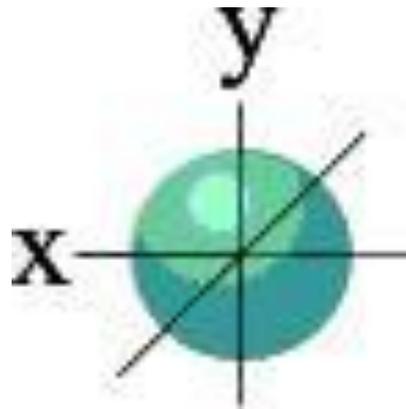
# Квантовые числа

Главное квантовое число	Побочное квантовое число	Форма электронной орбитали
$n = 1$	$l = 0$	$s$
$n = 2$	$l = 0$	$s$
	$l = 1$	$p$
$n = 3$	$l = 0$	$s$
	$l = 1$	$p$
	$l = 2$	$d$
$n = 4$	$l = 0$	$s$
	$l = 1$	$p$
	$l = 2$	$d$
	$l = 3$	$f$



# Квантовые числа





# Распределение электронов в атомах

- **Принцип минимума энергии.**

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

- **Принцип Паули.** В атоме не может быть двух электронов с одинаковым набором всех четырёх квантовых чисел.

- **Правило Гунда.** Суммарный спин максимален.

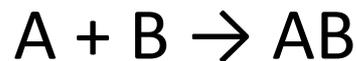
## Заполнение электронных уровней в атоме

Кликните на элемент, чтобы посмотреть его электронную конфигурацию

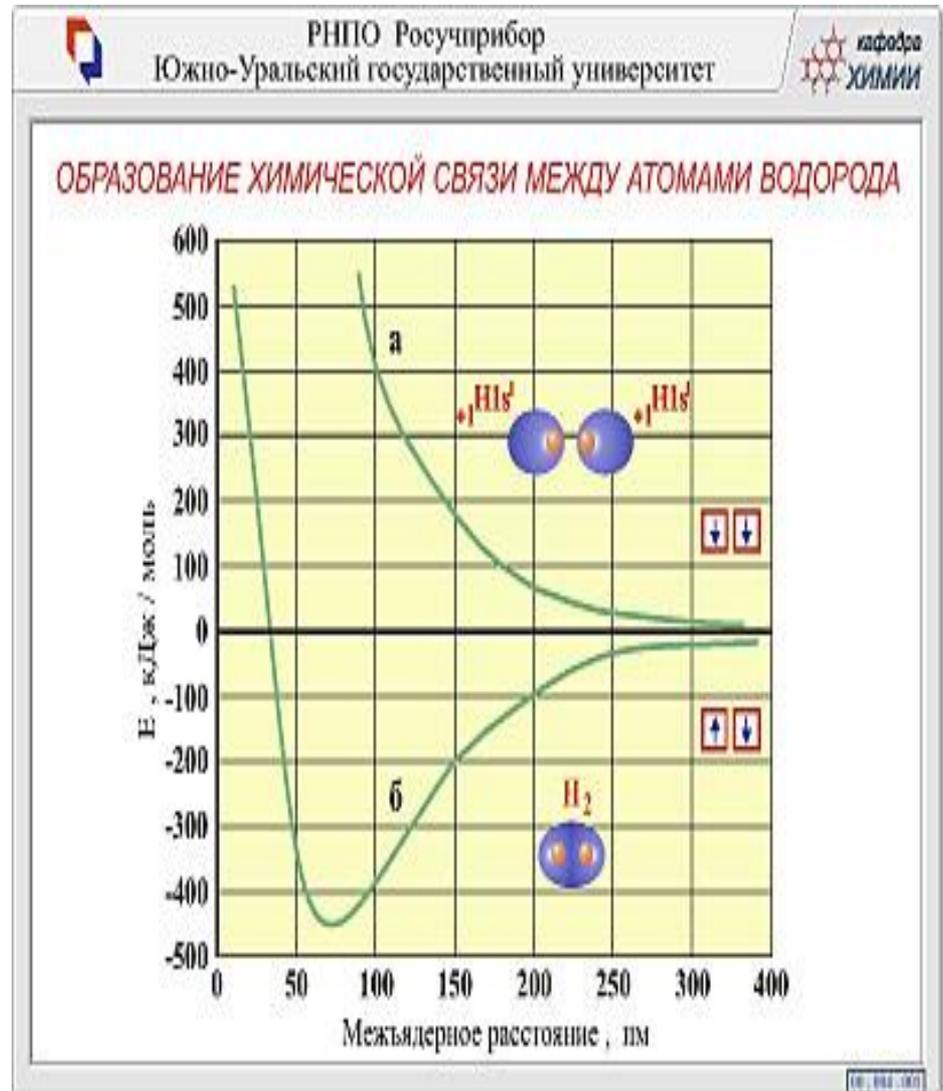
1a																	VIIa
1																	2
H	IIa											IIIa	IVa	Va	VIa	VIIa	He
3	4											5	6	7	8	9	10
Li	Be											B	C	N	O	F	Ne
11	12											13	14	15	16	17	18
Na	Mg	IIIb	IVb	Vb	VIb	VIIb	VIIIb	Ib		IIb	Al	Si	P	S	Cl	Ar	
19	20	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30	31	32	33	34	35	36
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
37	38	39	40	41	42	43	44	45	46	47	48	49	50	51	52	53	54
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
55	56	57	72	73	74	75	76	77	78	79	80	81	82	83	84	85	86
Cs	Ba	La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
87	88	89	104	105	106	107	108	109	110	111	112	113					
Fr	Ra	Ac	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Uun	Uuu	Uub	Uut					
			58	59	60	61	62	63	64	65	66	67	68	69	70	71	
			Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu	
			90	91	92	93	94	95	96	97	98	99	100	101	102	103	
			Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr	

