

Wiązania

- w świetle teorii kwantów
- fenomenologicznie

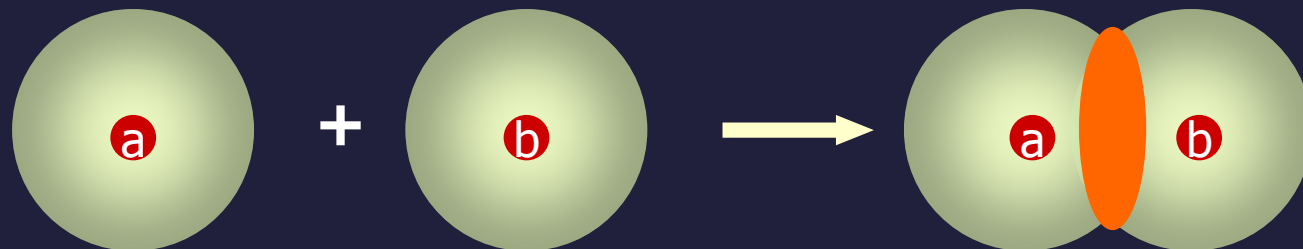
Wiązania

Teoria kwantowa: zwiększenie gęstości prawdopodobieństwa znalezienia elektronów w przestrzeni pomiędzy atomami

$$\psi = c_a \psi_a + c_b \psi_b$$

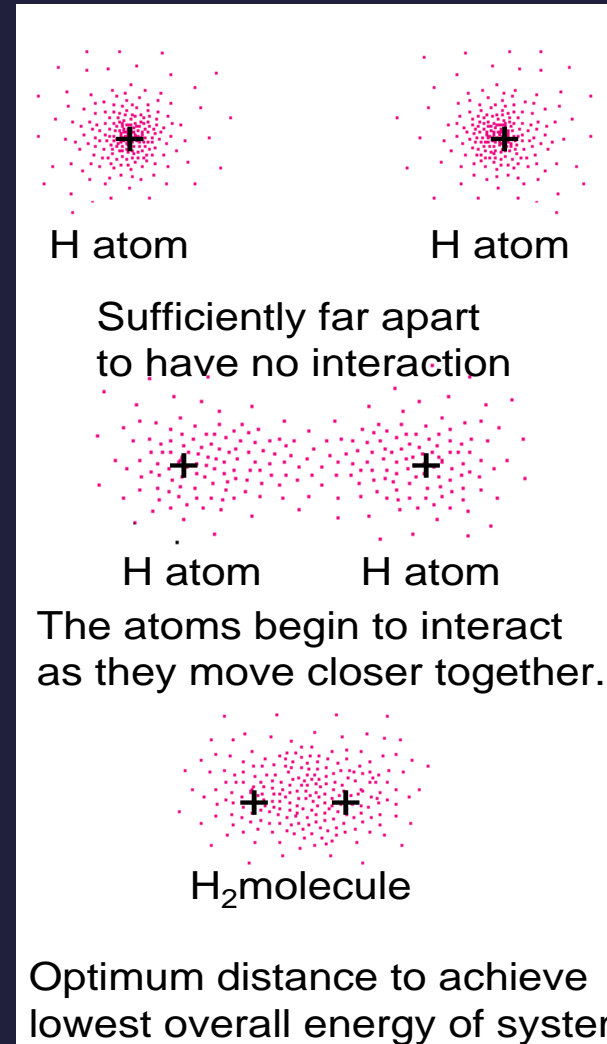
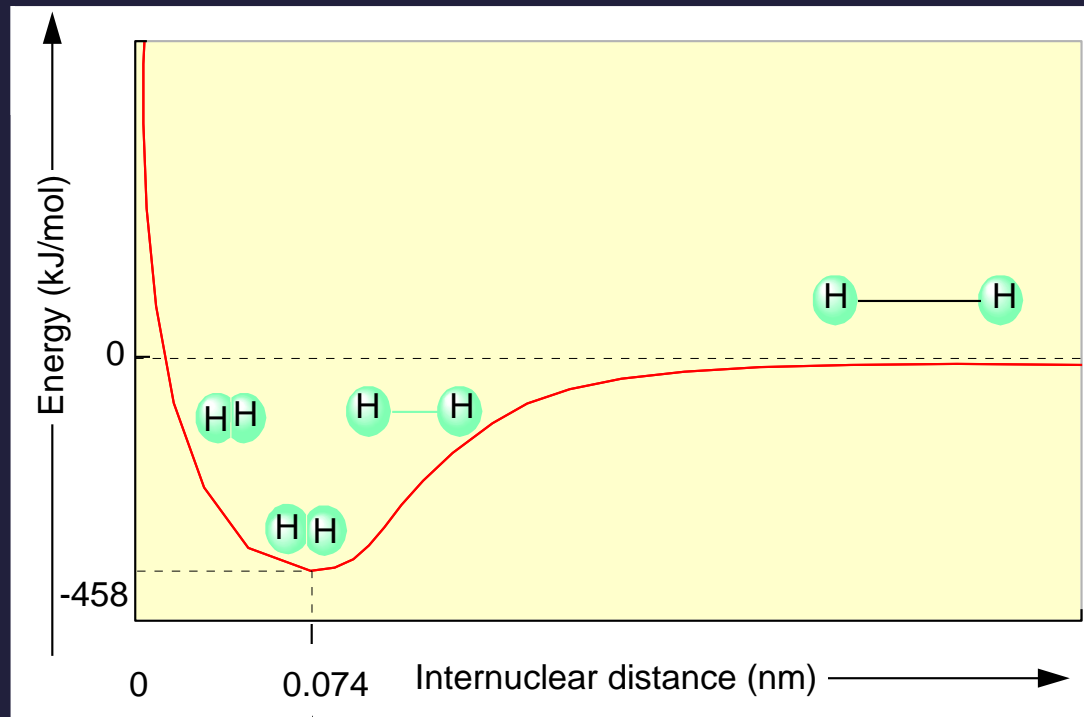
Liniowa kombinacja orbitali atomowych (LCAO)

