

Атомно-молекулярная сборка на основе физической связи

Потапов Алексей Алексеевич

Отличительной особенностью электронного строения атомов является их дипольное строение, которое предопределяет характер межатомного взаимодействия. У атомов благородных газов дипольное строение проявляется в виде совокупности локальных дипольных моментов, образуемых каждым из валентных электронов с остовом атома. Все восемь локальных диполей p_l начинаются из центра атома и направлены к вершинам воображаемого куба. Парно локальные дипольные моменты, выстроенные вдоль диагоналей виртуального куба, нейтрализуют друг друга. Поэтому результирующий дипольный момент p атома равен нулю, обуславливая относительно низкую химическую активность атомов благородных газов.

На малых расстояниях между атомами возникают силы межатомного взаимодействия, обуславливаемые асимметричным распределением локальных дипольных моментов относительно среднего положения между атомами. Это означает, что интенсивность взаимодействия между атомами определяется реальным распределением электрических зарядов. Кубическая симметрия распределения электронов валентной оболочки открывает в пространстве, образованном угловым раствором между электронными орбитами, зарядовую поверхность остова атома. Наличие заряда остова q подтверждается явлением сродства атомов благородных газов к протону. Заряд q выделенного атома создает поле $E = \frac{q}{r^2}$, действие которого проявляется в направленном взаимодействии с локальными диполями p_l второго атома, так что $u = -\frac{qp}{r^2} \cos \varphi$, где φ – угол между линией, соединяющей атомы и направлением одного из локальных диполей. В результате возникает вращающий момент, который стремится ориентировать локальный диполь на заряд q по кратчайшему расстоянию. Этому взаимному положению атомов соответствует энергия заряд-дипольного взаимодействия

$$u_{np} = -\frac{q_1 p_2}{r^2} = -\frac{1}{r^2} \sum_{\lambda}^8 p_{\lambda} = \sum_{\lambda}^8 a \cos \varphi, \quad (1)$$

где q_1 – эффективный заряд остова первого атома, p_2 – эффективный дипольный момент второго атома, обусловленный асимметричным распределением локальных дипольных моментов по отношению к заряду q_1 . Энергия u_{np} имеет притягивательный характер. Эффективный момент p можно найти на основании данных по радиусу атома a и углу φ между направлениями локальных диполей p_{λ} и линией связи между атомами r .

Наряду с заряд-дипольным взаимодействием по (1) имеет место диполь-дипольное взаимодействие, обусловленное взаимодействием всей совокупности локальных диполей p_1 и p_2 первого и второго атомов

$$u_{om} = \frac{p_1 p_2}{r^3}. \quad (2)$$

Энергия u_{om} имеет отталкивательный характер отталкивающего взаимодействия, интенсивность которого увеличивается по мере уменьшения расстояния между атомами, опять же, благодаря асимметричному распределению локальных диполей p_{λ} относительно центра связывания атомов.

Результирующая энергия взаимодействия между атомами принимает вид, характерный для потенциальной функции

$$u(r) = u_{np} + u_{om} = -\frac{q_1 q_2}{r^2} + \frac{p_1 p_2}{r^3}. \quad (3)$$

Равновесному состоянию димера соответствует энергия связи

$$u(l) = -\frac{q_1 p_2}{3l^2}, \quad (4)$$

где равновесное расстояние $l = 3a$ определяется в результате минимизационной процедуры; a – радиус атома.

С учетом (4) потенциальная функция (3) принимает вид

$$u(r) = -\frac{2aq^2}{r^2} \left(1 - \frac{2l}{3r}\right), \quad (5)$$

где принимается $q_1 = q_2 = q$, $p = 2p_{\lambda} = 2aq$ – следует из тетраэдрической симметрии локальных дипольных моментов.

В отличие от известных потенциальных функций функция (5) не содержит подгоночных параметров. Входящие в нее величины q , a , p имеют статус атомных констант.

По характеру взаимодействий к атомам благородных газов близки молекулы с насыщенными связями. Описание ван-дер-ваальсовых (молекулярных) веществ достигается с помощью потенциальных функций типа (5). Их отличие в том, что они дополнительно должны учитывать кооперативный характер взаимодействия между микрочастицами.

© Потапов Алексей Алексеевич, 2011