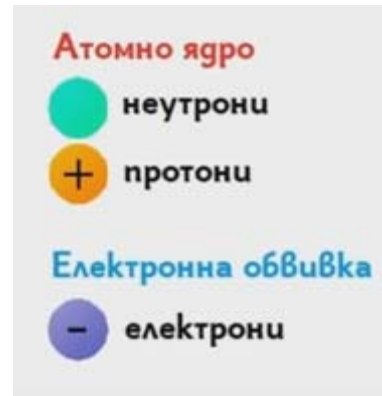
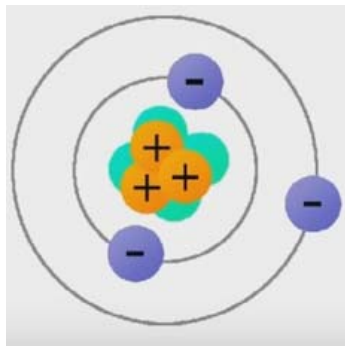


АТОМНА СТРУКТУРА НА МАТЕРИАЛИТЕ. МЕЖДУАТОМНИ ВРЪЗКИ

ЕЛЕКТРОНЕН СТРОЕЖ НА АТОМИТЕ

Атоми – електронеутрални частици, които са изградени от атомно ядро и електронна обвивка.



Атомно ядро - градивните частици на атомното ядро са протони и неутрони. Протоните имат положителен заряд, а неутроните нямат заряд. Атомното ядро е заредено положително и почти цялата маса на атома е съсредоточена в него, макар то да заема незначителна част от обема му. В периодичната система на химичните елементи атомите са подредени по атомен номер, който съответства на броя на протоните в тяхното ядро.

Електронна обвивка - електронната обвивка на атома е изградена от електрони. Електронът е носител на отрицателен електричен заряд. Броят на електроните в атома е равен на броя на протоните в ядрото и затова като цяло атомът е електронеутрален, т.е. няма заряд. Атомите на различните елементи се различават по броя на електроните, които обикалят около ядрата им.

Структурата и свойствата на материалите зависят главно от строежа на изграждащите ги атоми. Всеки атом се състои от електрически положително заредено ядро и от отрицателно заредени електрони. Принадлежността на един атом към определен елемент се определя от заряда на ядрото Ze , където Z е атомният номер в периодичната система на елементите, а $e = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{C}$ е зарядът на електрона. Броят на електроните в неутралния атом е равен на атомния номер на този атом. Когато атомът загуби електрони, той се превръща в положително зареден йон. Ако загубените електрони са k на брой, атомът е k кратно положително зареден. Ако неутрален атом присъедини електрони, полученият йон е съответно отрицателно зареден.

Размерите на атома зависят от размерите на неговите външни електронни обвивки и от това, дали той е сам в пространството или е във взаимодействие с други атоми. Неутралният атом се характеризира с пълна енергия, равна на енергията необходима за откъсването на всички z електрона от ядрото му

$$W_0(z) = E_1(z) + E_2(z) + \dots + E_z(z),$$

където $E_1(z) + E_2(z) + \dots$ са енергиите за последователно откъсване на 1-ви, 2-ри и т. н. електрон, т. е. енергията за йонизация на съответен неутрален атом, на еднократно зареден йон за получаване на двукратнозареден и т. н.

Като микроскопична система атомът се подчинява на законите на квантовата механика. Енергията му приема дискретен (прекъснат) набор от стойности. Електроните се въртят около ядрото по определени кръгови и елиптични орбитали, размерите и пространственото разположение на които се характеризират от квантови числа.

Квантовите числа са набор от стойности на квантови променливи, позволяващи да се определи количествено състоянието на една частица. Всяко квантово число показва някаква характеристика на електроните в един атом, която определя движението на електрони като вълнова функция, описвана от уравнението на Шрьодингер.

Състоянието на електрона в атома еднозначно се определя от набор от четири квантови числа:

- **Първо (главно) квантово число n** определя номера на енергийното ниво (и на електронния слой) и характеризира енергията на електроните, които заемат това енергийно ниво. Главното квантово число може да бъде само цяло число $n=1, 2, \dots, 7$, като $n=1$ определя най-вътрешния слой.

Съвкупността на електроните в атома, имащи едно и също главното квантово число n , се нарича електронна обвивка или слой.