Weźmy 2 atomy wodoru i utwórzmy molekułę H₂



Wiązania

Opis fenomenologiczny



Własności wiązań

- Długość
- Energia
- Polarność

Długość wiązania

- odległość dla której energia jest minimalna

Energia wiązania

- energia potrzebna do zerwania wiązania

Typy wiązań – kryterium podziału

Elektroujemność

Definicja Mullikena:

$$E = \frac{P - I}{2} \quad \text{lub} \quad E = \frac{|P| + |I|}{2}$$

P – powinowactwo elektronowe
 I – energia jonizacji

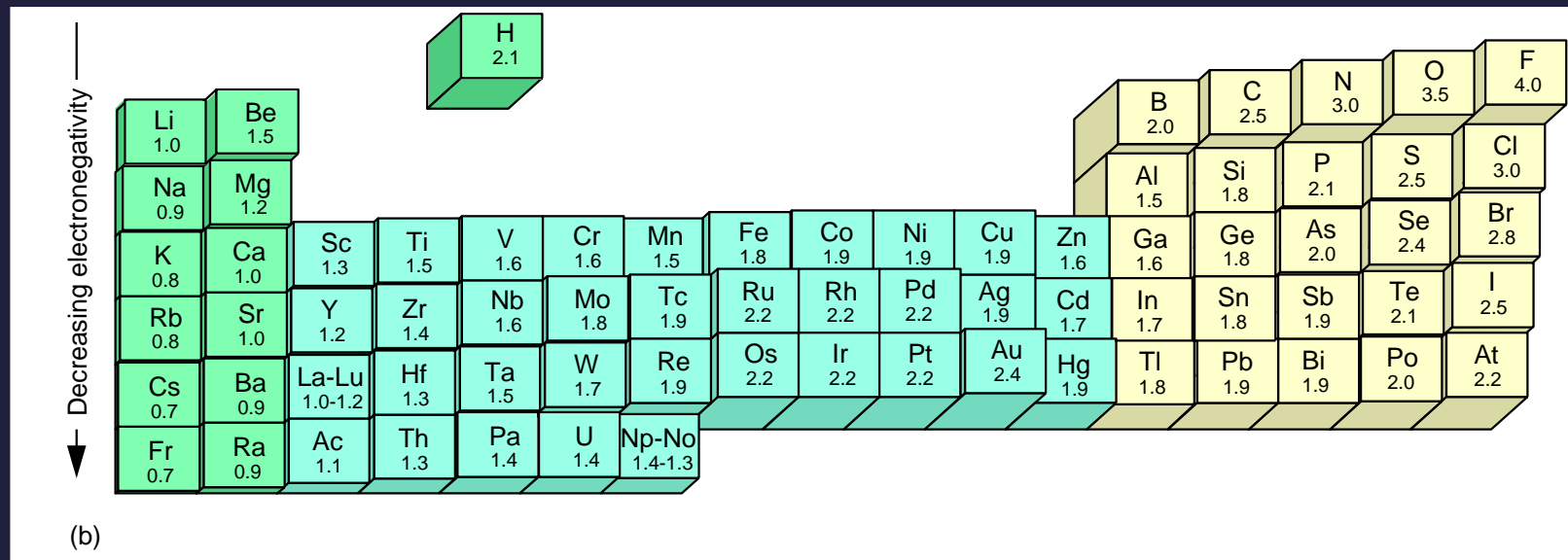
Definicja Paulinga:

$$\lim_{\Delta x \rightarrow 0} I_{AB} = \sqrt{I_{AA} \cdot I_{BB}}$$

$$\Delta E = E_A - E_B = 0.1018 \cdot \sqrt{I_{AB} - \sqrt{I_{AA} \cdot I_{BB}}} \quad \mu\text{J} \cdot \text{mol}^{-1}$$

