«Строение вещества»

Лекция № 1

Дисциплина «Общая неорганическая химия»

для студентов заочного отделения

Лектор: к.т.н., Мачехина Ксения Игоревна

* Рекомендуемая литература

1. Коровин Н.В. Общая химия - 2007. – 557 с.

2. Суворов А.В., Никольский А.Б. Общая химия – СПб.: Химия, 1997. – 624 с.

3. Ахметов Н.С. Общая и неорганическая химия: Учебник. – М.: Высш. шк., 2006. – 743 с.

4. Зайцев О.С. Общая химия – М.: Высш. шк., 2007. -557 с.

* План лекции

1. Экспериментальные основы теории строения атома
2. Квантовые числа.
3. Порядок заполнения атомных орбиталей электронами.
4. Периодический закон, периодическая система элементов.
5. Периодичность изменения свойств элементов.
6. Общие сведения о химической связи.
7. Ковалентная связь.
8. Ионная связь.
9. Металлическая связь.
10. Водородная связь.
11. Межмолекулярные связи.

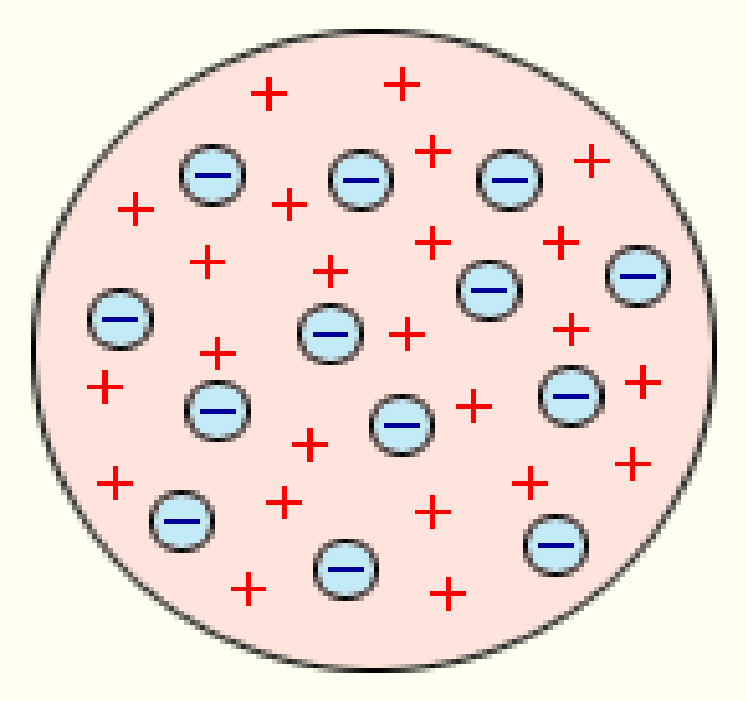
«Истина, конечно, одна и вечна, но … познается и доступна только по частям, мало-помалу, а не разом в общем своем целом и … пути для отыскания частей истины многообразны».

Д.И. Менделеев

1. Экспериментальные основы теории строения атома

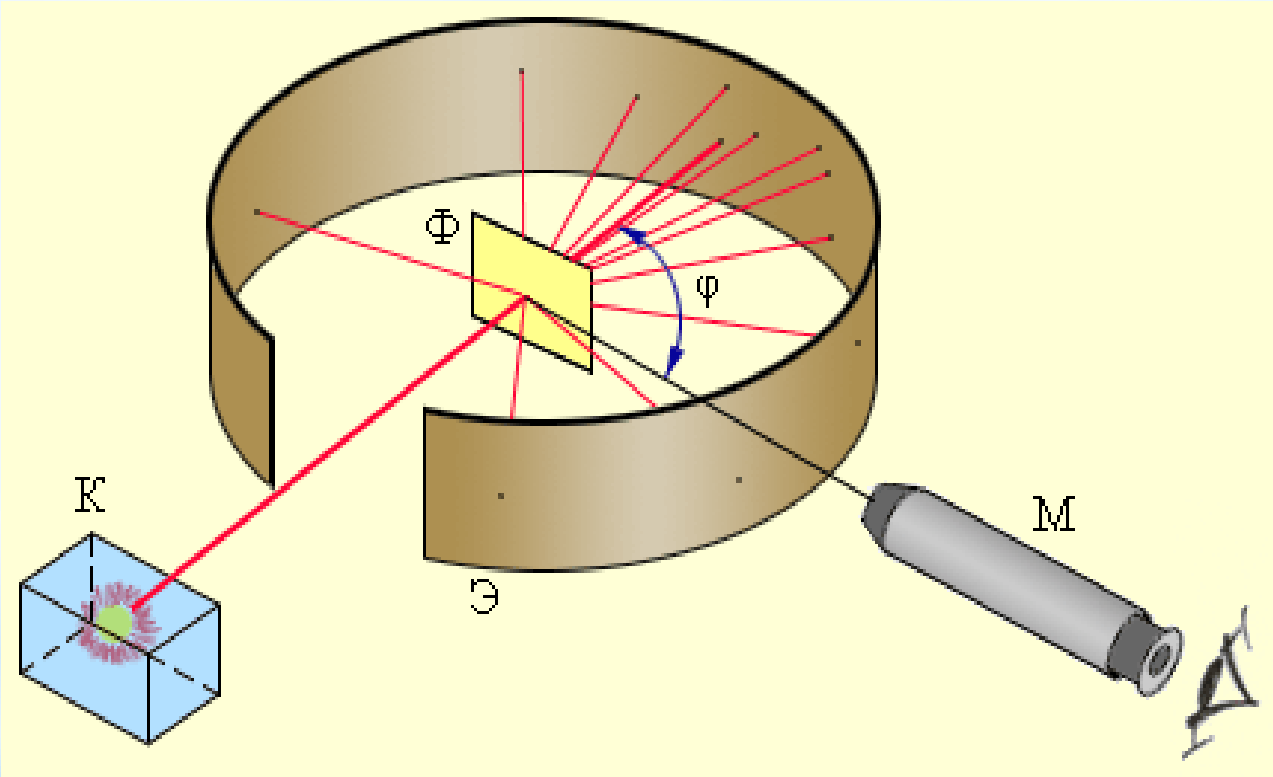
Дата	Событие
1897 г. *(Англия)*	**Джон Томсон** открыл электрон и оценил его массу. $m_e=9{,}1\cdot10^{-31}$ кг.
1909 г. *(Америка)*	**Роберт Малликен** определил заряд электрона $q_e=1{,}6\cdot10^{-19}$Кл
1910 г. *(Англия)*	**Эрнест Резерфорд** предложил ядерную планетарную модель атома.
1913 г. *(Дания)*	**Нильс Бор** предложил модель строения атома водорода.
1924 г. *(Франция)*	**Луи де Бройль** выдвинул предположение о корпускулярно-волновых свойствах электрона. Электрон является и волной и частицей.
1926 г. *(Германия)*	**Вернер Гейзенберг** постулировал принцип неопределенности.
1926 г. *(Австрия)*	**Эрвин Шредингер** установил математическую модель, описывающую поведение электрона в атоме. Уравнение Шредингера показало, что **вероятность нахождения электрона вблизи ядра зависит от трех квантовых чисел**.