- **Второ (орбитално) квантово число l** определя ъгловото разпределение на електроните и следователно характеризира формата на орбиталите. Орбиталното квантово число може да заема следните стойности $l=0, 1, 2, \dots, n-1$. Например, ако орбиталата е кръгла $l=0$.
- **Трето (магнитно) квантово число m** определя броя на орбиталите, колко електрони може да има във всяка орбитала и пространственото разположение на орбиталите в рамките на един послой, затова стойността му е свързана с

орбиталния магнитен момент на електрона. При дадено орбитално квантово число l магнитното квантово число m приема стойност $2l + 1$.

- **Четвъртото (спиново) квантово число m_s** не е свързано с вида и размерите на електронните орбитали, а със собственото въртене на електроните, в резултат на което възниква съответен механичен момент (спин на електрона) и магнитен момент. Спиновото квантово число m_s характеризира вероятността спинът на електрона да се "върти" около оста си в две противоположни посоки. $m_s = \pm 1/2$. Като '+' е по часовниковата стрелка, а '-' – обратно на часовниковата стрелка.

Запълването на електронните слоеве е свързано с принципа на Паули, съгласно който всеки два електрона в атома трябва да са в различни квантови състояния и следователно да се различават поне по едно от четирите квантови числа.

Всички електрони с дадено главно квантово число n образуват електронен слой, съдържащ $2n^2$ електрона. Получават се слоеве $n=1, 2, 3, 4, 5, \dots$, които се означават с буквите K, L, M, N, O, \dots . Когато всички състояния от даден слой са заети с електрони, този слой е напълно изграден. Във всеки електронен слой състоянията с дадено орбитално квантово число образуват съответен $s-, p-, d-, f-$ и т. н. подслой. Като се има предвид принципът на Паули се вижда, че броят на електроните във всеки подслой е $2(2l + 1)$. За подслоевете $s-, p-, d-, f-$ и т. н. е 2, 6, 10, 14. Общият брой електрони в последователните слоеве с $n=1, 2, 3, 4, 5$ и т. н., наречени съответно K, L, M, N, O е $2n^2$, т. е. 2, 8, 18, 32, 50.

Означенията на слоевете и разпределението на електроните по слоеве и подслоевете са представени в таблица 1.

Таблица 1 Разпределението на електроните по слоеве и подслоевете

Главно квантово число n	1		2		3			4			5				
Символ на слой	K		L		M			N			O				
Максимален брой електрони в слой	2		8		18			32			50				
Орбитално квантово число l	0	0	1	0	1	2	0	1	2	3	0	1	2	3	4
Символ на подслой	1s	2s	2p	3s	3p	3d	4s	4p	4d	4f	5s	5p	5d	5f	5g
Максимален брой електрони в подслой	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	14	18

Броят на електроните във всеки подслой се означава със съответната цифра, поставена горе вдясно на символа му.

Електронната структура на даден атом се представя, като се напишат последователно символите на съответните подслоеве, заети от електрони. Например електронната структура на атома на кислорода с два електрона в $1s$ - състояние, два електрона в $2s$ - състояние и четири електрона в $2p$ - състояние се записва със символа $1s^2 2s^2 2p^4$.

Електронната структура на атомите от цялата периодична система на Д. И. Менделеев е представена на фигура 1.

The image shows a comprehensive periodic table of elements in Bulgarian. The title is "ПЕРИОДИЧНА СИСТЕМА НА ХИМИЧНИТЕ ЕЛЕМЕНТИ". The table is organized into periods (rows) and groups (columns). Each element cell contains its symbol, name in Bulgarian, atomic number, and its electron configuration. The table is color-coded: s-block elements are pink, p-block are light blue, d-block are yellow, and f-block are purple. A legend on the right side explains the color coding and provides information about the physical states of elements at 20°C (solid, liquid, gas) and their discovery methods (synthesis, natural occurrence). The f-block elements (lanthanides and actinides) are shown separately at the bottom of the table.

Фигура 1 Периодична система

Елементите в периодичната система са подредени в периоди и групи.

