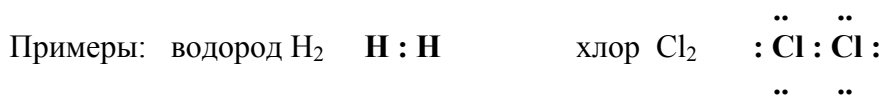


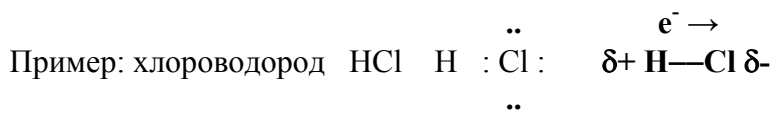
3. Химическая связь – свойство электронного окружения атомных ядер

В 1916 году американский физико-химик Гилберт Льюис (Gilbert Newton Lewis; 1875 - 1946) предположил, что в основе химической связи лежит образование электронных пар. Это предположение противоречило известному кулоновскому отталкиванию одинаково заряженных электронов, но позже было объяснено наличием у электронов фундаментальной характеристики – спина.

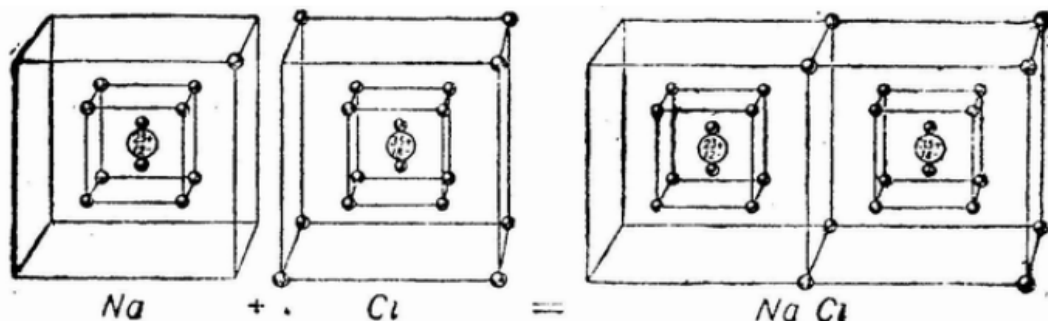
Модели Льюиса и сейчас используются при объяснении свойств химической связи. В двухатомных молекулах, образованных атомами одного элемента, между атомами существует **ковалентная неполярная связь**.



Между атомами разных **неметаллов** образуется, как правило, **ковалентная полярная связь**. Электронная пара связи смещена к одному из атомов.



Ионная связь основана на электростатическом притяжении ионов. **Ионную связь** образуют типичные металлы с типичными неметаллами. Электроны переходят от металла к неметаллу. При этом образующийся отрицательный ион (анион) стремится получить окружение из целого числа электронных пар или четного числа электронов. Во многих случаях действует «правило 8 электронов»: образующийся анион стремится дополнить свой внешний электронный уровень до 8 электронов. «Правило 8 электронов» отражено в ранней модели Льюиса – «кубических атомах» (1902 г.).



Кубические модели Льюиса для реакции натрия с хлором $2 \text{Na} + \text{Cl}_2 = 2 \text{NaCl}$ (Гильберт Льюис, 1902 г., Рабочая книга по технической химии, 1932 г.)

Примеры ионной связи (специально обозначены заряды ионов):
Хлорид натрия $\text{Na}^+ \text{Cl}^-$, бромид бария $\text{Ba}^{2+} \text{Br}_2^-$, сульфид калия $\text{K}^+ {}_2\text{S}^{2-}$,
оксид магния $\text{Mg}^{2+} \text{O}^{2-}$.

Формулу ионного соединения можно предсказать на основе «правила 8 электронов» и положения элементов в Периодической системе. Число электронов на внешнем уровне элементов первых трех периодов соответствует номеру группы, в которой находится элемент. Для других периодов такое соответствие тоже наблюдается, но не у всех элементов.