Модель атома Джона Томсона



«Пудинг с изюмом»

Схема опыта Резерфорда по рассеянию α-частиц



К – свинцовый контейнер с радиоактивным веществом, Э – экран, покрытый сернистым цинком, Ф – золотая фольга, М – микроскоп

Уравнение Шредингера

$$\psi E = -\frac{h^2}{8\pi^2 m}\left(\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}\right) + \psi U$$

m – масса электрона,

h – постоянна Планка,

$2\pi^2 m$ – кинетическая энергия электрона,

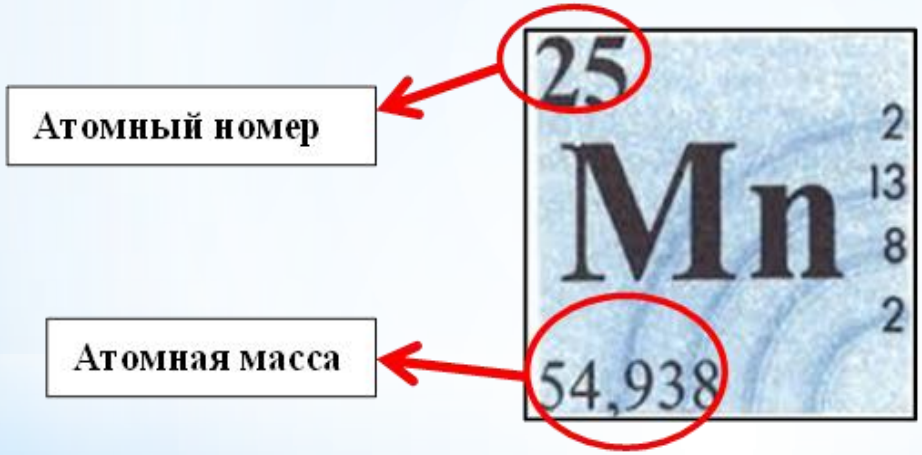
x, y, z – координаты относительно центра ядра.

1. Экспериментальные основы теории строения атома

* **Атом** - это электронейтральная микросистема, состоящая из положительно заряженного ядра и соответствующего числа электронов.

1. Экспериментальные основы теории строения атома

Атом марганца



состоит из:

ядра → **протонов** – положительных частиц = 25
→ **нейтронов** – незаряженных частиц = 55-25=30

электронов – отрицательных частиц = 25

2. Квантовые числа

<u>Главное квантовое число</u> (n)

– характеризует энергию электрона в атоме, размеры электронного облака;

– определяет число энергетических уровней, соответствует номеру периода в периодической системе;

– изменяется от 1 до ∞.

Уровни (оболочки) имеют буквенное обозначение:

K (n=1), L(n=2), M(n=3), N(n=4), Q(n=5).

2. Квантовые числа

<u>Орбитальное квантовое число</u> (*l*)

– определяет форму электронного облака и принимает значения от 0 до (n-1).

Подуровень	s	p	d	f
Орбитальное квантовое число, *l*	0	1	2	3

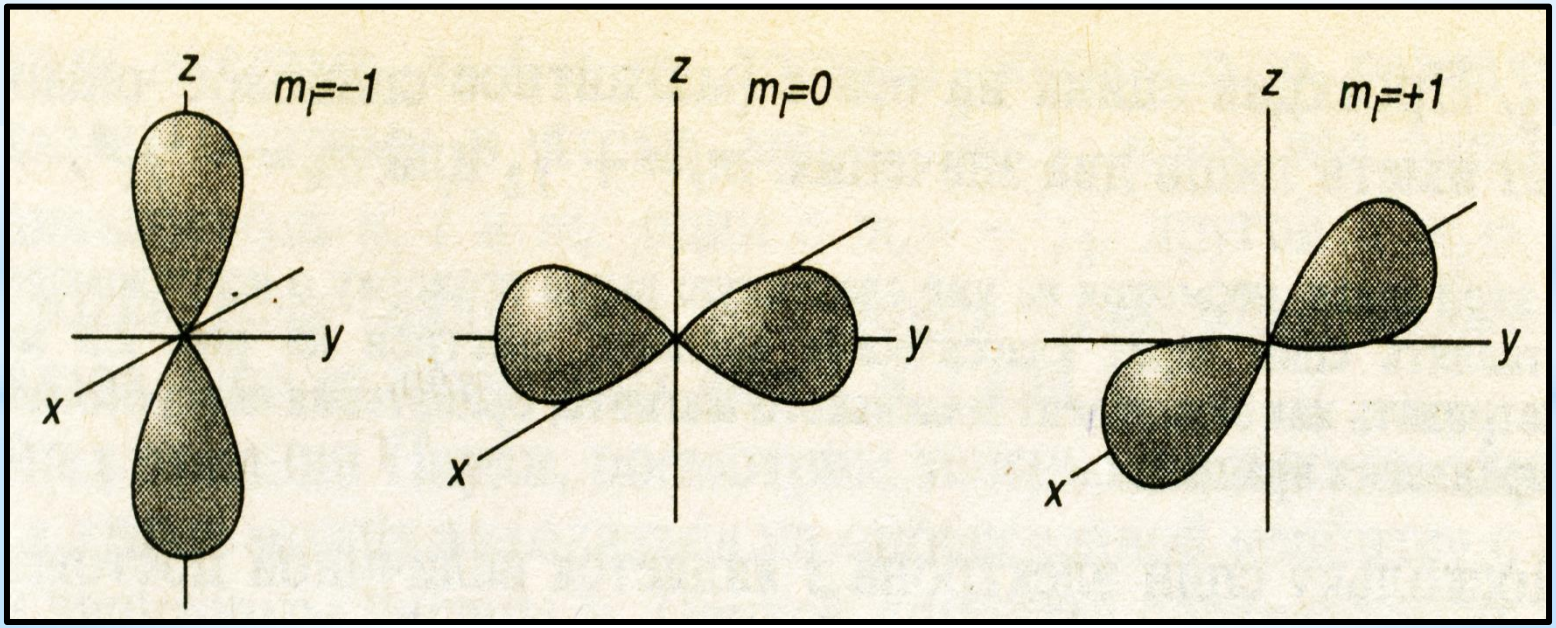
2. Квантовые числа

Уровень	*n*	*Подуровень*	
		Буквенное обозначение	*Значение l*
K	*1*	*s*	*0*
L	*2*	*s*	*0*
		p	*1*
M	*3*	*s*	*0*
		p	*1*
		d	*2*
N	*4*	*s*	*0*
		p	*1*
		d	*2*
		f	*3*

2. Квантовые числа

3) **<u>Магнитное квантовое число</u> (m_l)**

– характеризует ориентацию орбитали в пространстве и принимает целочисленные значения от $-l$ до $+l$, включая 0.



2. Квантовые числа

Уровень	n	Подуровень		Орбитали, m_l	Число АО
		Буквенное обозначение	Значение l		
K	1	s	0	0	**1**
L	2	s	0	0	**1**
		p	1	+1,0,-1	**3**
M	3	s	0	0	**1**
		p	1	+1,0,-1	**3**
		d	2	+2,+1,0,-1,-2	**5**
N	4	s	0	0	**1**
		p	1	+1,0,-1	**3**
		d	2	+2,+1,0,-1,-2	**5**
		f	3	+3,+2,+1,0,-1,-2,-3	**7**

2. Квантовые числа

4) **<u>Спиновое квантовое число</u> (m_s)**

– характеризует собственное движение электрона в пространстве, является векторной величиной и принимает значения:

