

CH2.原子結構與鍵結

背

1. 電子. 質子電荷: $1.6 \times 10^{-19} \text{ C}$
2. 質子. 中子質量: $1.67 \times 10^{-27} \text{ kg}$
3. 電子質量: $9.11 \times 10^{-31} \text{ kg}$

搞清楚

化學元素由原子序(Z)來 characterized，即原子核中質子的個數
由 H 的 1 → uranium 的 92，為自然發生最高的元素
atomic mass (A) → 由原子核中，質子和中子的質量和來表示，由於同一原子中子數(N)可能不同，→ isotopes → atomic weight 為自然存在的同位素 atomic mass 之平均重量(利用 amu 來計算)
atomic mass unit → 定義為 C12 atomic mass 的 1/12(原子和中子的質量稍大於 1!!)
→ A 約等於 Z+N
→ 1 amu/atom (or molecule) = 1 g/mol (注意值是一樣低)
* 1amu 有多少 g? 避免一時出槌的方法就是用
→ 1amu/atom = 1g/mol → g/amu = mol/atom = $1/(6 \times 10^{23})$
* 為啥 atomic weight 都不是整數? 1. 因為他是同位素平均值 2. 除了 C12，其它原子 atomic mass 都不是整數

原子模型

要討論 systems of atomic and subatomic entities → 量子力學
早期產物 → 波爾模型 → 假設電子於不連續的軌道圍繞原子和轉動，其位置可依據其軌道來清楚定義
另一原理 → 能量量子化 → energy state/state(電子被允許的能量值)
波爾不好用 → wave-mechanical model → wave-like and particle-like → 位置不再看成不連續軌道移動的粒子，而是不同位置中出現電子的機率!!
* 看哪個好討論問題就用哪個
* 重申一次
波爾模型 電子於不連續的軌道圍繞原子和轉動，能量量子化 → shell
wave-mechanical model 機率分布，能量量子化 → shell.subshell(4 個量子數)

- 2.4 (a) Two important quantum-mechanical concepts associated with the Bohr model of the atom are that electrons are particles moving in discrete orbitals, and electron energy is quantized into shells.
- (b) Two important refinements resulting from the wave-mechanical atomic model are that electron position is described in terms of a probability distribution, and electron energy is quantized into both shells and subshells--each electron is characterized by four quantum numbers.

原子鍵結

鍵結力.鍵結能

吸引力為正.排斥力為負

從無限遠把原子拉到原子間距離 r

吸引能為負.排斥能為正

*大部分原子的平衡距離→約 0.3nm

計算題(離子鍵)

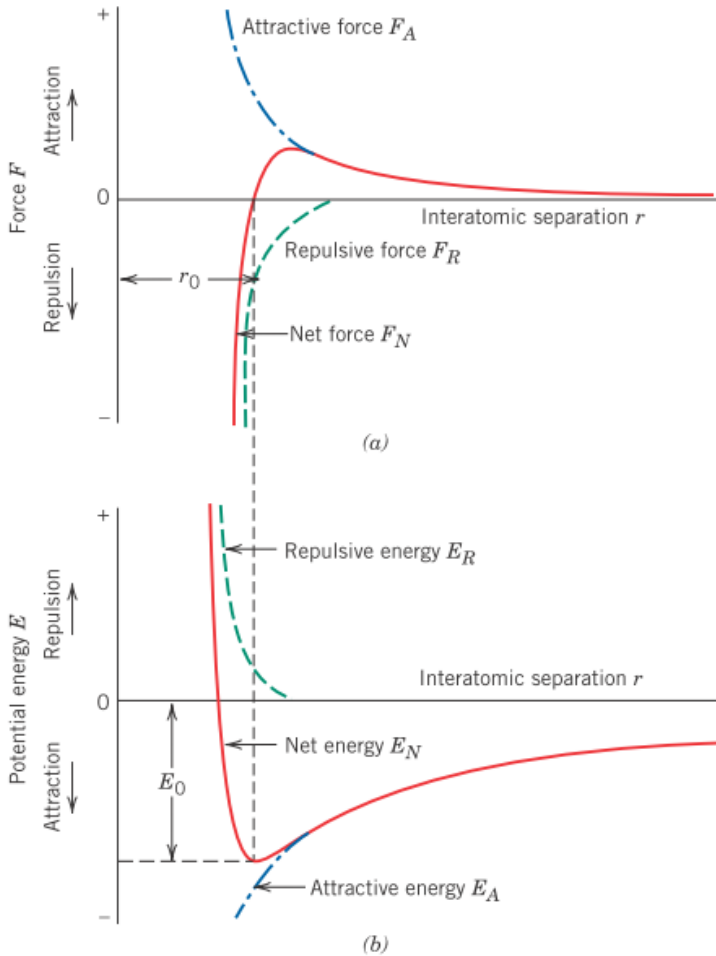
$$E_A = -\frac{A}{r} \quad E_R = \frac{B}{r^n} \quad (n \text{ 值約 } 8)$$