# Химическая связь

**Химическая связь** – это взаимодействие, которое связывает отдельные атомы в молекулы, ионы, радикалы, кристаллы.



$$E_{AB} < E_A + E_B$$





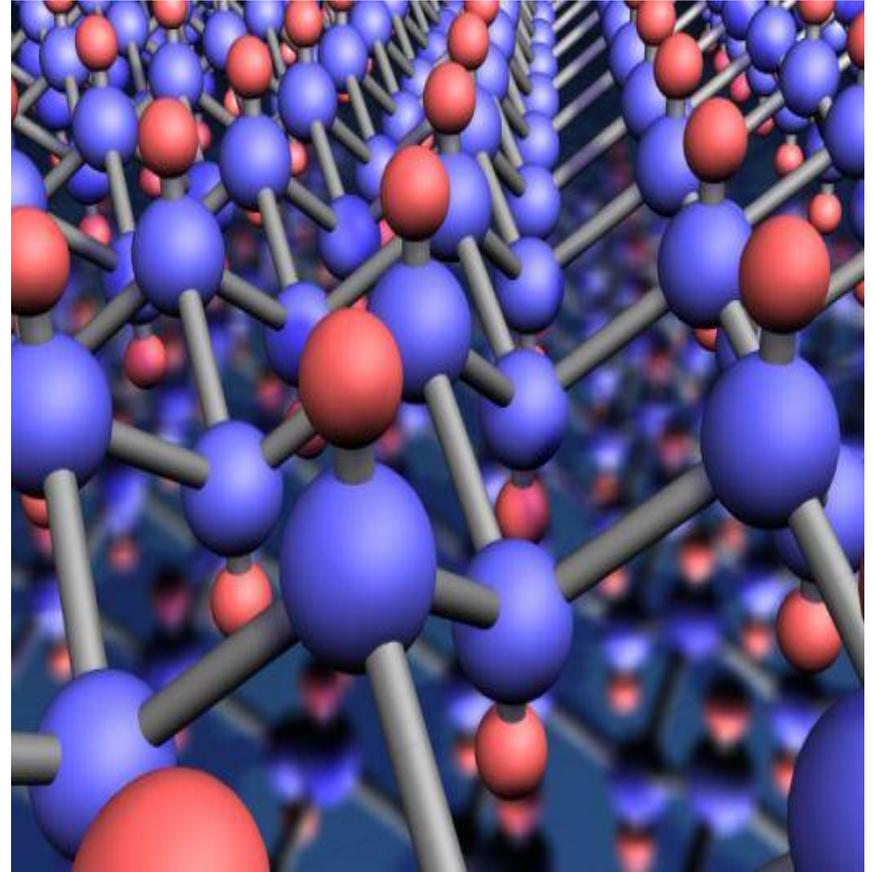
# Металлическая связь

- Соединения с металлической связью имеют два важных отличия от ионно-ковалентных соединений:
- Высокая электро- и теплопроводность,
- Металлы – кристаллические вещества (исключение – ртуть).



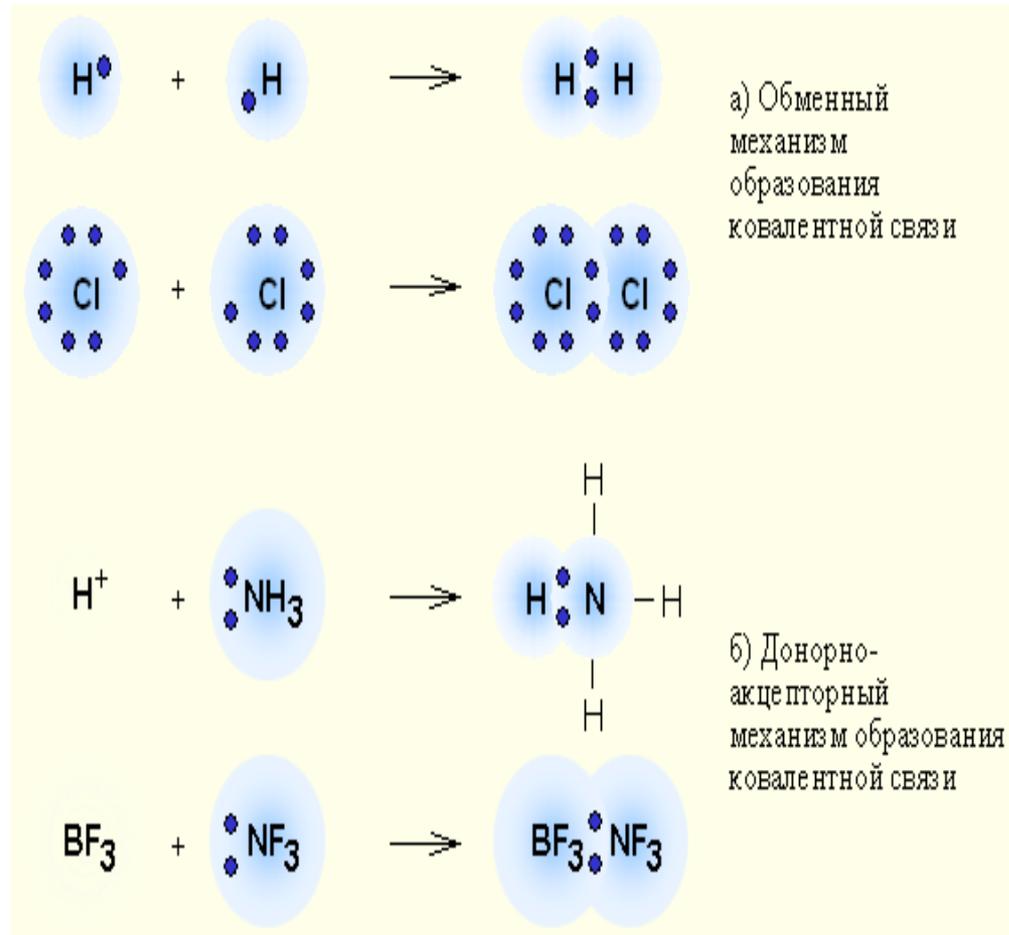
# Ионная связь

- Образуется между элементами с большим различием в электроотрицательности
- NaCl, KI, LiF
- Свойства:
- Ненаправленность
- Ненасыщаемость