$\boxed{\uparrow}$ $+\frac{1}{2}$ или $\boxed{\downarrow}$ $-\frac{1}{2}$

3. Порядок заполнения атомных орбиталей (АО) электронами

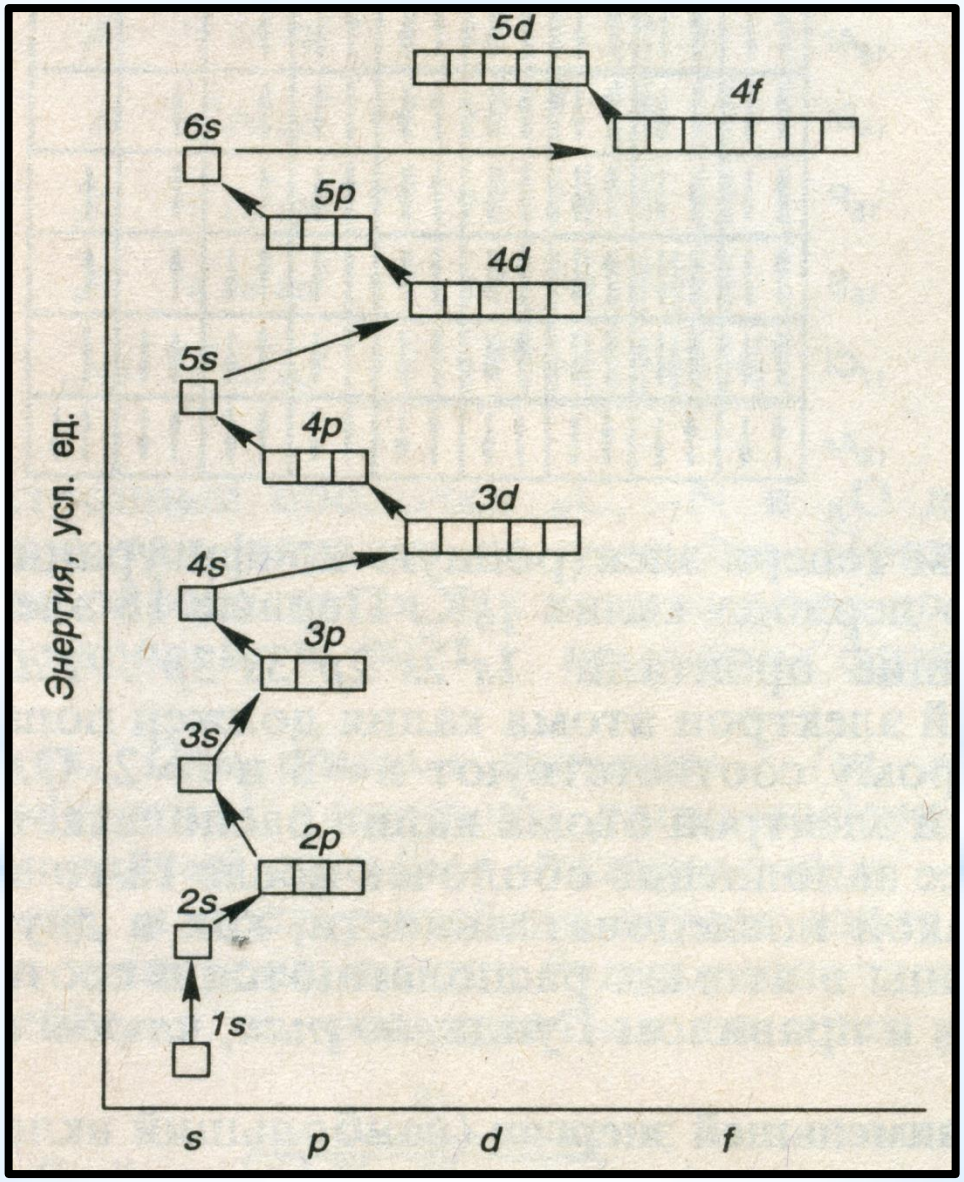
*Принцип наименьшей энергии:

в основном состоянии заполняются орбитали в порядке повышения уровня энергии орбиталей.

*Правило В. М. Клечковского:

увеличение энергии и соответственно заполнение орбиталей происходит в порядке возрастания суммы квантовых чисел ***n+l***, а при равной сумме (**n+*l***) - в порядке возрастания числа **n**.

3. Порядок заполнения АО электронами



3. Порядок заполнения АО электронами

Правило «Стрелки»

Энергия подуровней растет в ряду:

$1s < 2s < 2p < 3s < 3p < 4s \approx 3d < 4p < 5s \approx 4d < 5p < 6s < 4f \approx 5d < 6p < 7s < 5f \approx 6d \ldots$

3. Порядок заполнения АО электронами

***Принцип «запрета» Паули:**

в атоме не может быть 2-х электронов с одинаковым набором 4-х квантовых чисел.

*** Правило Гунда:**

при заполнении электронами подуровня модуль суммарного спинового числа подуровня должен быть максимальным.

3. Порядок заполнения АО электронами

$^{34}_{79}Se$ (p = 34, e = 34)

*Электронная формула (согласно правилу Клечковского)

$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 \mathbf{3d^{10} 4p^4}$

Сумма n+*l* : 1 2 3 3 4 4 5 5

3<4

*Сокращенная электронная формула : **Se [Ar]$4s^2 3d^{10} 4p^4$**

*Формула валентных электронов : **Se..$4s^2 4p^4$**

4. Периодический закон, периодическая система элементов

(*открыт в 1869 году Д.И. Менделеевым*)

«свойства химических элементов, а также формы и свойства образуемых ими простых веществ и соединений находятся в периодической зависимости от величины зарядов ядер их атомов»

4. Периодический закон, периодическая система элементов

Вариант короткопериодной формы

5. Периодичность изменения свойств элементов

- **Радиус атома (орбитальный) (r_a)** – это расстояние от центра ядра до внешнего максимума электронной плотности;

- **Энергия ионизации ($E_{ион}$)** – это энергия необходимая для отрыва электрона от атома.

- **Энергия сродства к электрону ($E_{ср}$)** – это энергия, которая выделяется или затрачивается при присоединении электрона к нейтральному атому.

- **Электроотрицательность (χ)** – способность атома смещать электронную плотность.

5. Периодичность изменения свойств элементов

		Группы элементов						
		I	II	III	IV	V	VI	VII
Периоды элементов	1	H						
	2	Li	Be	B	C	N	O	F
	3	Na	r	УМЕНЬШАЕТСЯ →				
	4	K	УВЕЛИЧ-СЯ ↓	æ	УВЕЛИЧИВАЕТСЯ →			
	5	Rb		УМЕН-СЯ ↓	$E_{ион}$	УВЕЛИЧИВАЕТСЯ →		
	6	Cs			УМЕН-СЯ ↓	$E_{ср}$	УВЕЛИЧИВАЕТСЯ →	
	7	Fr				УМЕН-СЯ ↓		

5. Периодичность изменения свойств элементов

Для главных подгрупп

№ группы	I	II	III	IV	V	VI	VII
Возможные степени окисления элементов **главной** подгруппы	+1	+2	+3	+4 +2 -4	+5 +3 +1 -3	+6 +4 +2 -2	+7 +5 +3 +1 -1

ИСКЛЮЧЕНИЯ: Фтор – проявляет степень окисления только -1. Кислород – проявляет степени окисления -1, -2, +1,+2. (H_2O_2, OF_2, O_2F_2). Водород – проявляет степени оксиления+1 и -1.

5. Периодичность изменения свойств элементов

Для побочных подгрупп

№ группы	I	II	III	IV	V	VI	VII
Возможные степени окисления элементов **побочной** подгруппы	+1	+2 +1	+3 +2 +1	+4 +3 +2 +1	+5 +4 +3 +2 +1	+6 +5 +4 +3 +2 +1	+7 +6 +5 +4 +3 +2 +1

ИСКЛЮЧЕНИЯ: Медь – проявляет степень окисления +2 (CuO), Золото – проявляет степень окисления +3 ($H[AuCl_4]$)

5.1 Периодическое изменение свойств соединений

Металлические свойства по группе сверху вниз **уменьшаются**

VII главная подгруппа	
F_2	светло-желтый газ
Cl_2	желто-зеленый газ
Br_2	красная жидкость
I_2	фиолетовые кристаллы, обладающие металлическим блеском

5. 1 Периодическое изменение свойств соединений

Изменение кислотно-основных свойств соединений **<u>в периоде</u>**

Na_2O	MgO	Al_2O_3	SiO_2	P_2O_5	SO_3	Cl_2O_7
основный	основный	амфот-ый	кислотный	кислотный	кислотный	кислотный
$NaOH$	**$Mg(OH)_2$**	**$Al(OH)_3$**	**H_2SiO_3**	**H_3PO_4**	**H_2SO_4**	**$HClO_4$**
щелочь	основание	амфот-ый гидроксид	слабая кислота	кислота средней силы	сильная кислота	очень сильная кислота

6. Общие сведения о химической связи

Химическая связь – взаимодействие атомов, обуславливающее устойчивость молекулы или кристалла как целого.