$$E_N = E_A + E_R$$

然後對 r 微分=0

→得平衡距離 r_0 (其實就是淨力=0 的位置)

→平衡距離代回→得鍵結能 E_0 (能量最低點,代表要將兩原子分開到無窮遠所需的能量)



Primary interatomic bonding

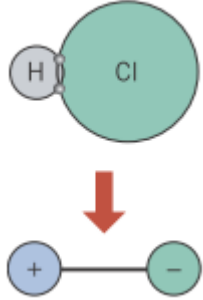
離子鍵	<ol style="list-style-type: none"> 1.捨棄或接收電子成為鈍氣組態，也就是離子 2.庫倫力.無方向性 3.陶瓷的主要鍵結，硬，脆，電.熱絕緣體
共價鍵	<ol style="list-style-type: none"> 1.共用電子，具有方向性 2.很少有純離子鍵或純共價鍵，程度取決於陰電性 $\% \text{ ionic character} = \{1 - \exp[-(0.25)(X_A - X_B)^2]\} \times 100$
金屬鍵	<ol style="list-style-type: none"> 1.價電子視為屬於整體金屬，形成電子雲 2.剩下的非價電子和原子核→ion cores 3.無方向性，類似自由電子把離子核 glue 在一起

次要鍵結

鍵結能約 10kJ/mol (0.1eV/atom) \leftarrow very small

來源 \rightarrow dipole

氫鍵是一個特別的形式

<u>Fluctuating</u> Induced Dipole Bonds	電子對稱性，因受振動而產生微小短暫的 distortion \rightarrow dipole，為凡德瓦的一種形式，是 weakest 的鍵結 EX. 對稱性分子 H ₂ 氣 Cl ₂ 氣，因為主要是這種形式的鍵結，溶沸點很低!
<u>Polar Molecule</u> -Induced Dipole Bonds	這種鍵結比 <u>Fluctuating</u> 的還大 
Permanent Dipole Bonds	明顯比以上都還強 H—F, H—O, or H—N bond \rightarrow 氫鍵 鍵能約 51kJ/mol . 0.52eV/molecule 水和 HF 溶沸點高的原因 水再固體(冰)因為氫鍵形成四方體結構，較 open，所以密度反而較小

2.5 The n quantum number designates the electron shell.

The l quantum number designates the electron subshell.

The m_l quantum number designates the number of electron states in each electron subshell.

The m_s quantum number designates the spin moment on each electron.

2.17 (a) The main differences between the various forms of primary bonding are:

Ionic--there is electrostatic attraction between oppositely charged ions.

Covalent--there is electron sharing between two adjacent atoms such that each atom assumes a stable electron configuration.

Metallic--the positively charged ion cores are shielded from one another, and also "glued" together by the sea of valence electrons.

(b) The Pauli exclusion principle states that each electron state can hold no more than two electrons, which must have opposite spins.