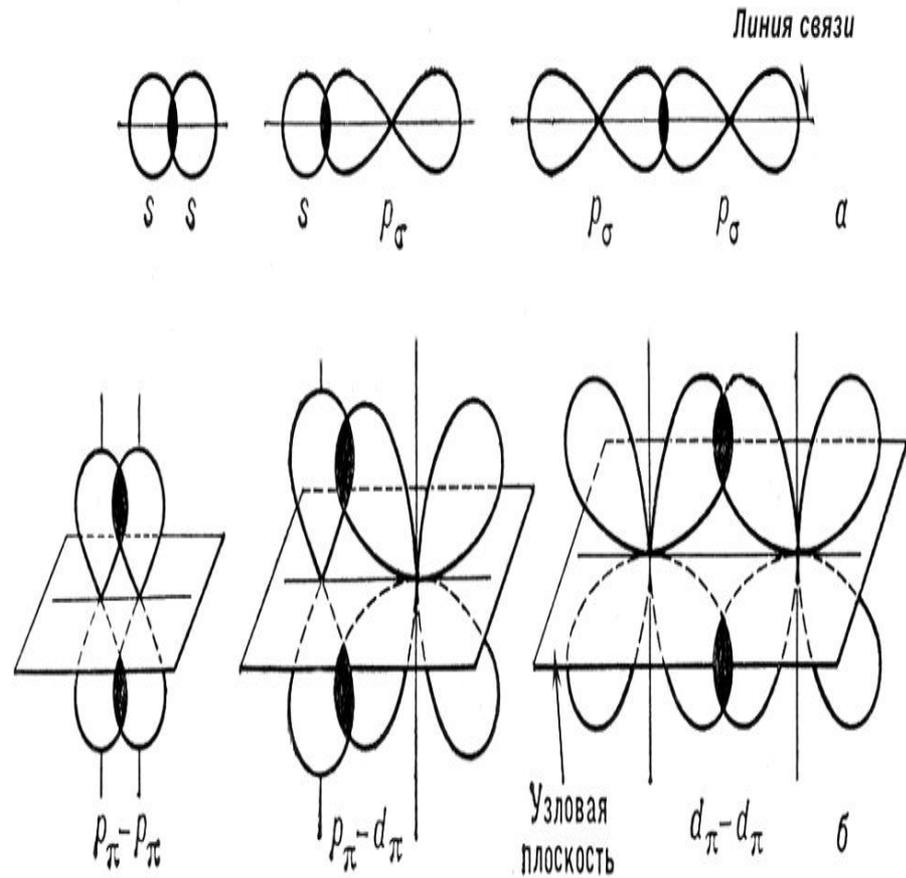
# Ковалентная связь

- Механизмы образования:
- Обменный
- Донорно - акцепторный

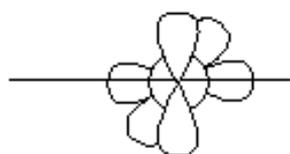


# Свойства ковалентной связи

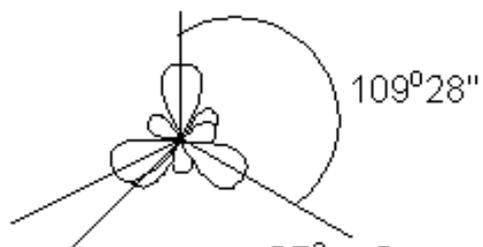
- Насыщаемость
- Направленность
- Поляризуемость



# Гибридизация атомных орбиталей

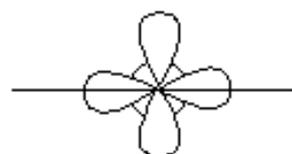


S + P + P + P

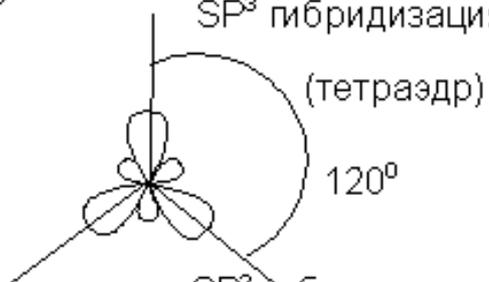


109°28'