Химическая связь осуществляется s- и p-электронами внешнего и d-электронами предвнешнего слоя.

6. Общие сведения о химической связи

<u>Виды химической связи</u>

- Ковалентная
- Ионная
- Металлическая
- Водородная
- Межмолекулярные силы

(силы Ван-дер-Ваальса)

6. Общие сведения о химической связи

Характеристики

1) Длина ($\ell_{св}$) – межъядерное расстояние между двумя химическими связанными атомами

- Длина связи зависит от радиусов атомов:

	HF	HCl	HBr	HI
$\ell_{св.}$, нм	**0,092**	**0,128**	**0,142**	**0,162**

- Длина связи зависит от кратности связи:

Связь	C−C	−C=C−	−C≡C−
$\ell_{св.}$, нм	**0,154**	**0,134**	**0,120**

6. Общие сведения о химической связи

2) Энергия – энергия, затрачиваемая на разрыв химической связи в кДж/моль

Чем больше длина связи, тем меньше её энергия.

	HF	**HCl**	**HBr**	**HI**
$\ell_{св.}$, нм	0,092	0,128	0,142	0,162
$E_{св}$, кДж/моль	536	432	360	299

6. Общие сведения о химической связи

3) Валентный угол – угол между связями, которые образуют атом в молекуле

Cl – Be – Cl **H – O – H**

$\angle 180^o$ $\angle 104{,}5^o$

4) Полярность связи – смещение электронной плотности к более электроотрицательному атому

7. Ковалентная связь

- это химическая связь, образованная путем обобществления электронов двумя атомами.

$E_{св}$ = **100-800 кДж/моль**

Два механизма образования ковалентной хим. связи:

- метод валентных связей (ВС)
- метод молекулярных орбиталей (МО).

7. Ковалентная связь

Метод валентных связей

Обобществление электронов происходит таким образом, что в пространстве между атомами возникает повышенная электронная плотность, обеспечивающая их связь.

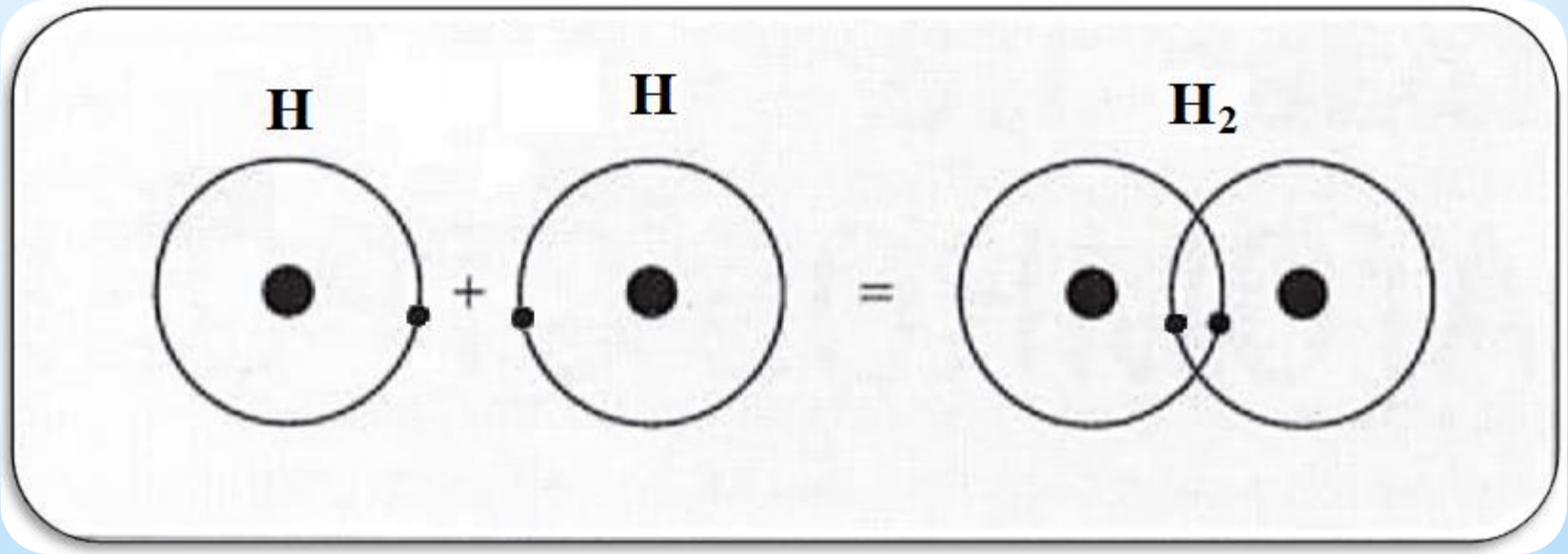
7. Ковалентная связь

Основные положения метода ВС

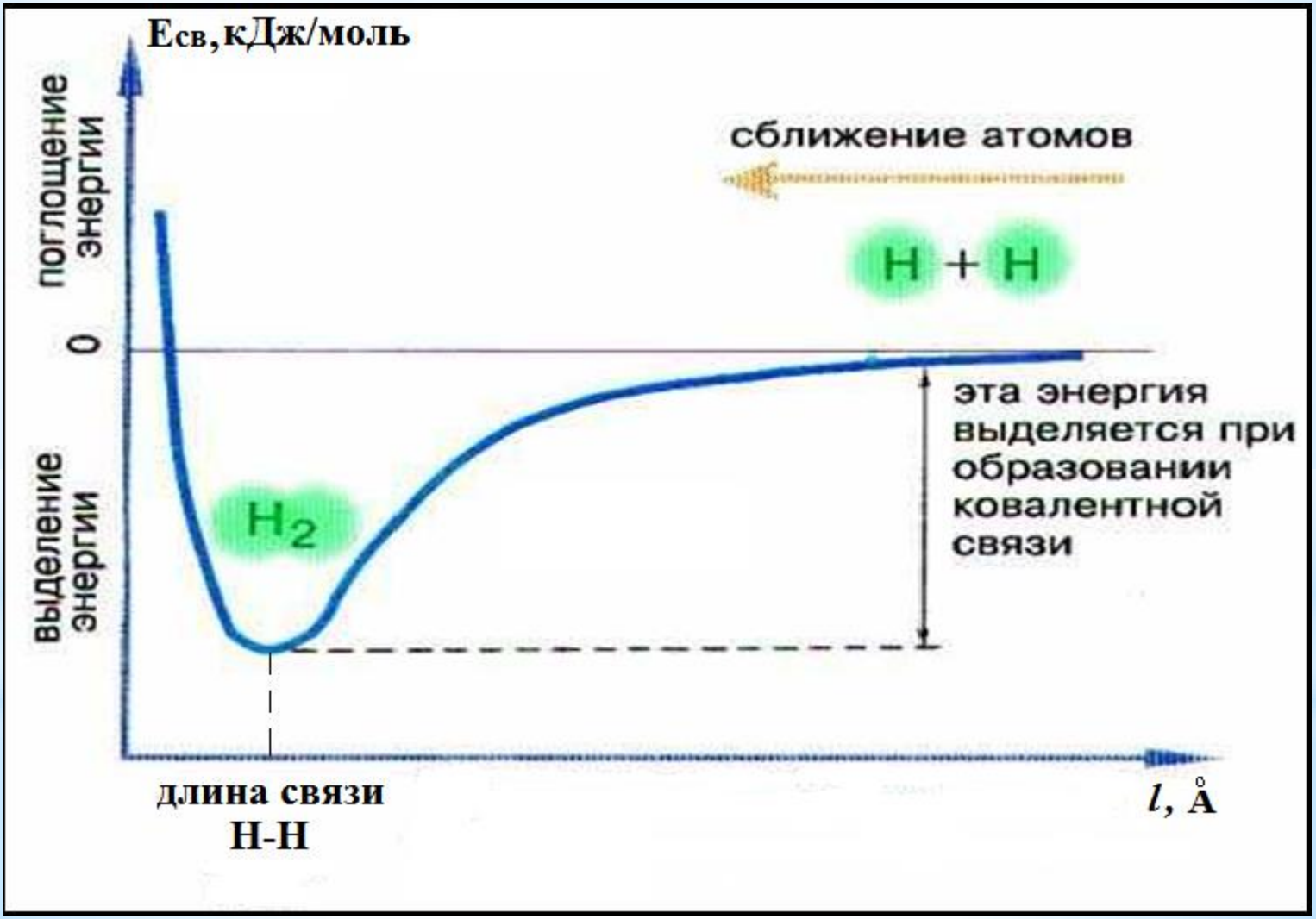
1. Взаимодействующие атомы могут обмениваться между собой электронами, образующими связывающие пары.
2. Два обменивающихся электрона должны в соответствии с принципом Паули иметь противоположные (антипараллельные) спины.
3. Энергия химической связи обусловлена в основном обменом электронами между атомами.
4. Ковалентная связь тем прочнее, чем больше область перекрывания электронных облаков.
5. Перекрывающиеся АО должны быть близки по энергии и симметрии.
6. Характеристики химической связи (энергия, длина, полярность) определяется типом перекрывания АО.
7. Ковалентная связь направлена в сторону максимального перекрывания АО реагирующих атомов.

