

路易斯模型分子和离子

1 分子和离子：原子的关联

1.1稳定性多原子结构

的原子连接在一起以形成由这些力的分子或离子 分子。

- 分子 是一个实体 多元 (由多个原子) 中性。
- 离子 是一个实体 加载。 如果这笔扣款 积极， 我们谈论 阳离子; 如果是 负 我们讲的 阴离子。

存在的，以分子内力维护这些多元的结构，因为它们更稳定彼此个别原子。这种稳定性EDI? 多原子这些特征是 能源 结合。 这个量是能量的打破两个原子之间的键所需的量度的一个分子或离子。

他们呼吁 结合能 的能量来提供材料的一种摩尔打破化学键两个原子A和B之间的所有物质处于气相。它记 d_{AB} 和在千焦表示 · 摩尔⁻¹。它与下面的转化有关：

$$- \Delta H_{(g)} = A_{(g)} + \Delta H_{(g)}$$

的双原子分子的结合能的例子

链接	H_2	O_2	N_2	F_2	氯 ₂	HF盐酸氢溴酸
d_{AB} (千焦 · 摩尔 ⁻¹)	432	494	942	155	240	565 428 362

注意： 值得注意的是，两个原子之间的结合能为几百的顺序千焦 · 摩尔⁻¹，它变化显按照问题的路线着地。

1.2化学键

的想法 刘易斯 是的 价电子的交换 原子是力的基础帧内分子连接原子一起在EDI? 该分子。它提出来象征这个 债券 由两个原子A和B之间的水平线：AB。

两个原子A和B之间的化学键是由于 共享两个电子 和 AB：由两个碳之间的水平线表示。

统治字节1.3

这样做的原因特别稳定EDI? 这些分子可以通过先观察理解单原子稳定的化合物。

单原子稳定的化合物： 稳定的单原子化合物在自然界丰富，例如：氦气氦气，氯的氯离子 钠离子娜

⁺，钙离子钙₂⁺。

所有这些化合物具有 $2 + 6 = 8$ 价电子。这组被称为 字节 和火柴到底层 s 和 p 充分满足，这是一个稳定因素，因为我们在看到以前课程。

稳定的分子的化合物：考虑到化学键作为共享两个电子和以下所设计的特殊的电子构型的观察单原子的化合物中，我们可以提供 八位规则：

对于由碳块的最稳定的分子化合物 s 和 p ，每个原子分享尽可能多的电子所必需的环绕声字节。

这条规则是不具有普遍性，但它也描述了许多EDI的建设？这些多元。它包含了重要的例外情况：

化合物 德？cient 电子其中原子通过电子的小于一个八比特组所包围。

化合物 高价 到原子被电子的多于一个字节包围。

注意：所述CLASSI的第一周期的周期表（H和He）的原子？不服从八位规则，但以 治对唱，因为这些原子的价电子层是层 1 s 而不能只包含两个电子。

2 路易斯模型分子和离子

该模型 刘易斯 特别适合于元件的块 s 和 p 。当然，我们可以描述元件的块 d 和 f 用这个模型，但是它不占化学性质令人满意这些元素的和物理性能。

2.1符号 刘易斯

在分子中，块的各原子 s 和 p 有四个原子orbitales可以含有零个，一个或两个电子。两个原子之间共享两个电子（偶极子）被表示为我们已经看到，这两个原子之间的线。但是，所有的价电子不能标志着以这样的方式有些不共享的，有些可能是独自一人在轨道，和一定的轨道在价壳可以是空的。