SP<sup>3</sup> гибридизация



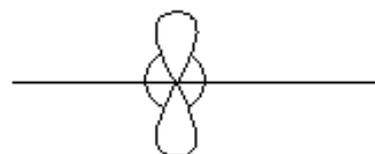
S + P + P



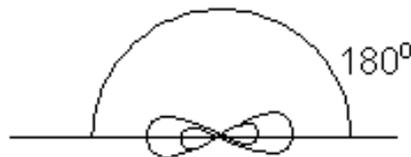
(тетраэдр)

120°

SP<sup>2</sup> гибридизация



S + P



180°

SP гибридизация

(линейное строение)

# Методы описания ковалентной связи

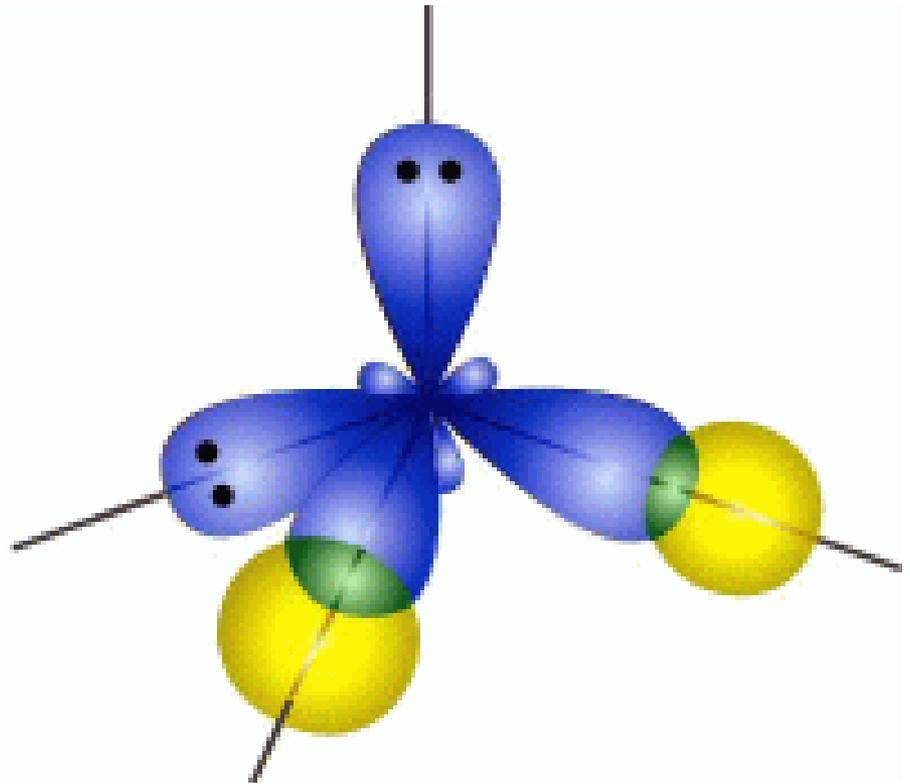
## МВС

- Основные положения МВС:
- Связь возникает между двумя атомами

$A\downarrow + B\uparrow \rightarrow A\downarrow\uparrow B$  или

$A\uparrow\downarrow + B \rightarrow A\downarrow\uparrow B.$

- Связь возникает в том направлении, в котором перекрывание электронных облаков максимально.
- Из двух орбиталей атома наиболее прочную связь образует та орбиталь, которая сильнее перекрывается орбиталью другого атома.



# Методы описания ковалентной связи

## ММО

При перекрывании двух атомных орбиталей образуются две молекулярные: одна – орбитала сложения (связывающая) и разрыхляющая орбиталь.