7. Ковалентная связь

Образование ковалентной связи в молекуле водорода



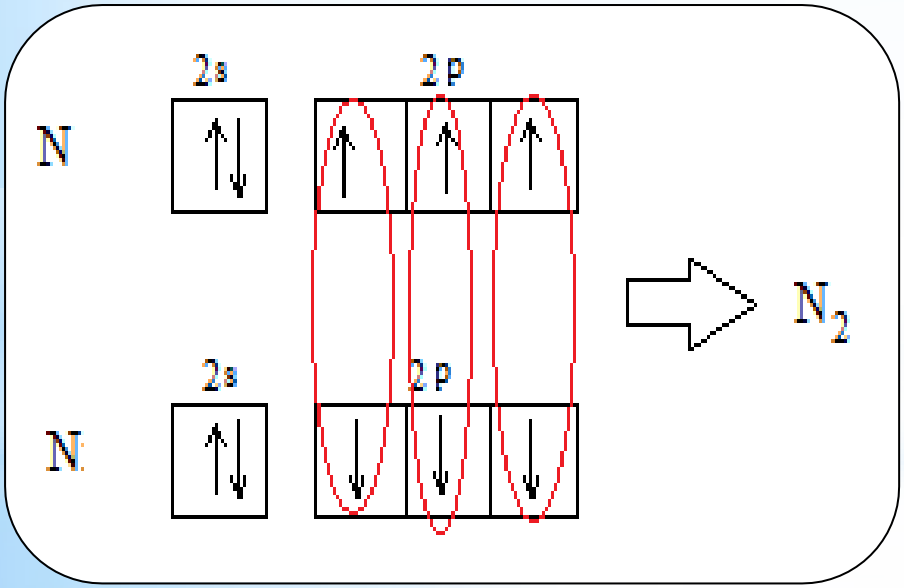
7. Ковалентная связь



7. Ковалентная связь

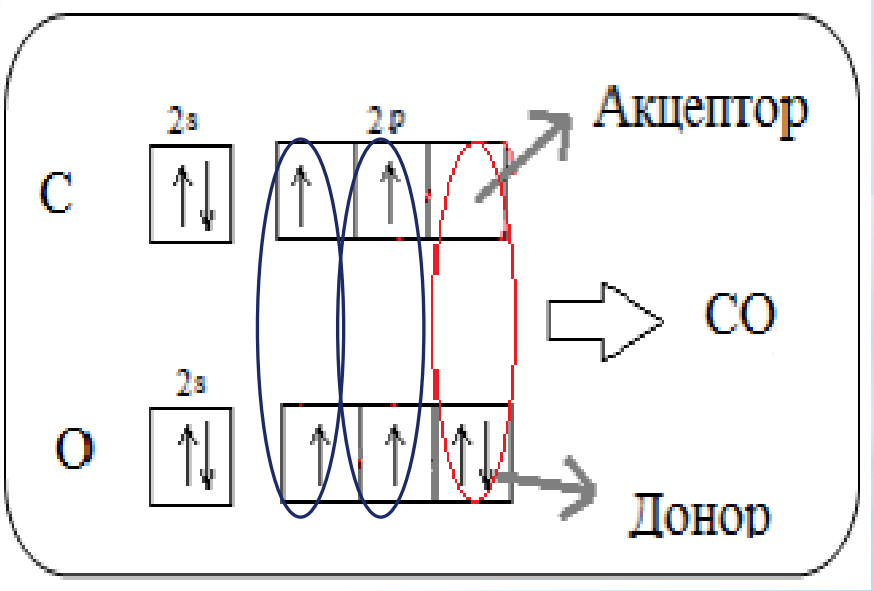
Механизм образования химической связи

- обменный



Кратность связи = 3

- донорно-акцепторный

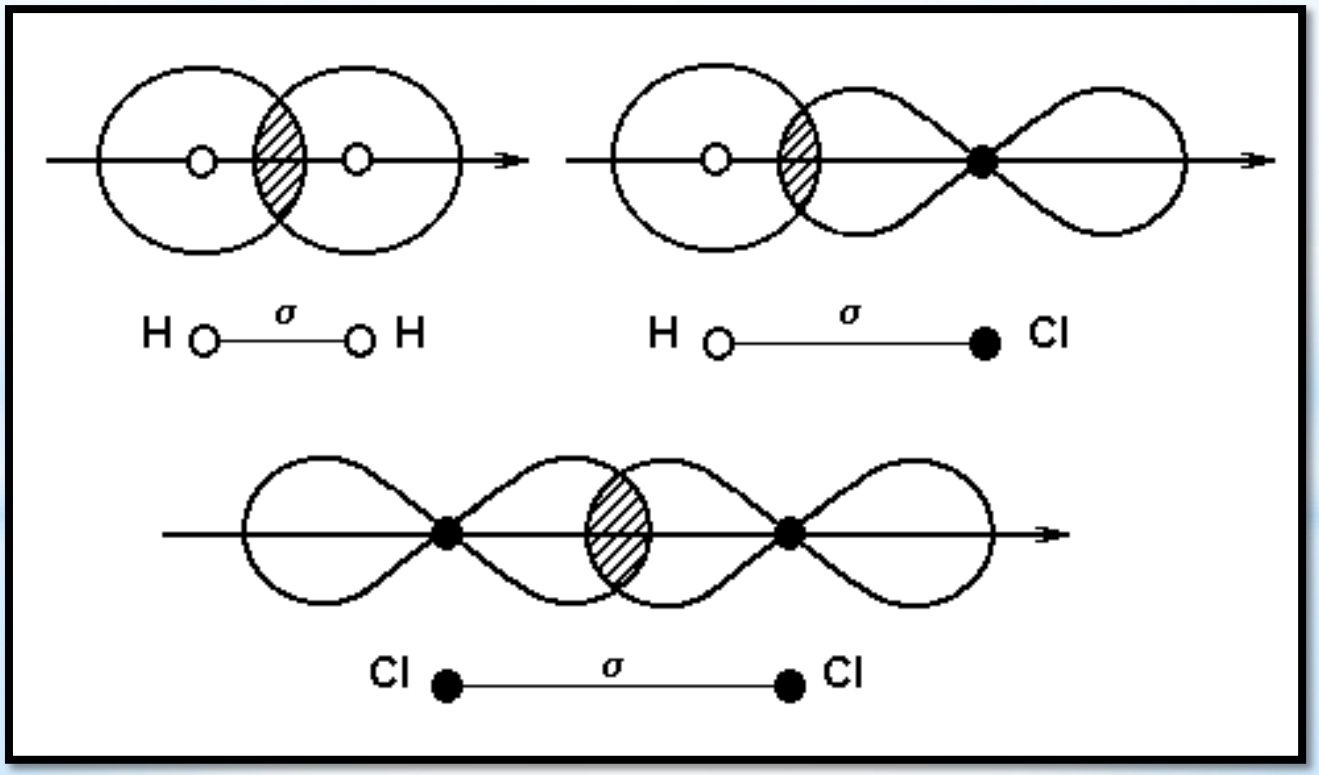


Кратность связи = 3

7. Ковалентная связь

Перекрывание электронных облаков

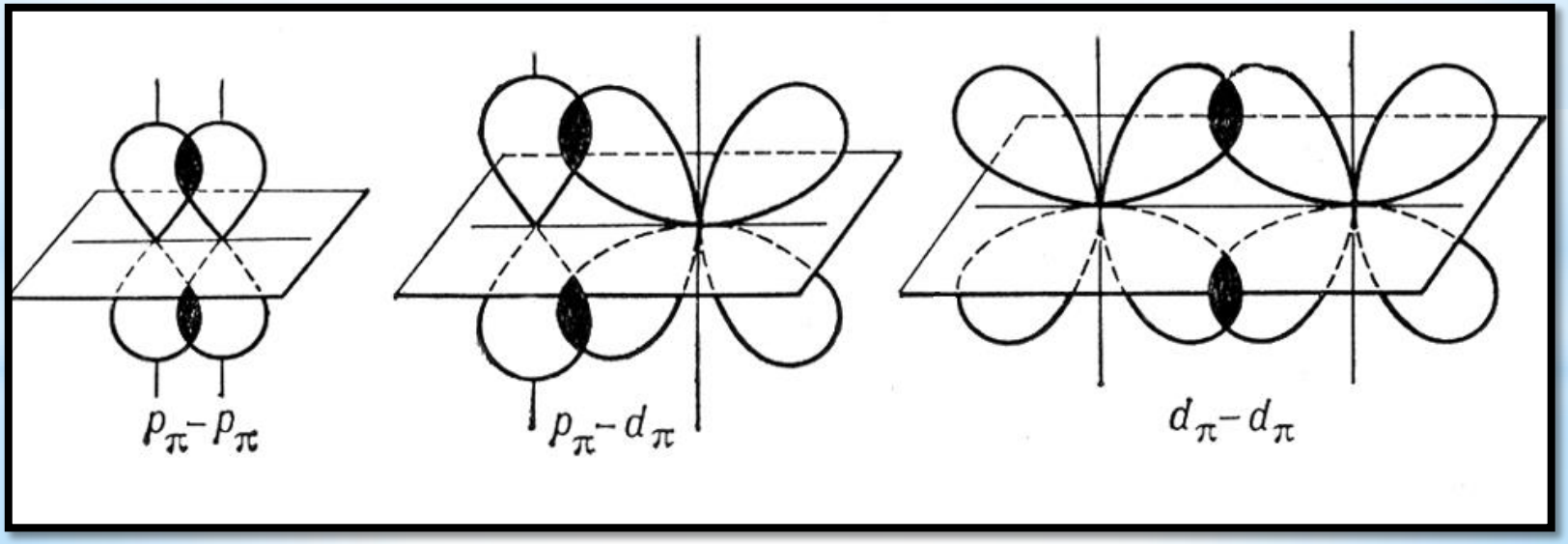
*σ – Связь (Сигма-связь) осуществляется при перекрывании облаков вдоль линии соединения атомов



7. Ковалентная связь

Перекрывание электронных облаков

*π– Связь (Пи-связь) возникает при перекрывании электронных облаков в плоскости перпендикулярной плоскости соединения атомов