В хлориде натрия содержатся натрий – элемент 1-й группы и хлор – элемент 7-й группы. У натрия на внешнем уровне единственный электрон, у хлора – 7 электронов. Хлору легко дополнить внешний уровень до 8 электронов за счет внешнего электрона натрия, поэтому эти элементы образуют соединение в соотношении 1 : 1.

В бромиде бария содержится барий – элемент 2-й группы и бром – элемент 7-й группы. У бария на внешнем уровне два электрона, у брома – 7 электронов. Бром легко дополнить внешний уровень до 8 электронов за счет внешних электронов бария, поэтому в соединении на один ион бария ($2+$) приходится два иона брома ($-$).

В сульфиде калия содержится калий – элемент 1-й группы и сера – элемент 6-й группы. Сера дополняет свой внешний уровень до 8 электронов за счет внешних электронов калия, поэтому в соединении на один ион серы ($2-$) приходится два иона калия ($+$).

Оксид магния состоит из элемента 2-й группы магния и элемента 6-й группы кислорода. Магний отдает два своих внешних электрона, а кислород принимает 2 электрона, дополняя свой внешний уровень до 8 электронов. Элементы в результате образуют соединение в соотношении 1 : 1.

Большинство элементов Периодической системы относится к металлам (см. Приложение 1). Главная особенность металлов – относительно слабая связь внешних электронов с атомом. Эти внешние электроны становятся общими для нескольких рядом расположенных атомов металла. Поэтому металлы можно условно представить как облако электронов, внутри которого находится кристаллическая решетка из атомов. Связь между многими атомами, осуществляемая общими свободными электронами, называется **металлической связью**.

Именно общими свободными электронами в кристаллической решетке объясняются такие свойства металлов, как высокая электро- и теплопроводность, блеск, ковкость и пластичность.

Дополнение к разделу 3. **Квантовая механика.**

В 30-е годы XX века была создана **квантовая механика** – совокупность расчетных методов, позволяющих теоретически предсказывать строение молекул. В настоящее время квантовомеханические расчеты возможны почти на любом из компьютеров и стали неотъемлемым методом современных химических исследований.

Рассмотрим основные положения квантовой модели вещества. Электронную структуру атомов и строение молекул находят при решении сложного уравнения Шредингера. Основными коэффициентами решения, впервые выполненного для атома водорода, являются **квантовые числа**. Квантовые числа описывают математические функции, которые называют **орбиталями**.

Следует помнить, что **орбитали не являются физическими объектами**. В то же время традиционно про электрон, поведение которого описывается какой-либо функцией-орбиталью, говорят, что он занимает эту орбиталь или находится на данной орбитали. Разумеется, материальный объект – электрон не может находиться «на» математической функции; функция только описывает алгоритм вычисления электронной плотности в данной точке пространства.

Главное квантовое число n

определяет энергию электронов на данном уровне.

Допустимые значения: $n = 1, 2, 3, 4, 5, \dots$

Буквенные обозначения K L M N O ...

Электроны в атоме располагаются послойно, последовательно удаляющимися от ядра слоями. На каждом таком слое, называемом главным энергетическим уровнем, может быть для данного значения n до $2n^2$ электронов. В Периодической таблице номера периодов соответствуют номеру внешнего главного энергетического уровня. Для первых трех периодов короткопериодного варианта таблицы количество электронов на внешнем уровне соответствует номеру группы.

Орбитальное квантовое число l

определяет значение орбитального момента количества движения электрона на данном уровне.

Допустимые значения для данного l : 0, 1, 2, 3, ..., $n-1$

Буквенные обозначения s p d f ...

Орбитальное магнитное квантовое число m_l

определяет значение составляющей проекции момента количества движения электрона в магнитном поле на выделенное направление в пространстве.

Допустимые значения m_l для данного l : $-l, \dots, -2, -1, 0, +1, +2, \dots, +l$

Спиновое квантовое число m_s

принимает для электрона только два значения: $+1/2$ и $-1/2$

Электроны с противоположным значением спина притягиваются, преодолевая электростатическое отталкивание, и образуют электронные пары. Спин является невыводимым фундаментальным свойством элементарных частиц вещества. К таким невыводимым свойствам материи относятся гравитация и электричество.