Период е хоризонтален ред, в който елементите имат еднакъв брой електронни слоеве. Започва с s - елемент и завършва с p - елемент т.е. започва с метал и завършва с инертен газ. Периодите биват малки (съдържат само s и p елементи) и големи (съдържат s , p , d и f елементи и са 4, 5, 6 и 7 недовършен). Всеки период свършва с елемент с изцяло запълнен електронен слой. Такива атоми не проявяват склонност да

отдават или присъединяват допълнителни електрони. Това са тъй наречените инертни или благородни газове.

Група е вертикален ред, в който елементите имат еднакъв брой електрони в последния електронен слой. Биват главни (А) и вторични (Б). Главните групи съдържат само *s* и *p* елементи. Във вторичните влизат *d* и *f* елементите.

Силата на връзката на електроните се намалява при отдалечаване от ядрото, тоест с увеличаване на номера на слоя (главно квантово число), а също и с увеличаване на орбиталното квантово число при определено *n*. Ядро с определен атомен номер присъединява електрони в последователност, свързана с отслабване на енергията на връзката: първо присъединява 2 електрона в *1s*, след това 2 електрона в *2s*, 6 електрона в *2p*, 2 електрона в *3s* и т. н. (виж таблица 1).

Свойствата на атомите (елементите) зависят от броя и разпределението на електроните и особено от броя на електроните в най-външните електронни слоеве. Този брой съответства на максималната валентност на елемента в периодичната система. При някои от атомите най-външните електронни слоеве съдържат максимален брой електрони. Това са например Ne, Ar, Kr, чиято електронна конфигурация е s^2p^6 на външния слой. Елементите, които имат малко (1 или 2) електрони във външния си слой обикновено се йонизират и се превръщат в положително заредени йони (катиони). Те са електроположителни и по природа са метални вещества. Електроотрицателните елементи са неметали и приемат електрони в химични реакции, образувайки отрицателни йони (аниони). Такива елементи са например C, Si, Ge, As, P. Следователно електронната конфигурация в значителна степен определя свойствата на отделните химични вещества и тяхното поведение при химично взаимодействие с други вещества.

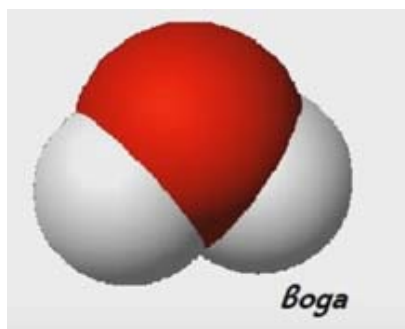
При малко разстояние на един атом до друг възниква силно електростатично взаимодействие, което може да доведе до появата на един или друг вид химични връзки, съответно до образуването на молекули и кристали с различна природа.

Важна особеност за свойствата на тъй наречените преходни метали е недостроеността на вътрешни слоеве при наличие на електрони в следващ слой. Както се вижда от периодичната система на Менделеев (фигура 1) в четвъртия период запълването на *4s* подслоя завършва при калция и от скандия до медта включително става изграждането на *3d* подслоя. Тези елементи образуват групата на преходните елементи от четвъртия период, наречена още група на преходните елементи на желязото (преходни *3d* елементи). Подобно нарушение на реда на запълване на нивата

се повтаря и в другите групи преходни метали. По аналогичен начин в петия период на периодичната система от итрия до паладия се извършва изграждане на $4d$ подслоя ($5s$ подслоя е запълнен). Тези елементи образуват групата на преходните елементи от петия период, наречена още група на преходните елементи на паладия (преходни $4d$ елементи).

В началото на всеки период се намира елемент, при който започва изграждането на нов електронен слой ($1s$, $2s$, $3s$ и т. н.) Всеки период завършва с елемент, който има изцяло запълнен електронен слой (при първи и втори период) или изцяло запълнени s и p подслоеве (при останалите периоди).

Молекули – най-малките устойчиви частици на дадено вещество. Те се състоят от два или повече еднакви или различни атоми, които са свързани, посредством **химични връзки**. Броят на атомите в молекулата е различен – от 2 до хиляди. В случаите на едноатомни молекули (например при инертни газове със запълнен най-външен електронен слой) понятията атом и молекула съвпадат. В голямото разнообразие от вещества молекулите могат да запазват или да не запазват своите индивидуални особености. На фигурата по-долу е показана молекулата на водата.