Typy wiązań – kryterium podziału

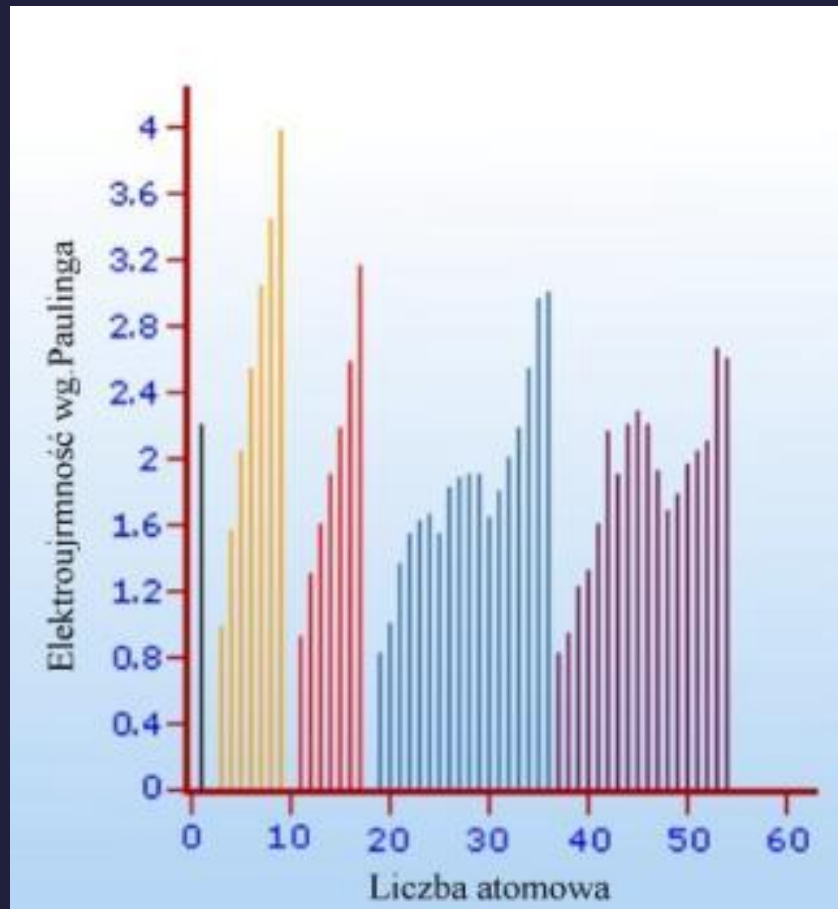
Elektroujemność



skala Paulinga

Typy wiązań – kryterium podziału

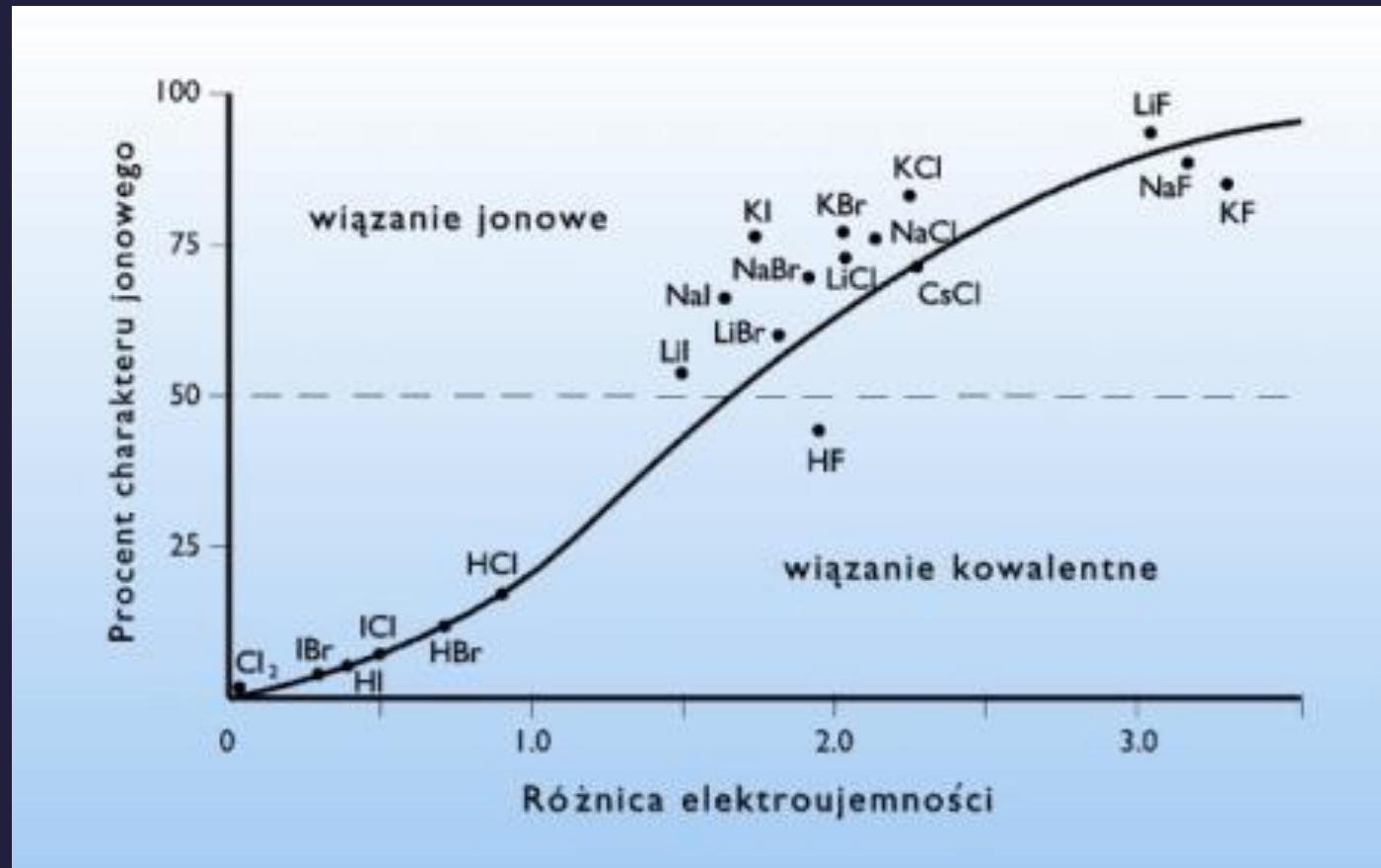
Elektroujemność



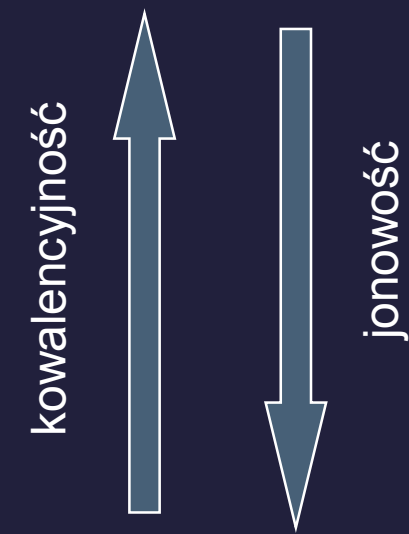
skala Paulinga

Typy wiązań – kryterium podziału

Elektroujemność

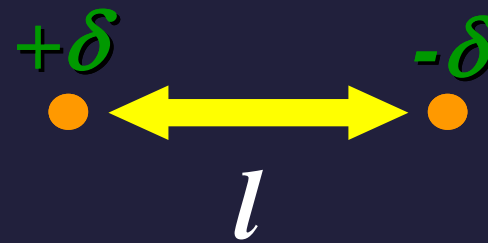
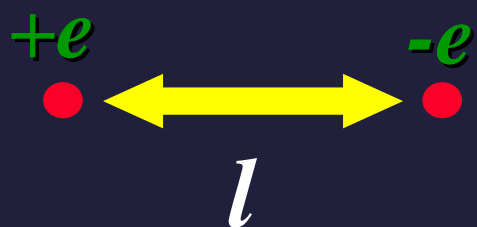


Typy wiązań

Różnica elektroujemności pomiędzy atomami	Typ wiązania	Trendy
0	kowalencyjne	
	kowalencyjne spolaryzowane	
>1.5	jonowe	