7. Ковалентная связь

СВОЙСТВА	ОПРЕДЕЛЕНИЕ
1. полярность	обусловлена неравномерным распределением электронной плотности вследствие различий в электроотрицательностях атомов

Ковалентная связь

полярная

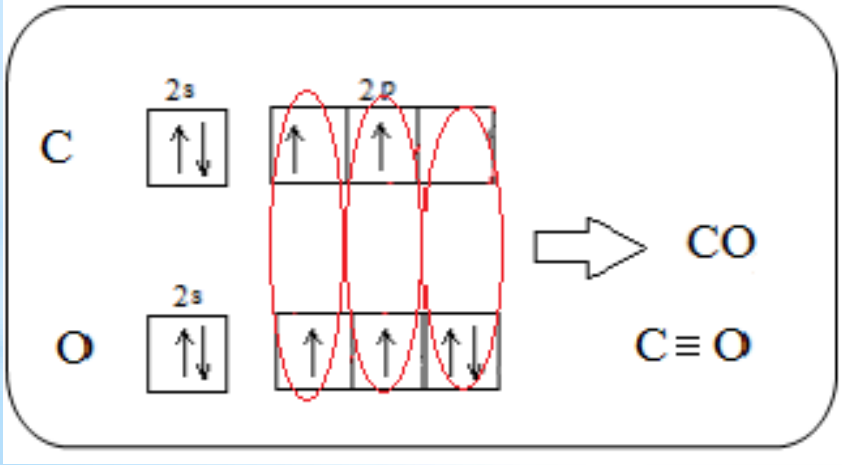
неполярная

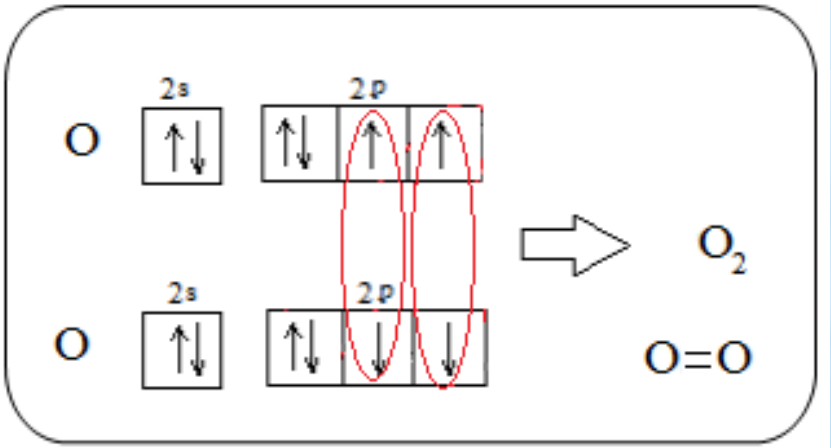
7. Ковалентная связь

Тип связи	Определение	Пример
неполярная	образуется за счет общих электронных пар, возникающих в оболочках связываемых атомов **одного и того же элемента**	H_2 O_2 N_2
полярная	образуется за счет общих электронных пар, возникающих в оболочках связываемых атомов **разных элементов**	HCl CO H_2O

7. Ковалентная связь

СВОЙСТВА	ОПРЕДЕЛЕНИЕ
2. насыщаемость	способность к образованию строго определенного числа связей