Молекула, в която центровете на положителния и отрицателния заряд съвпадат, се нарича неполярна. Молекула, в която центровете на положителния и отрицателния заряд са разделени, се нарича полярна или дипол (диполът е система от 2 еднакви по големина и противоположни по знак заряда, намиращи се на малко разстояние един от друг.). Вещества с неполярни молекули се наричат неполярни (H_2 , N_2 , CCl_4 , CO_2 и др.), а вещества с полярни молекули се наричат полярни (H_2O , CH_3OH , C_2H_5OH и др.).

Макромолекула означава голяма молекула. Такива са молекулите на високомолекулните органични съединения (полимерите). Прието е макромолекули да се наричат молекулите, съдържащи повече от 1000 атома. Макромолекулите могат да

бъдат линейни или пространствени (съдържащи разклонения и напречни връзки между отделните клонове).

Понятието молекула в материалознанието се използва рядко, предимно при изучаването на полимерните материали, тъй като в твърдите неорганични системи молекулите не съхраняват своята индивидуалност.

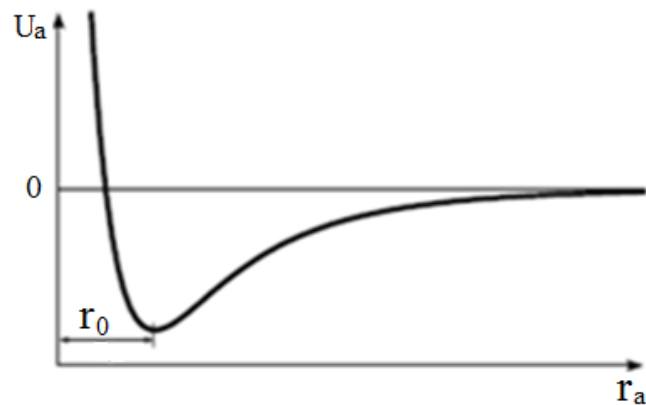
Йони – получават се когато един атом приеме или отдаде определен брой електрони.



ВИДОВЕ ХИМИЧНИ ВРЪЗКИ

Между градивните частици (атоми, молекули и йони) на твърдите тела действат различни по своята природа сили, които ги задържат на определено разстояние една от друга. Ако частиците са отдалечени на безкрайно голямо разстояние, т.е. изолирани атоми или молекули, те не си взаимодействат помежду си. Ако обаче изолираните атоми се доближат на някакво разстояние r_a между тях възникват сили на взаимодействие (фигура 2):

- на привличане, ако разстоянията са по-големи от r_0 ;
- на отблъскване, ако разстоянията са по-малки от r_0 .



фигура 2 Енергия на взаимодействие на атомите

Потенциалната енергия на взаимодействие на атомите може да се представи чрез следната формула:

$$U_a = \frac{\alpha}{r_a^n} + \frac{\beta}{r_a^m}$$

където α и β са константи, характеризиращи вида на взаимодействие (привличане или отблъскване), n и m са постоянни числа, определящи степента на съответното взаимодействие. При някакво определено разстояние r_0 настъпва равновесие на силите. Това означава, че образувалата се молекула има минимална енергия на взаимодействие между атомите, а разстоянието r_0 се нарича дължина на връзката. Обикновено $r_0 \approx 1 - 2 \text{ \AA}$.

Различават се следните видове химични връзки между частиците:

- **Ковалентна връзка** – създава се от една, две или три двойки електрони, които са общи за двойка атоми от молекулата. Ковалентната връзка се дължи на взаимодействието между атомите, при което става сдвояване на валентни електрони с противоположни спинове. Сдвоените електрони едновременно принадлежат на взаимодействащите си атоми, но не са свързани с нито един от тях.

При сдвояването на два електрона се образува единична връзка. Например при образуването на молекулата на водорода H_2 , при която се обединяват $1s$ електроните на два атома в обща двойка електрони се получава:

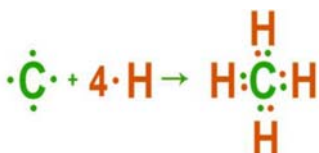


В този случай всеки атом дава само един електрон и образува единична ковалентна връзка, като се сдвоява с електрон с противоположен спин от съседен атом.

