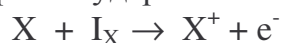


Потенциалы ионизации

Первым потенциалом ионизации элемента X (I_X) называют минимальное значение энергии, необходимое для того, чтобы от изолированного нейтрального атома этого элемента в его основном электронном состоянии удалить наименее прочно удерживаемый электрон:



Если предположить, что при отрыве электрона с внешней орбитали атома не происходит изменения других орбиталей, то потенциал ионизации можно полагать численно равным энергии самой верхней занятой орбитали. Этот результат известен под именем теоремы *Купманса*. В действительности это предположение строго не выполняется, и более правильно потенциалы ионизации следует вычислять как разность полных энергий катиона и нейтрального атома. Однако вычисления при помощи теоремы Купманса оказываются хорошим приближением к истинным потенциалам ионизации и поэтому из-за простоты вычислений часто используются как оценки.

В таблице и на рис.1 приведены рассчитанные и определенные из спектроскопических данных [1] потенциалы ионизации элементов I, II и III периодов. Использовались следующие методы расчета: расчет 1 – по теореме Купманса, расчет 2 – как разность полных энергий нейтрального атома и катиона (+1) методом Хартри Фока (базис 3-21G), расчет 3 – методом Хартри Фока с учетом поправок теории возмущений Меллера-Плесета 2-го порядка (MP2).

Табл.1 Потенциалы ионизации атомов I, II и III периодов, в

N	Элемент	Эксп	Расчет	
			Т. Купманса	ΔE
1	H	13.60	13.50	13.50
2	He	****	****	****
3	Li	****	****	****
4	Be	9.32	8.32	8.08
5	B	8.30	8.36	7.98
6	C	11.26	9.27	10.08
7	N	****	****	****
8	O	****	****	****
9	F	17.42	17.30	15.41
10	Ne	21.56	21.50	19.28
11	Na	5.14	4.91	4.91
12	Mg	7.65	6.85	6.60
13	Al	5.99	5.73	5.52
14	Si	8.158.	8.06	7.68
15	P	10.49	10.62	10.07
16	S	10.36	9.93	9.13
17	Cl	12.96	12.86	11.85
18	Ar	15.76	16.02	14.82

[1] В.И.Минкин, Б.Я.Симкин, Р.М.Миняев Теория строения молекул, Ростов-на-Дону, 1997.

Вычисленные и экспериментальные потенциалы ионизации

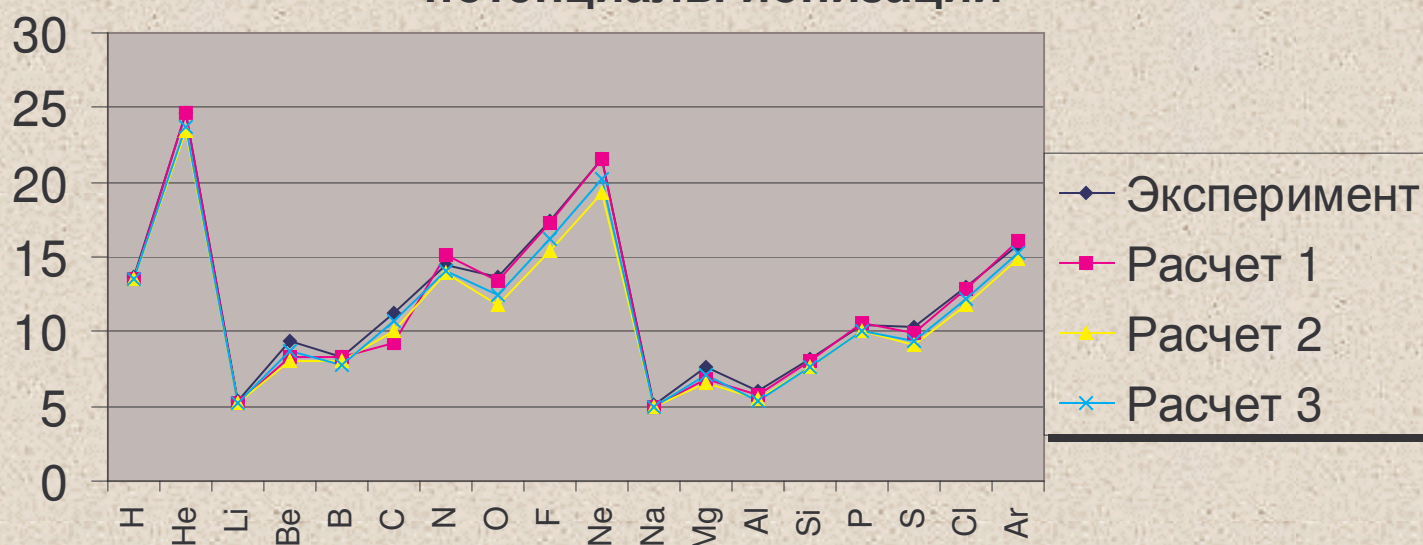


Рис.1 Потенциалы ионизации элементов I – III периодов.

Задание 5

В таблице 1 приведены потенциалы ионизации атомов элементов I и II периодов, определенные экспериментально и рассчитанные двумя способами: по теореме Купманса и как разность полных энергий атома и катиона. Заполните пропуски в таблице. Для этого рассчитайте полные энергии атомов и ионов (Setup - ab initio, basis 3-21G, **options...**; Compute - Single Point). Выпишите полную энергию атома. Выберите пункт меню Compute - Orbitals. Посмотрите электронную конфигурацию атома. Выпишите энергию верхней занятой орбитали. Посмотрите двумерные и трехмерные графики изоуровней нескольких атомных орбиталей и электронной плотности. Вернитесь к пункту меню Setup – options, измените установки для расчета катиона и рассчитайте его энергию (Compute - Orbitals). Рассчитайте потенциал ионизации как разность энергий катиона и атома. (1ккал/моль=0.043363эв). Постройте график (диаграмму) зависимости потенциалов ионизации от атомного номера (символа) элемента.

Отчет о работе: документ WORD или EXCEL, содержащий: 1) Таблицу экспериментальных и рассчитанных двумя способами значений потенциалов ионизации атомов элементов I и II периодов. 2) График (диаграмму) зависимости потенциалов ионизации от атомного номера (символа) элемента.