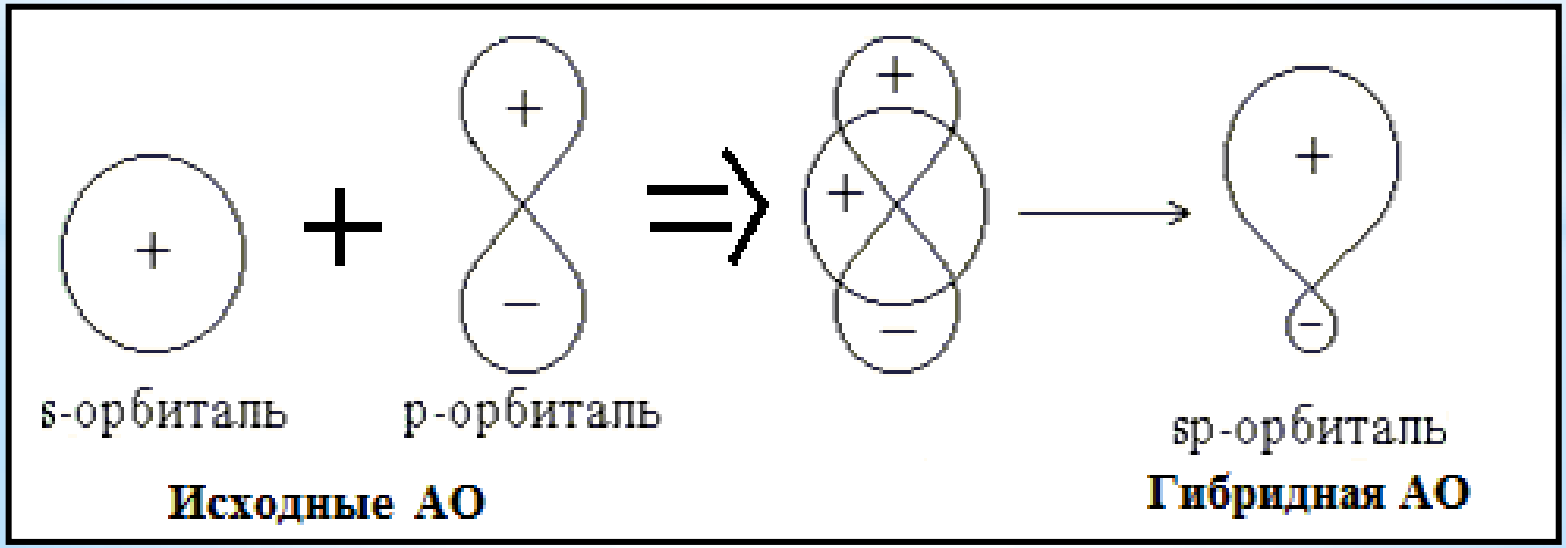
Кратность связи = 3

Кратность связи = 2

7. Ковалентная связь

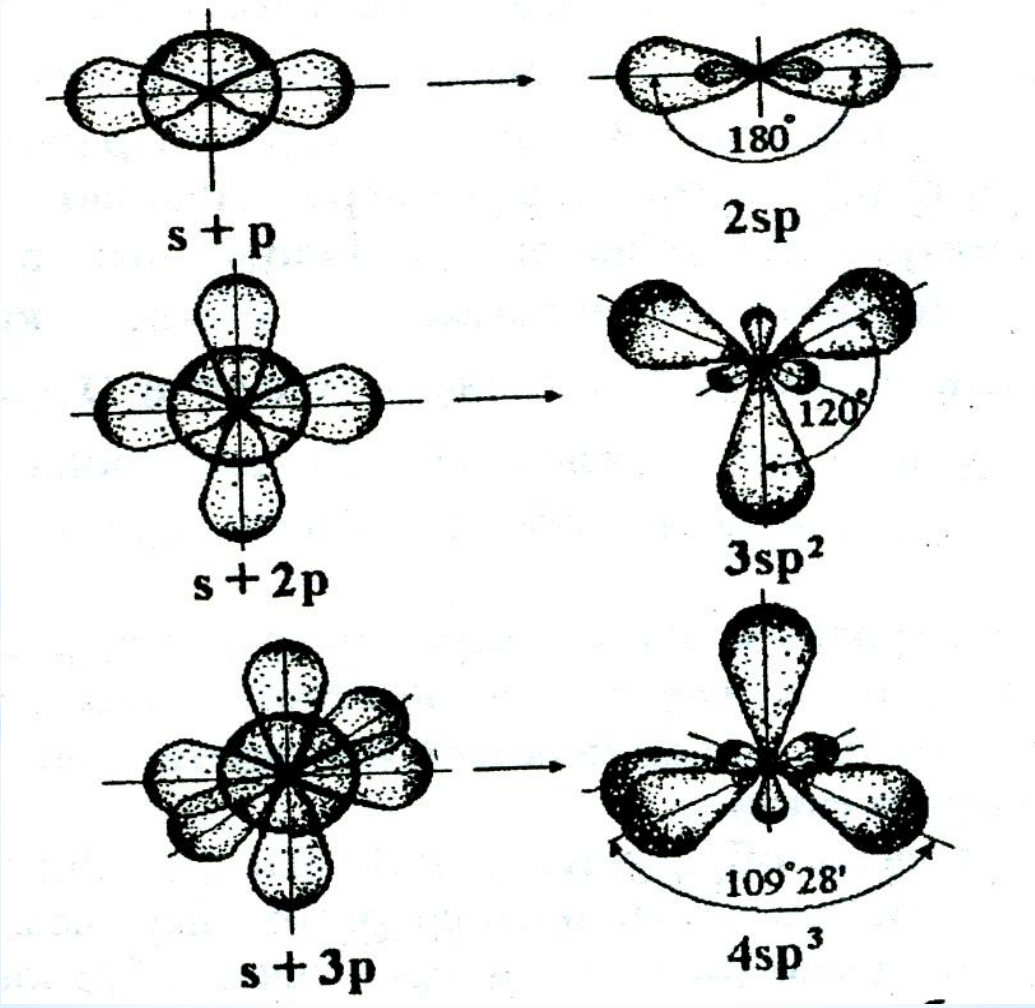
СВОЙСТВА	ОПРЕДЕЛЕНИЕ
3. направленность	обуславливает геометрическую форму молекул

<u>Гибридизация АО</u>– выравнивание по форме и энергии АО для достижения более эффективного их перекрывания.