Възможни са обаче взаимодействия с по-голяма кратност на връзката, когато се образуват двойни, тройни или четворни ковалентни връзки, като се сдвояват съответно четири, шест или осем електрона. Например при молекулата на азота има три общи двойки електрони



Ковалентната връзка е характерна както за молекули от атоми на един и същи елемент, така и за молекули на химични съединения например за метана CH_4 е:



Въглеродният атом има четири валентни електрона, а четирите атома на водорода имат по един валентен електрон. Всеки водороден атом придобива електронна конфигурация на He, а въглеродният атом придобива четири допълнителни електрона, по един от всеки водороден атом, допълвайки горния електронен слой до устойчива 8-електронна конфигурация, съответстваща на тази на Ne.

При полимерите се наблюдава също ковалентна връзка. Основната молекулна структура представлява дълга верига от въглеродни атоми, които са свързани ковалентно по двойки по между си.

При ковалентните връзки електронната двойка е обща за атомите, влизащи в молекулата. Ако двуатомната молекула се състои от атоми на един елемент (H_2 , Cl_2 , O_2 , N_2), то електронната двойка принадлежи в еднаква степен на двата атома. В този случай молекулата и ковалентната връзка се наричат неполярни или неутрални. В тях центровете на положителните и отрицателните заряди съвпадат. Ако двуатомната молекула се състои от атоми на различни елементи (HCl , HF , H_2O , NH_3 , CH_4), то електронната двойка може да е отместена към единия атом. В този случай ковалентната връзка се нарича полярна, а молекулата с полярна връзка се нарича полярна или диполна и за нея центровете на положителните и отрицателните заряди не съвпадат. Диполната молекула се характеризира с електричен диполен момент, който може да се представи чрез формулата:

$$\vec{p} = q\vec{l},$$

където q е зарядът, а l е разстоянието между центровете на положителния и отрицателния заряд.

За ковалентните връзки е характерна пространствена наситеност и насоченост на връзките в направление на най-голямата плътност на сдвоените електрони. Веществата с ковалентни връзки имат висока температура на топене, голяма твърдост, слаба електропроводимост и химическа инертност.

- **Донорно-акцепторна връзка** – тя представлява разновидност на ковалентната връзка. Донорно-акцепторната връзка възниква между атоми, способни да отдават електрони (донори) и атоми, способни да приемат електрони (акцептори). Примери за такива материали са съединенията на арсена – галиев арсенид ($GaAs$), индиев арсенид ($InAs$) и др.

- **Йонна връзка** – дължи се на електростатичното взаимодействие между разноименно заредени йони. Съединенията с йонни връзки имат разнородни свойства, които са характерни за типичните метали и неметали. Йонната връзка е най-характерна за неорганичните съединения, които имат в своя състав положително и отрицателно заредени йони – хлориди (NaCl, CaCl₂), много оксиди (ZnO, CdO, NiO, CuO) и др.



При NaCl например атомът на Na отдава единствения електрон, намиращ се на 3s слоя и се превръща в положително зареден йон, а хлорният атом присъединява към себе си 1 електрон от Na, запълва 3p слоя си и се превръща в отрицателно зареден йон с електронна конфигурация идентична на тази на Ar.

Йонната връзка е ненаситена. Силата на връзката е еднаква във всички направления около йона. Следователно йонните съединения са стабилни, с възможно най-плътно подреждане на йоните в пространството. Например, при керамичните материали преобладаващите връзки са йонни.

- **Метална връзка** - характерна е само за металите, в които йоните образуват скелета на кристалната решетка, в който свободно се предвижват електроните и равномерно запълват целия кристал. Електронният облак поддържа равновесие в този йонен скелет, като за всеки метал разстоянието и подреждането на атомите (йоните) е строго определено.

За металите са характерни големи стойности на електроотрицателността и на топлопроводимостта, които се обясняват със свободното преместване на електроните в кристала (подобно на молекулите на идеалния газ). Силите на привличане между йонните решетки и електронния газ обуславят устойчивостта на системата като цяло и това са сили на металната връзка.

