

## 一、斯达克效应

原子的能级和光谱在很强的静电场（如 $10^7 V/m$ ）中分裂或移位的现象。电偶极子在外电场中的附加能量

$$\Delta E = -\vec{p} \cdot \vec{E}$$

(1) 如果原子具有固有的电偶极矩，则附加能量与电场强度成正比，称为线性斯达克效应。

(2) 若由于外电场的作用，原子中的电荷分布发生微小变化而产生感生的电偶极矩。感生电偶极矩在外电场中的附加能量

$$\Delta E = -\vec{p} \cdot \vec{E} = -\gamma E^2$$

与电场强度的平方成正比，称为平方斯达克效应或二级斯达克效应。

## 二、化学键和键能

♣ 原子由于相互结合力而构成分子。原子间有不同类型的结合，这称为**化学键**。

♣ 分子在形成一对键时所放出的能量或拆散一对键时需要吸收的能量称为**键能**。键能的大小可在实验中测定，一般为几个电子伏。

♣ 化学键的本质是带电粒子之间的库仑相互作用。**参与化学键形成的主要是原子的价电子**，而内部满壳层上的电子几乎不起作用。

### 三、离子键和共价键（原子键）

♣ 通常把正负离子之间由库仑引力而化合的方式称为离子键。

由离子键形成的分子通常都是极性分子，有永久的电偶极矩。

♣ 一对自旋相反为两个核所共有的电子形成一个共价键。

同核双原子分子，基本上是纯共价键，分子没有永久的电偶极矩，是非极性分子。

但不同类原子组成的共价分子，就会有电偶极矩，是极性分子。

♣ 原子轨道的线性组合近似即 LCAO：氢分子离子中电子的轨道波函数可以近似地用中心位于两个质子上的两个  $1s$  轨道波函数的线性组合来描述。

## 四、两个概念

- ♣ **电子亲和势**：中性原子吸收一个电子所释放的能量。
- ♣ **电离度**：电偶极矩的测量值  $p_{\text{exp}}$  与理论值  $er_0$  之比，表示离子键所占的比率。

大部分为离子键的分子称为离子分子，而大部分为共价键的分子为共价分子。
- ♣ 对于同核双原子分子，基本上是纯共价键。对于异核的双原子分子，就不可能有纯共价键，因为两个核周围的电荷分布密度不同；也不可能有纯离子键，多少总有一些共价键成分。

## 五、电负性和化学键

- ♣ 电负性差别很大的原子形成分子时，通常通过交换电子而以离子键结合，而电负性差别很小或相同（例如同核双原子分子）的原子则通常通过共用电子而以共价键结合。
- ♣ 原子的电负性  $X$  可用它的电离能  $I$  和电子亲和能（势） $E$  之和的  $1/2$  来表示。