Polarność

wiązań



miara - moment dipolowy

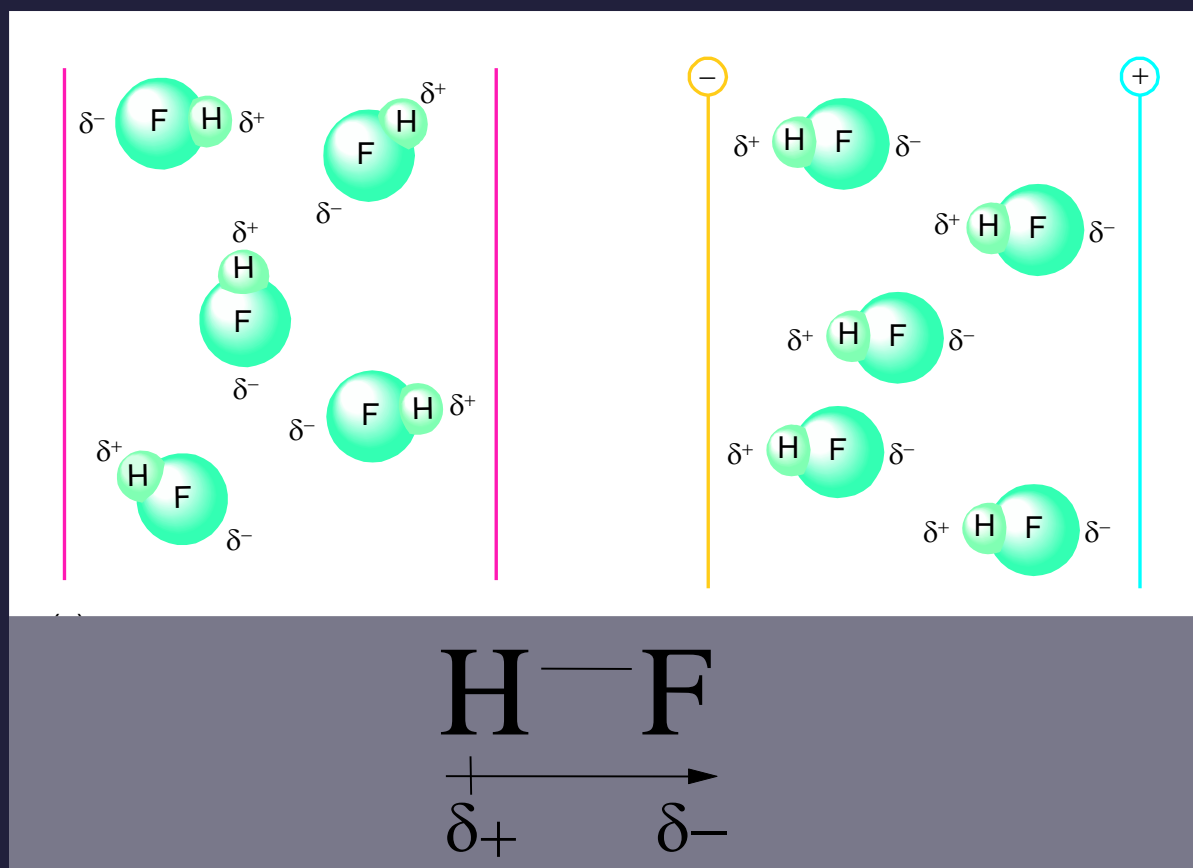
$$e \cdot l$$

$$\mu = \delta \cdot l$$

δ - ładunek efektywny
 l - długość wiązania

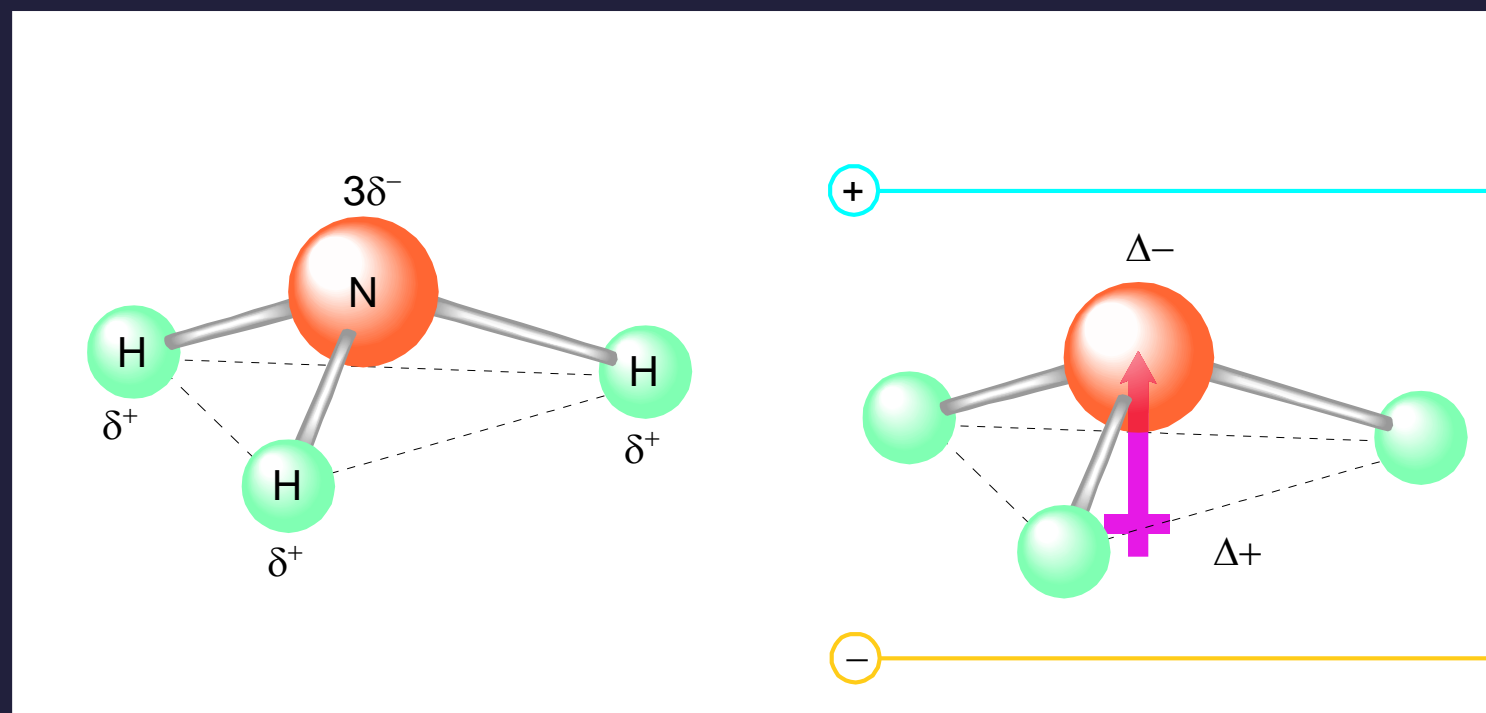
Polarność

wiązań i cząsteczek



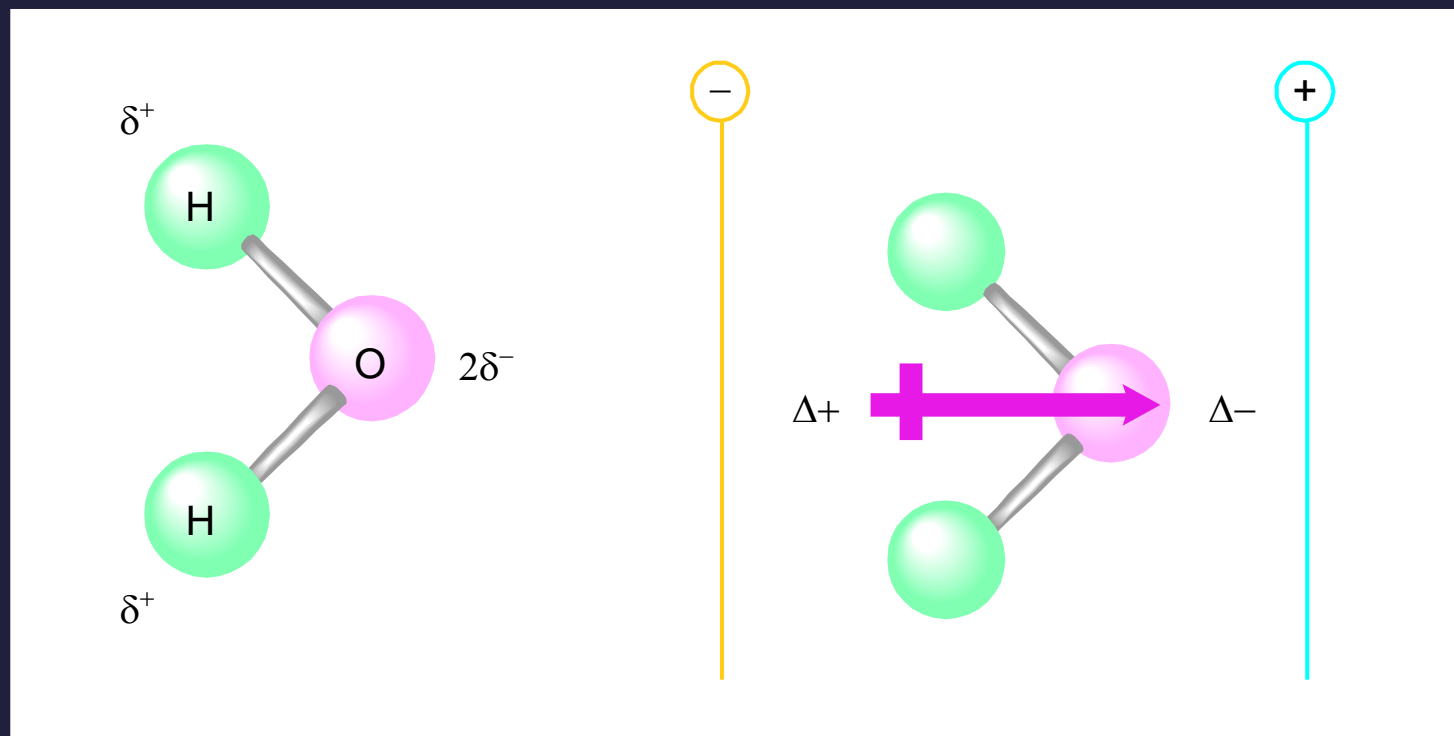
Polarność

wiązań i cząsteczek



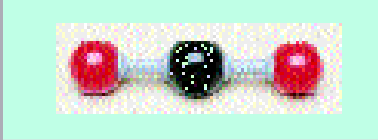