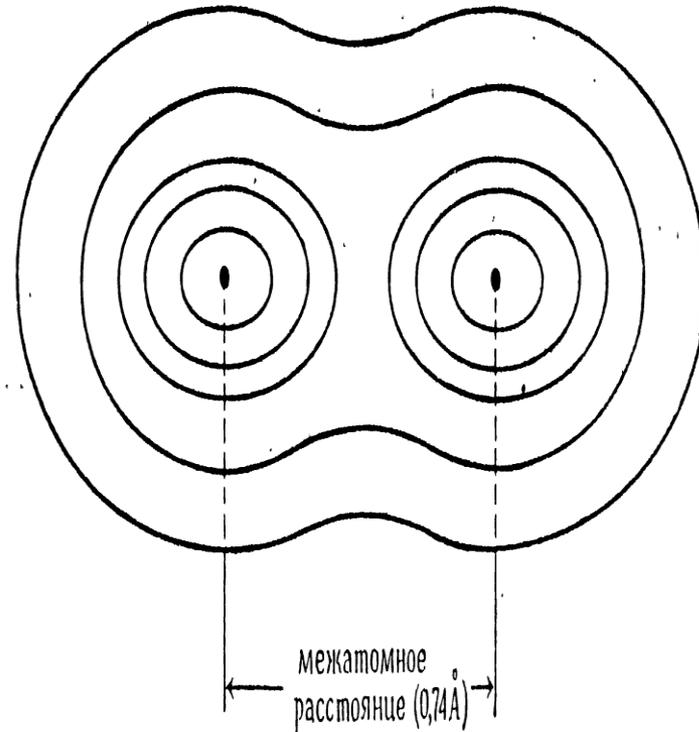
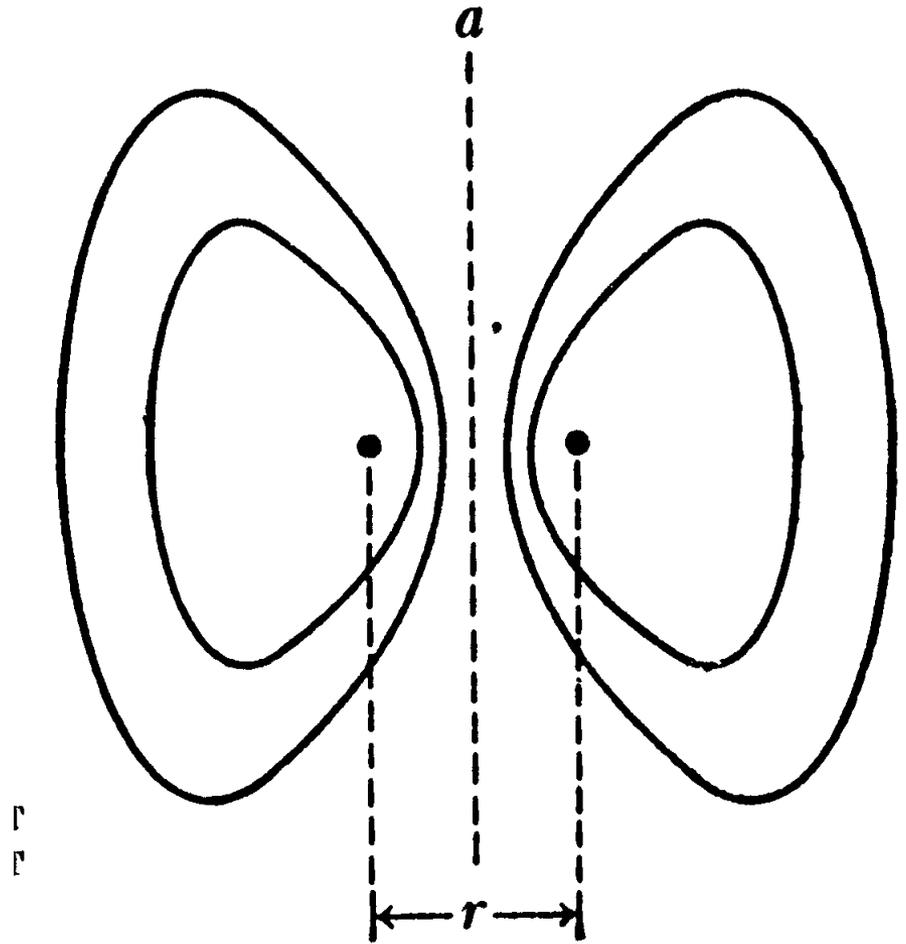