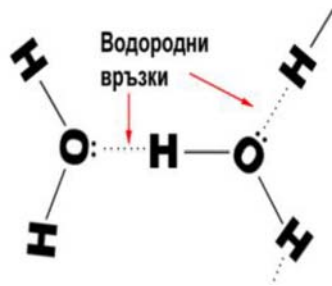
Металната връзка е характерна за елементите от IA и IIA групи от периодичната система на Менделеев, а също така и за всички други метални елементи. Металната връзка е ненасочена, в резултат на което разположението на йоните в решетката се приближава до плътна опаковка на сфери. На това се дължи и тяхната висока пластичност. Металната връзка е ненаситена. Характерът и големината на силите на връзката определят реакционната способност на телата, тяхната

микротвърдост, висока топлопроводимост и електропроводимост. Болшинството метали имат високи температури на топене и на кипене. Енергията на връзката може да бъде силна като тази за волфрама (850 kJ/mol) или слаба като тази за меркурия (68 kJ/mol).

- **Ван-дер-Ваалсова връзка** – този тип връзка е относително слаба спрямо разгледаните по-горе химични връзки. Типичните стойности на енергията на връзката са от порядъка на 10 kJ/mol. Ван-дер-Ваалсовата връзка играе силна роля при инертните газове, които имат стабилни електронни конфигурации, а също и като допълнителни връзки за молекулни структури с ковалентно взаимодействие.

Същността на Ван-дер-валсовите връзки се състои в това, че електричното поле на електроните, движещи се около ядрото на атома, действа на движението на електроните на съседния атом. При това става мигновена взаимна поляризация на електронните орбити с образуване на диполи. Един от възможните начини за свързване на два атома е създаването на т. нар. флукутиращ диполен момент. Нормално е в един атом или молекула електронният облак да е симетрично разпределен около ядрото. Могат да се осъществяват случайни краткотрайни изменения в плътността на разпределение на електроните и създаване на много малки диполи с два полюса – ядрото и центъра на разпределение на електронния облак. Всеки такъв дипол е флукутиращ, тъй като се появява и изчезва за кратко време, но той може да създаде преразпределение на електроните в един съседен атом или молекула, което на свой ред ще доведе до образуването на дипол в близкия до него атом. Този тип връзка се нарича **Ван-дер-Ваалсова връзка**. Втечняването и кристализацията (при ниски температури) на инертните газове и други симетрични молекули, такива като H_2 , Cl_2 е възможно благодарение на този тип връзка между атомите в кристалната решетка.

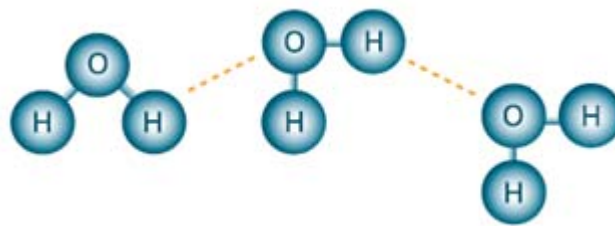
Водородна връзка – тя е особен вид химична връзка. В нея взема участие водородният атом, който задължително е свързан ковалентно с възможно по-електроотрицателен елемент, например на флуора (F), кислорода (O) и азота (N), който има свободна електронна двойка. Между водородния атом от едната молекула и по-електроотрицателния атом от друга молекула, притежаващ свободна електронна двойка възниква водородна връзка. Тя се означава с пунктир.



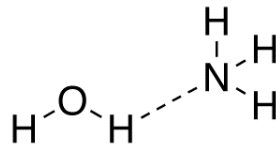
Съществуват два вида водородни връзки:

междумолекулна водородна връзка - възниква между еднакви или различни молекули

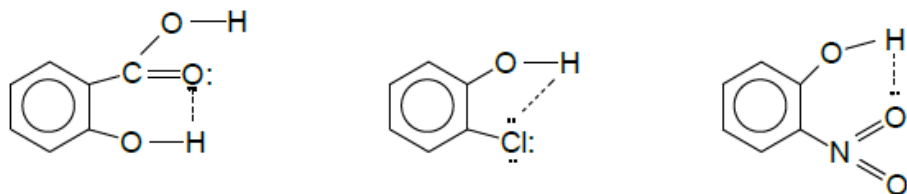
Между молекули на водата



Между молекули на водата и амоняка



вътрешномолекулна водородна връзка - възниква в една молекула



Енергията, която се отделя при образуването на водородната връзка е около 10 пъти по-малка от енергията на образуването на обикновените химични връзки, което обуславя и нейната по-малка здравина. Енергията на водородната връзка може да достигне до 50 kJ/mol. Това обяснява някои по-особени свойства веществата.