

Реакционная способность атомов

Потапов Алексей Алексеевич

Согласно диполь-оболочечной модели атом представляет собой многослойную структуру вложенных друг в друга электронных квазисферических оболочек. Устойчивость атомов достигается благодаря динамическому равновесию сил кулоновского притяжения электронов в центральном поле ядра и центробежных сил отталкивания вращающихся электронов. Электроны каждой оболочки образуют одну из правильных конфигураций с равноудаленными электронами; атомы I группы таблицы Менделеева имеют точечную конфигурацию, атомы II группы – линейную (зеркально-симметричную относительно ядра), атомы III группы – тригональную, атомы IV группы – тетраэдрическую и т.д. вплоть до атомов VIII группы, которым соответствует гексаэдрическая (кубическая) конфигурация. Существенным признаком диполь-оболочечной модели является дипольное строение электронных оболочек атома. Каждая оболочка атома представляет систему локальных дипольных моментов, образуемых каждым из электронов данной оболочки и остовом атома. Понятие локального дипольного момента соответствует общепринятому определению дипольного момента как системы связанных между собой положительного $+q$ и отрицательного $-q$ зарядов, находящихся на расстоянии d , так что $p = qd$. Каждый из локальных дипольных моментов p_a атома представляет собой жестко связанные между собой заряды остова и одного из электронов выделенной оболочки, т.е. $p_a = qa$, где a – радиус данной оболочки. Мерой жесткости диполя p_a выступает энергия связи электрона с остовом. Локальные дипольные моменты представляют собой векторы, исходящие из центра атома в виде направленных лучей. Результирующий дипольный момент атома представляет собой векторную сумму локальных диполей p_a , а его величина всецело определяется степенью симметрии конфигурации электронных оболочек.

У атомов I группы таблицы Менделеева по одному электрону на внешней оболочке, которые образуют с остовом по одному локальному дипольному моменту p_a . Он и определяет результирующий дипольный момент атома, т.е. $p = p_a = qa$. Атомы II группы имеют по 2 электрона на своих внешних оболочках, расположенных симметрично относительно ядра атома, и, соответственно, два локальных дипольных момента, равных по величине и обратных по направлению, так что результирующий момент равен нулю: $\vec{p}_a + \vec{p}_a = p = 0$. В силу симметричной конфигурации электронов атомов III и IV группы их результирующие дипольные моменты также равны нулю $\sum p_a = 0$. Образование атомов идет по пути повышения пространственной размерности геометрических фигур: атомам I группы соответствует нуль-мерная (точечная) конфигурация, атомам II группы – одномерная (линейная), атомам III группы – двумерная (плоскостная), атомам IV группы – трехмерная (объемная). В соответствии с принципом минимума потенциальной энергии оболочки атомов принимают симметричные конфигурации, а именно: точечную, зеркально симметричную, тригональную и тетраэдрическую.

Характер формирования структур атомов V ÷ VIII групп принципиально отличается от атомов предшествующих групп. Дальнейшее уплотнение оболочек происходит в результате “нейтрализации” активных электронов путем образования двухэлектронных орбит с нулевым дипольным моментом. По сути, с V атома начинается обратный процесс – снижение пространственной размерности электронных конфигураций. У атомов V группы на их внешних оболочках размещаются по 5 электронов. Строение молекул типа NH₃ позволяет предположить, что из 5 эллиптических орбит четыре из них занимают вершины динамического тетраэдра (как у атомов IV группы), а пятый электрон-орбита занимает одну из четырех свободных вершин куба, в который вписан тетраэдр. В результате две орбиты выстраиваются вдоль одной из диагоналей куба и предположительно образуют общую двухэлектронную орбиту, так что соответствующие им локальные дипольные моменты $p_{\text{л}}$ нейтрализуют друг друга и дают результирующий нулевой дипольный момент, объясняя естественным образом физический смысл и химические свойства так называемой “неподеленной пары”. Оставшиеся три “свободных” электрона-орбиты образуют тригонально-пирамидальную конфигурацию с характерными тетраэдрическими углами, сохранившимися от своей тетраэдрической структуры. Соответствующие им 3 локальных диполя дают результирующий дипольный момент $p = 3p_{\text{л}} \cos \varphi \approx p_{\text{л}}$ (2φ – тетраэдрический угол между локальными диполями). Эта конфигурация немного отличается от гипотетической симметричной тригонально-бипирамидальной конфигурации. Диполь-оболочечная модель предсказывает наличие у атомов V группы собственного дипольного момента $p \approx p_{\text{л}}$. Этот вывод находит свое подтверждение в факте высокой химической активности атомов V группы, которые стремятся к образованию молекул с насыщенными связями (типа N₂), а также строением молекул, типа NH₃, PH₃, AsH₃ с группой симметрии c_{3v} .

У атомов VI группы с шестью валентными электронами 2 пары электронов – орбит выстраиваются вдоль 2-х диагоналей куба в результате дозаполнения двух вершин куба, в который первоначально был вписан тетраэдр. В результате образуются две двухэлектронные орбиты с компенсированными локальными дипольными моментами, дающими попарно нулевые дипольные моменты (две “неподеленные пары”). Оставшиеся два электрона представляют два локально дипольных момента $p_{\text{л}}$, которые дают результирующий дипольный момент $p = p_{\text{л}} \cos \varphi$ (φ – угол между диполями $p_{\text{л}}$). Данный вывод подтверждается достаточно высокой химической активностью атомов VI группы, которые стремятся образовать молекулы с насыщенными связями (типа O₂), а также строением молекул типа H₂O, H₂S, SeH₂, имеющих конфигурацию изогнутой молекулы группы симметрии c_{2v} .

У атомов VII группы таблицы Менделеева из общего числа 7 валентных электронов 3 пары электронов выстраиваются вдоль трех диагоналей куба, и один электрон встраивается в одну из оставшихся вершин данного куба. Тем самым три пары локальных дипольных момента образуют нулевые дипольные моменты вдоль 3-х диагоналей куба и один локальный дипольный момент, образованный остовом атома и седьмым электроном, так что результирующий дипольный момент атомов VII групп отличен от нуля и равен $p = p_{\text{л}}$. Конфигурация атомов VII группы представляет собой недостроенный куб (с одной незаполненной вершиной). Наличие собственного дипольного момента объясняет высокую химическую активность атомов VII группы, которая выражается в образовании молекул с насыщенными связями, типа F₂, а также дипольным строением молекул, типа HF, HCl, HBr.

У атомов VIII группы 8 валентных электронов образуют 4 двухэлектронные орбиты в октаэдрической конфигурации, а 4 пары локальных дипольных момента, выстроенных

вдоль 4-х диагоналей куба, дают нулевой результирующий дипольный момент. Электрическое поле этих атомов очень слабое, поэтому и взаимодействие их с окружающими микрочастицами также очень слабое, что проявляется в химической инертности атомов благородных газов.

Таким образом, атомы I, V, VI и VII групп имеют собственные дипольные моменты, которые являются причиной возникновения сильных диполь-дипольных взаимодействий и объясняют тем самым механизм взаимного притяжения атомов. Аналогичным образом объясняется электрическая и соответственно химическая активность молекул и химических соединений.

© Потапов Алексей Алексеевич, 2011