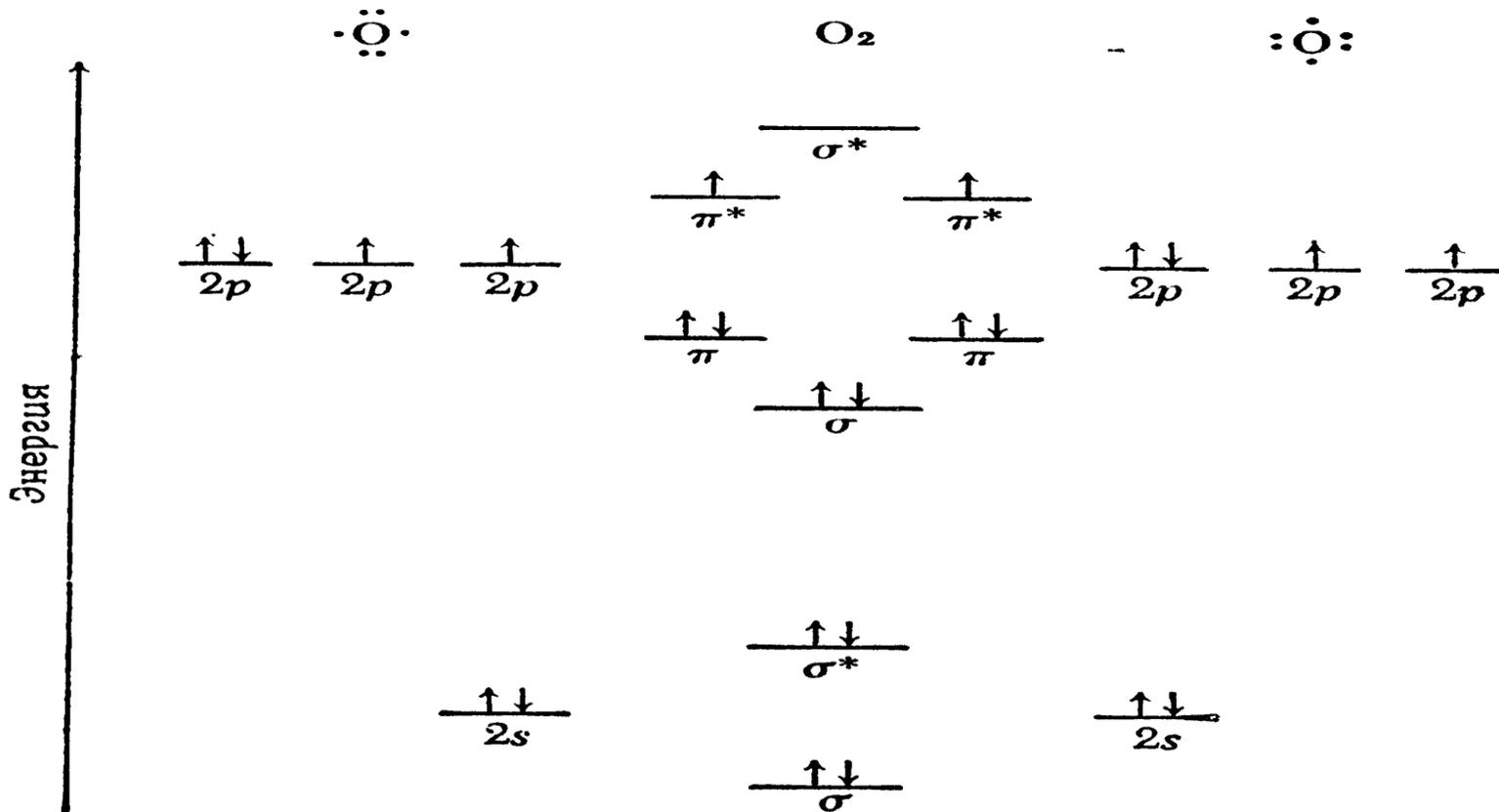
Рис. 2-8, Контурная карта электронной плотности связывающей молекулярной орбитали в  $H_2$ .