Кроме взаимосвязи квантовых чисел, при построении квантовой системы необходимо соблюдать **принцип Паули** (Вольфганг Паули, 1924): в одном атоме не может быть двух электронов с совпадающими значениями всех четырех квантовых чисел.

Попробуем "создать" электронные оболочки атомов на основе квантовых чисел и принципа Паули.

Минимальное значение главного квантового числа n равно 1. Ему соответствует только одно значение орбитального числа l , равное 0 (s-орбиталь). Сферическая симметрия s-орбиталей выражается в том, что при $l = 0$ в магнитном поле существует только одна орбиталь с $m_s = 0$. На этой орбитали может находиться один электрон с любым значением спина (водород) или два электрона с противоположными значениями спинов (гелий). Таким образом, при значении $n = 1$ на данном уровне может существовать не более двух электронов.

Теперь начнем заполнять орбитали с $n = 2$ (на первом уровне уже есть два электрона). Величине $n = 2$ соответствуют два значения орбитального числа: 0 (s-орбиталь) и 1 (p-орбиталь). При $l = 0$ существует одна орбиталь, при $l = 1$ – три орбитали (со значениями m_s : -1, 0, +1). На каждой из орбиталей может находиться не более двух электронов, так что значению $n = 2$ соответствует максимум 8 электронов. Общее число электронов на уровне с данным n можно вычислить, таким образом, по формуле $2n^2$.

n	2			
l	0	1		
m_l	0	-1	0	+1
m_s	$\pm 1/2$	$\pm 1/2$	$\pm 1/2$	$\pm 1/2$

Обозначим каждую орбиталь квадратной ячейкой, электроны – противоположно направленными стрелками. Для дальнейшего "строительства" электронных оболочек атомов необходимо использовать еще одно правило, сформулированное в 1927 г. Фридрихом Хундом (Гундом): наиболее устойчивы при данном l состояния с наибольшим суммарным спином, т.е. количество заполненных орбиталей на данном подуровне должно быть максимальным (по одному электрону на орбиталь).

Начало периодической таблицы будет выглядеть следующим образом:

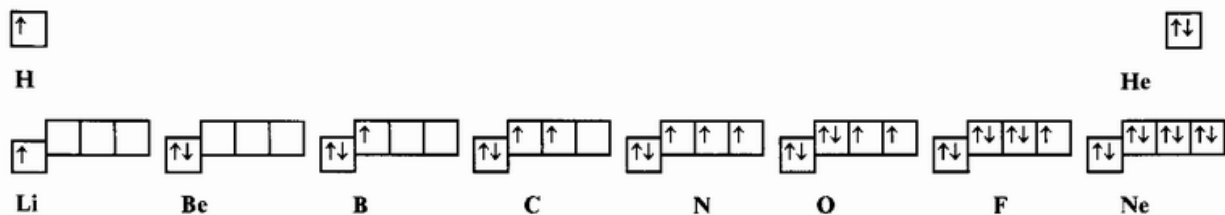


Рисунок 1 Схема заполнения электронами внешнего уровня элементов 1-го и 2-го периодов.

Продолжая "строительство", можно прийти до начала третьего периода, однако затем придется вводить как постулат порядок заполнения d и f орбиталей.

Из схемы, построенной на основании минимальных допущений, видно, что квантовые объекты (атомы химических элементов) будут по разному относиться к процессам отдачи и принятия электронов. Объекты He и Ne будут к этим процессам безразличны из-за полностью занятой электронной оболочки. Объект F скорее всего будет активно принимать недостающий электрон, а объект Li скорее будет склонен отдать электрон.

Интересно отметить, что понятия о четырех принципах построения материального мира и пятом, их связывающем, известны не менее 25 веков. В Древней Греции и Древнем Китае философы говорили о четырех первопринципах (не путать с физическими объектами): "огонь", "воздух", "вода", "земля". Связывающим принципом в Китае было "дерево", в Греции – "квинтэссенция" (пятая сущность). Взаимосвязь "пятого элемента" с остальными четырьмя продемонстрирована в фантастическом фильме с тем же названием.