Polarność

wiązań i cząsteczek



Polarność

wiązań i cząsteczek

cząsteczka	budowa	przykład
AB_2		CO_2
AB_3		SO_3
AB_4		CCl_4

Cząsteczki symetryczne
- wiązania polarne
- moment dipolowy=0

Jony

Konfiguracja elektronowa



Jony

Konfiguracja elektronowa

Przykład przewidywanie rozmiarów jonów

jony izoelektronowe



największy

najmniejszy

Związki jonowe

Przemiany energii podczas tworzenia związku jonowego

1. Sublimacja metalu



2. Jonizacja metalu (I)



3. Dysocjacja niemetalu



4. Utworzenie anionu niemetalu (P):

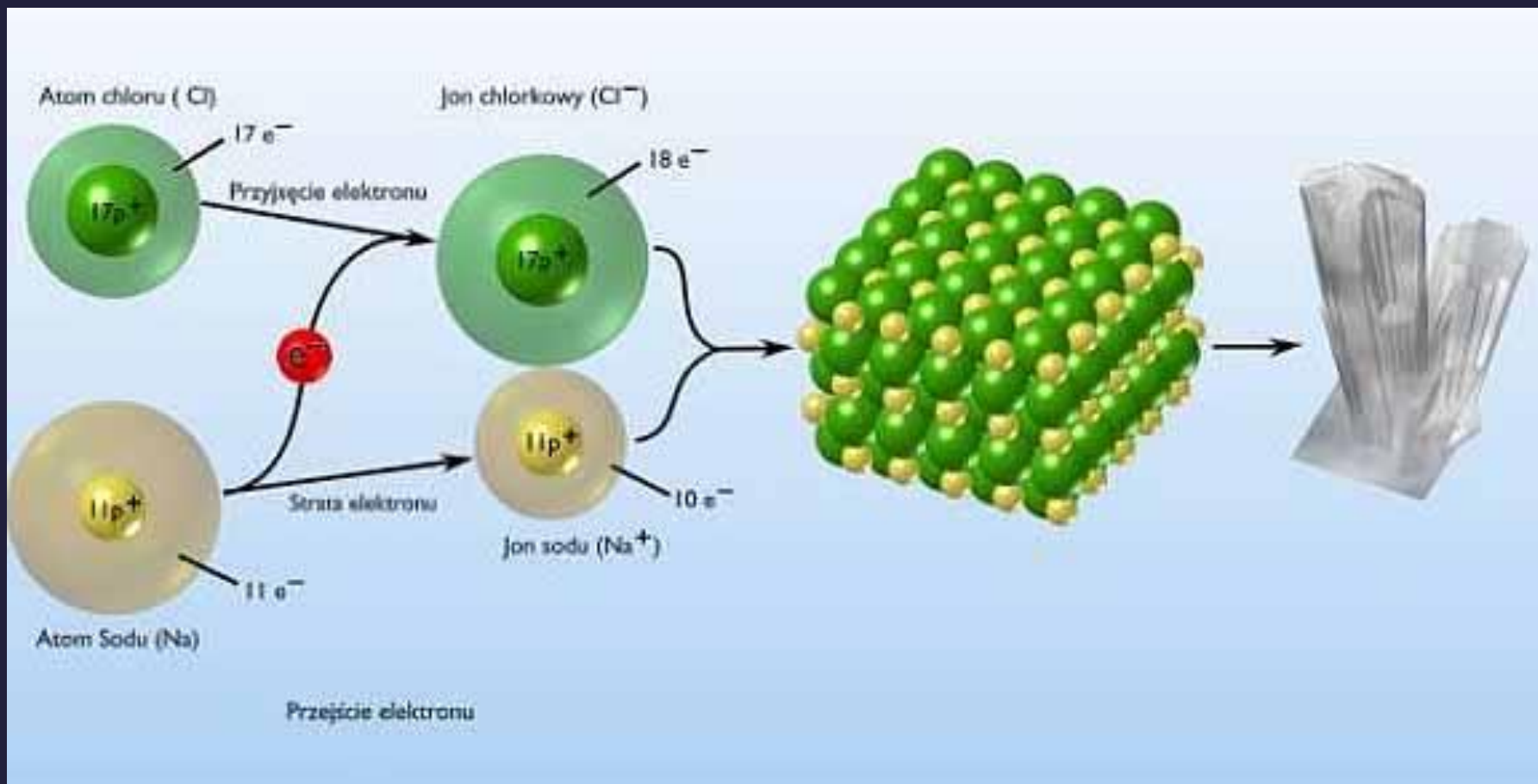


5. Utworzenie związku jonowego



Związki jonowe

Etapy tworzenia związku jonowego



Związki jonowe

Energia sieciowa

Zmiana energii podczas następującej przemiany:



Efekt energetyczny (z punktu widzenia układu) egzotermiczny

Związki jonowe

Energia sieciowa

$$\text{Energia sieciowa} = k \frac{Q_1 Q_2}{r}$$

oddziaływanie Coulombowskie

Q_1, Q_2 = ładunki jonów

r = minimalna odległość pomiędzy kationem i anionem

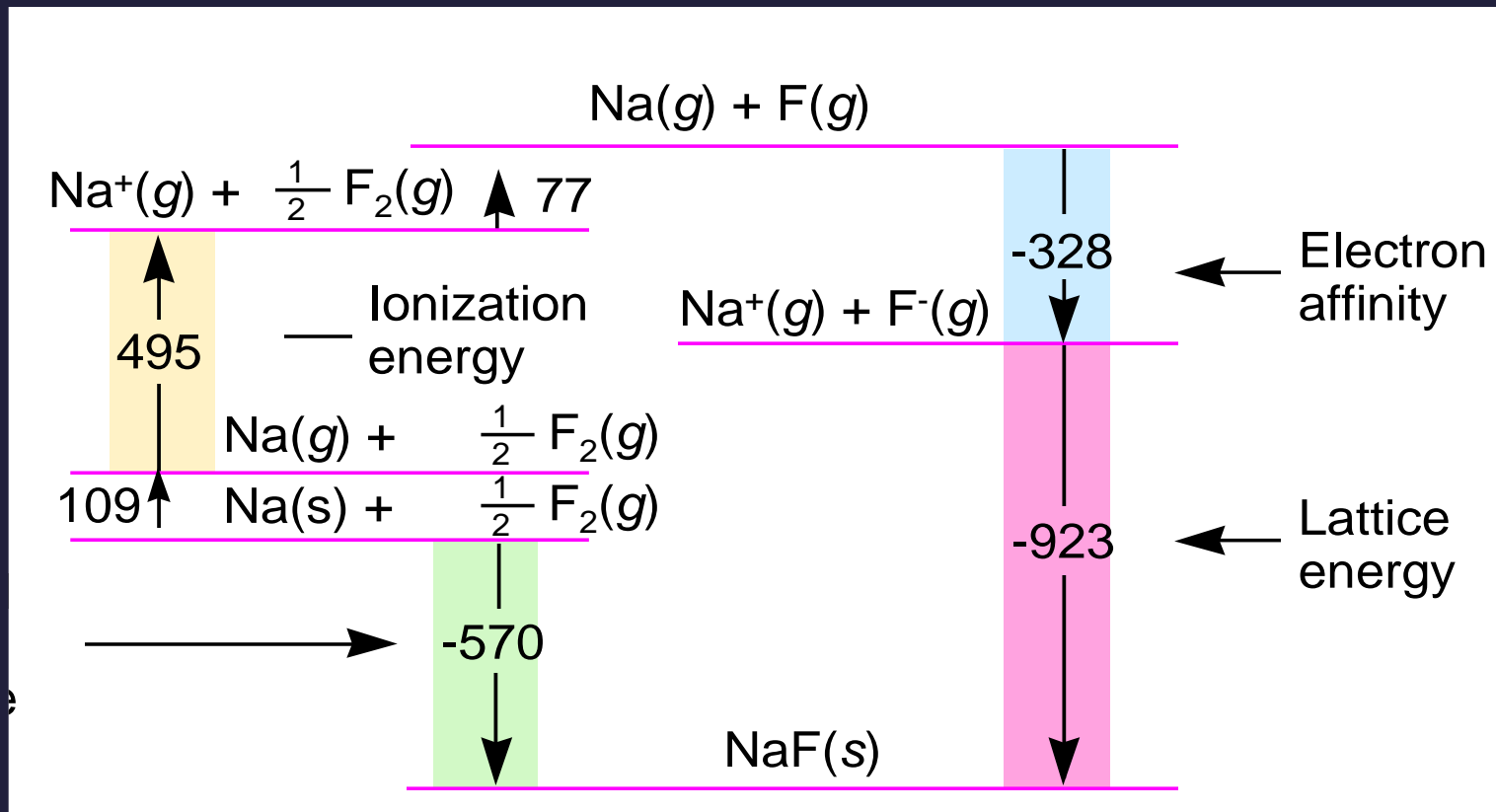
Związki jonowe

Przemiany energii podczas tworzenia NaF

$\text{Na}(s) \rightarrow \text{Na}(g)$	sublimacja	161
$\text{Na}(g) \rightarrow \text{Na}^+(g) + e^-$	jonizacja	495
$\frac{1}{2}\text{F}_2(g) \rightarrow \text{F}(g)$	dysocjacja	77
$\text{F}(g) + e^- \rightarrow \text{F}^-(g)$	utworzenie anionu	-328
$\text{Na}^+(g) + \text{F}^-(g) \rightarrow \text{NaF}(s)$	reakcja	-923
<hr/>		
$\text{Na}(s) + \frac{1}{2}\text{F}_2(g) \rightarrow \text{NaF}(s)$		-570

Związki jonowe

Przemiany energii podczas tworzenia NaF



Związki jonowe

Przemiany energii podczas tworzenia MgO