# Методы описания ковалентной связи

- Связывающая МО – энергетически более выгодна, чем соответствующие АО, максимальная электронная плотность в ней сосредоточена между центрами атомов.
- Разрыхляющая МО – энергетически менее выгодна, чем соответствующие АО, максимальная электронная плотность сосредоточена за центрами атомов.



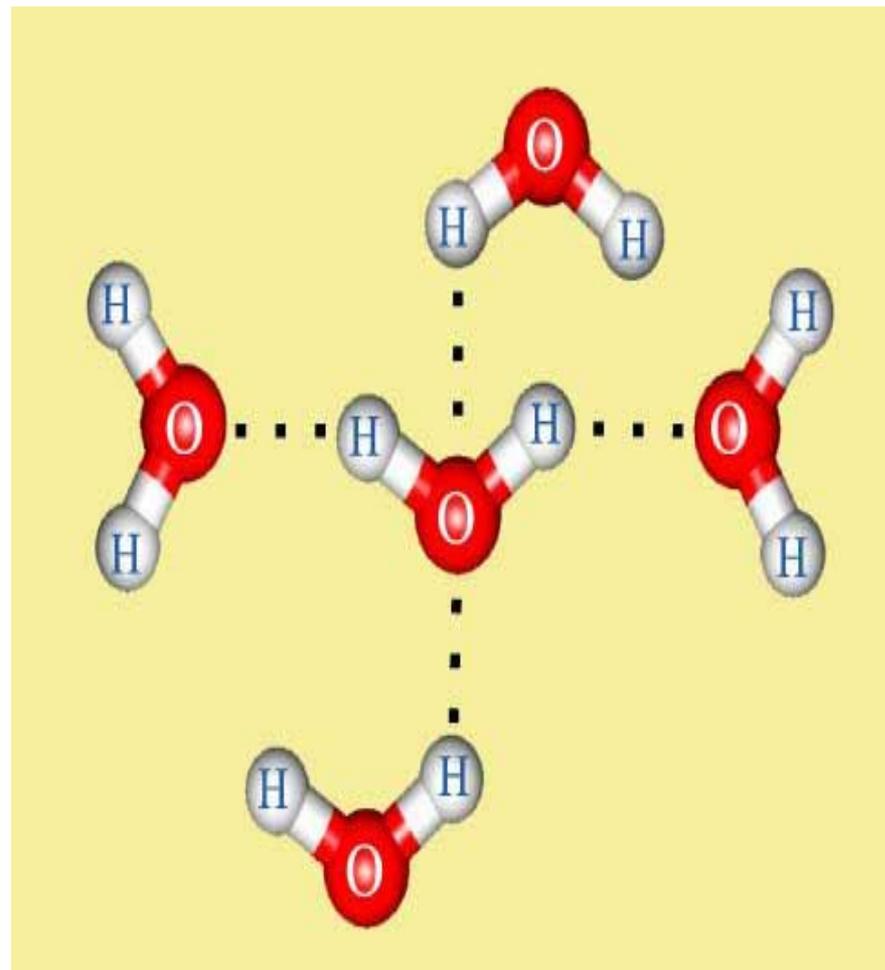
Для описания МО используют энергетические диаграммы.



# Водородная связь

- **Водородная связь** – это разновидность ковалентной связи, образованной по донорно-акцепторному механизму.

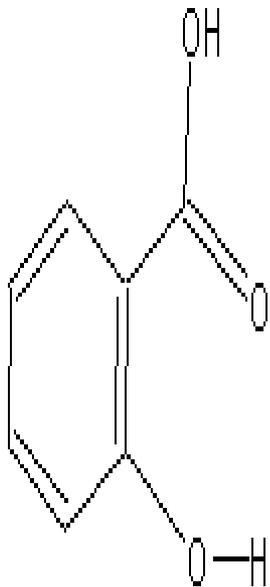
- |         |         |            |
|---------|---------|------------|
| H ... F | H ... O | H ... N    |
| 40      | 20      | 8 кДж/моль |



# Водородная связь

Внутримолекулярная

Межмолекулярная



салициловая кислота