2.2电子和价对总数

的表示 刘易斯 的分子或离子模型的所有价电子它的每一个原子和电子的由于离子的电荷。因此，我们必须以计数开始。

是通式的分子或离子 $[X]^{z-}$ 由 \bar{n} 原子X 和轴承负载总Z（对于阳离子，Z < 0为阴离子，并且z = 0的分子Z > 0）。

例如，对于碳酸根离子 CO_3^{2-} $X_1 = C, X_2 = O, X_3 = O, X_4 = O$ 且z = -2。

让 \bar{n}_v 原子X的价电子数 \bar{n}_v 总数 价电子 的所述分子或离子和 P_v 总数 对价 分子。然后我们有：

$$\bar{n}_v = \sum_{i=1}^{\bar{n}} \bar{n}_v(i) - Z$$

$$P_v = E[1 - \sum_{i=1}^{\bar{n}} \bar{n}_v(i) - Z]$$

哪里 $E[X]$ 是整数部分 X 。

2.3 表示 路易斯 单分子

的表示 路易斯 表示所有价电子，以便满足字节的规则
对于所有原子（氢任选对唱规则），在可能的范围。

它应该，但是，给一个表现？分子的忠实，要知道原子链
在这种分子。一般而言，该序列不能由该模型预测 路易斯 但能
通过光谱和化学表征技术来确定。

例如：用于水分子 H_2O

序列是 $\text{H}-\text{O}-\text{H}$ （这是唯一的方法）

该分子具有 $PV=4$ 对价

每个氢原子通过一对价的包围，以满足 规则对唱

的氧原子被两个结合对侧翼，因此必须补充有两个非接合对
（即，不共享）。因此，该氧原子不超过 八位规则。

现在，我们将根据模型研究更复杂的分子的代表性 路易斯。

2.4 多倍连接

例如一氧化二氮 N_2O 他有 $PV=(5 \times 2)/2 = 5$ 价对分发。一对
电子连接的两个氮原子，仍分布在四个两个原子。这将允许
不能满足两个氮原子的八比特组规则。

此外，经验表明，氮-氮键（ $d=110$ 分， $d=942$ 千焦·摩尔⁻¹）是多少
更短和更二？崇拜打破氮-氮键，例如（ $d=199$ 分， $d=240$ 千焦·摩尔⁻¹）。出于这个原因，我们可以表示出多于一对球阀+的分子
trons 联分子中的两个原子：

我们谈论 双键 当原子被由两对电子的结合（2双
粘合剂）

和 三键 当由三对电子（三个结合对）的约束。

因此，对于一氧化二氮，一个2 N的每个氮原子与该字节的规则符合，三对必须由两个原子共享。氮分子中的氮-氮键是合格？埃德 债券三倍。

原子间距离 d 并结合能 d 在一些分子

分子	$\text{}^{\text{h}}_3\text{C}-\text{CH}_3$	$\text{}^{\text{h}}_2\text{C}=\text{CH}_2$	$\text{HC}\equiv\text{CH}$	$\text{}^{\text{h}}_2\text{N}-\text{NH}_2$	$\text{HN}=\text{NH}$	$\text{---}\text{}^{\text{h}}$
d/PM	154	134	120	145	125	110
$d/\text{千焦}\cdot\text{摩尔}^{-1}$	346	602	835	167	418	942

注意：该 接合指数，记录 两个原子之间的化学键是失望或作为电子对数量的共享，以确保两个原子之间的连接。这将关联接合索引几何和能量的标准：当索引增大两者之间的结合破，原子间距离 d 降低，结合能 d 增加。

2.5化合物失望cient电子

现在让我们BH三氢化硼的例子。这种分子具有 $\tilde{n}v=3+3\times1=6$ 价电子，所以三价对。这个数字是INSU？Cient到硼原子可以尊重八位规则。只有三个轨道硼所以占用。它仍然是一个空轨道上，谁由象征电子间隙。

2.6正式收费

2.6.1案例单原子离子

离子也可通过模型描述 刘易斯 引进的电荷+或-。从而氯化物阴离子具有 $\tilde{n}v=7-(-1)=8$ 价电子，或4对化合价的。

对于这种表示 刘易斯 有趣的是，引进的概念 正式指控，制造考虑到EDI内的负载分配的？这个多元。例如，在碳酸根离子的情况下 CO_3^{2-} ，由此产生的问题，以原子数，而不是结构作为一个整体分配负载。

2.6.2计算正式指控 $\varphi_F(X)$ 一个原子X

这种过剩或该模具？相关链接电子被建模为在的COM的原子被完全局部构成。该模型 刘易斯 受让人 正式指控 EDI的原子？这个多元，比较单原子的价电子数 $\tilde{n}v$ 价电子数 $\tilde{n}v_M$ 已经包围原子该分子中。

在此计数，孤对被认为是完全属于原子，并具有因此，对于两个电子。与此相反，孤对被两个原子之间共享，因此仅帐户所讨论的原子的电子。请注意，正因为如此，计为正式收费的计算是迪？erent倒计时到八位规则。

该 正式指控的数 在分子或离子的X原子是整数 $\zeta_F(X)$ 这样
那 $\zeta_F(X) = N_V(X) - \tilde{n}_{VM}(X)$ 。

在一个分子2.6.3电荷分离

即使分子不带电，可能有必要表现出正式收费
在代表 路易斯 分子。例如，在硝酸HNO₃ 这三个原子
的氧键合到中心氮原子和氢原子键合至氧原子。

尽管硝酸不是离子，该表示 路易斯 涉及到正式收费，
其总和是零当然的。这种情况被称为 电荷分离。 它一般要避免
考虑该结构的稳定性能量上不利的，但有时无法避免的，
如硝酸的情况下。请注意，以获得代表 路易斯 满意的，
必须尽量减少结构中的正式指控的数量。