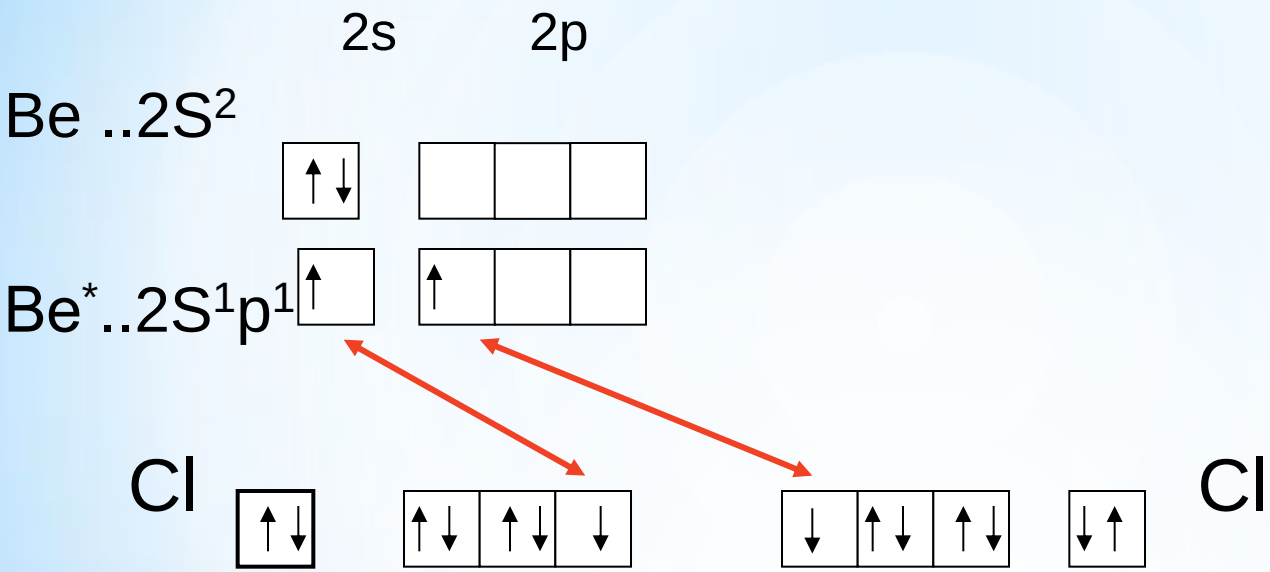


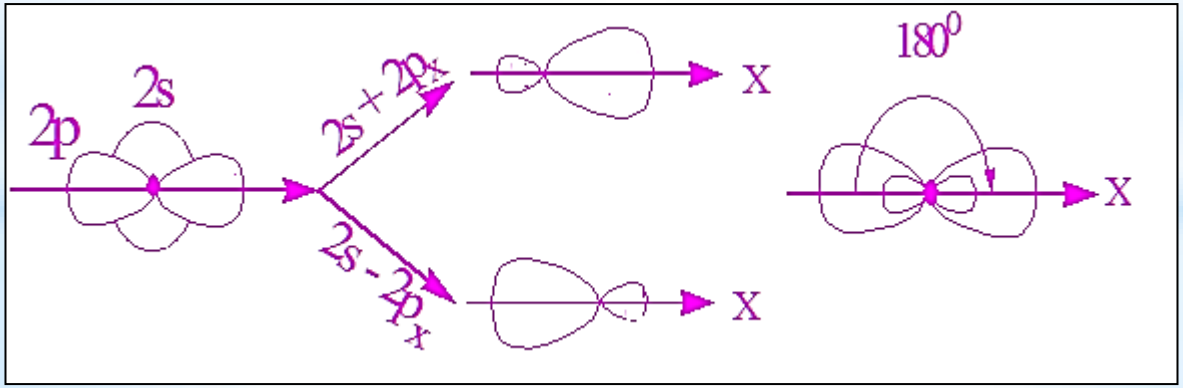
7. Ковалентная связь

Гибридизация валентных орбиталей



Строение молекулы $BeCl_2$





Тип гибридизации АО(Ве): sp.

Строение молекулы: линейное, угол – 180°

7. Ковалентная связь

Тип гибридизации	Геометрическое строение молекулы	Валентный угол	Пример
sp	Линейное	180	$BeCl_2$ CO_2
sp^2	Треугольное	120	BF_3
sp^3	тетраэдрическое	109,5	CH_4
sp^3d^2	октаэдрическое	90	SF_6

8. Ионная связь

- образуется за счет электростатического притяжения между ионами, образованными путем практически полного смещения электронной пары к одному из атомов.

Ненаправленность ионной связи связана с тем, что электростатическое поле иона обладает сферической симметрией и способно притягивать ионы противоположного знака в любом направлении.

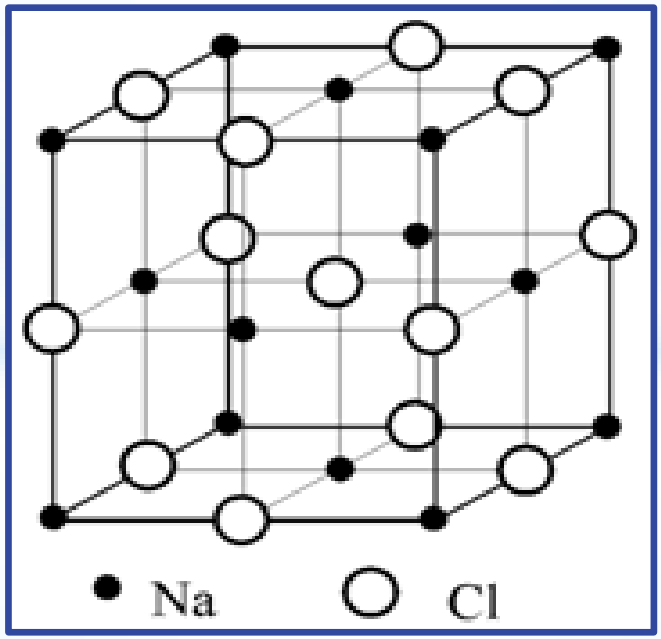
Ненасыщаемость – это способность иона данного знака притягивать к себе переменное количество ионов противоположного знака.

8. Ионная связь

При разности электроотрицательностей атомов
$\Delta\chi$ **>1,8** (по шкале Полинга) - это ионная связь,
$\Delta\chi$ **<1,8** – ковалентная связь.

NaCl

$\Delta\chi$ = 3,0 (Cl)- 0,9 (Na) = 2,1



8. Ионная связь

Ионы

Элементарные

Mg^{2+}, S^{2-}, H^{+}, Na^{+}

Сложные

OH^{-}, SO_4^{2-}, $[Fe(CN)]_6^{3-}$

ионная св.

ков. поляр. св.

9. Металлическая связь

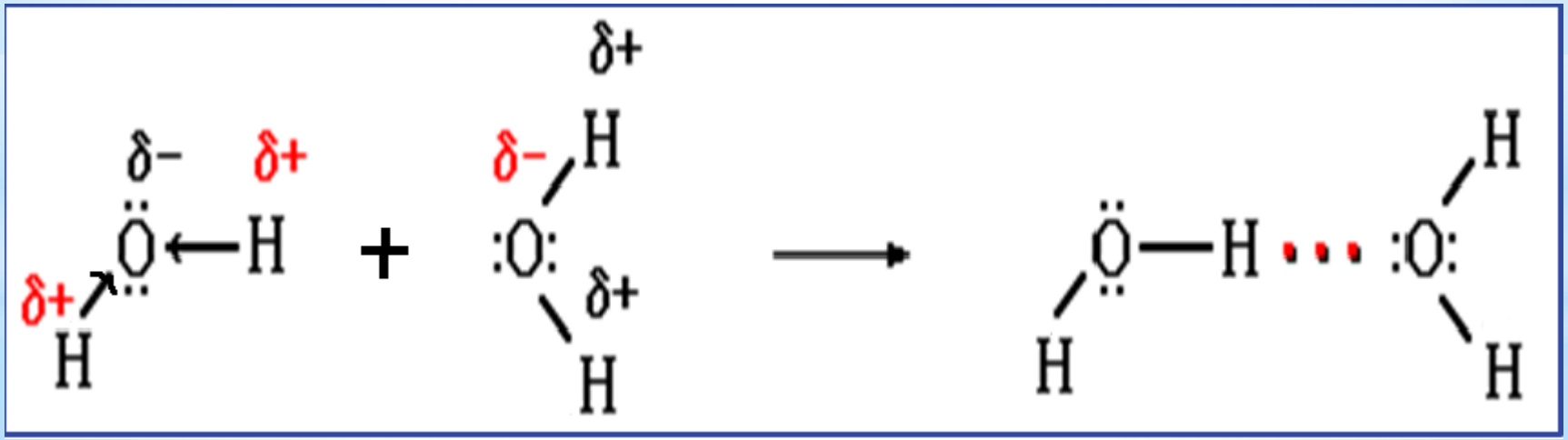
- образуется при взаимодействии положительных ионов металлов и валентных электронов, а также между атомам

$E_{св}$ =100-200 кДж/моль

10. Водородная связь

- образуется между положительно заряженным атомом **водорода** одной молекулы и электроотрицательным атомом (**F, O, N**) другой или той же молекулы.

$E_{св}$ = **20-40 кДж/моль**



11. Межмолекулярные химические связи

Тип	Определение	Примеры
Дисперсионные	взаимодействие межу двумя неполярными молекулами	H_2 и N_2, H_2 и H_2
Индукционные	взаимодействие межу двумя полярной и неполярной молекулами	HCl и O_2, NH_3 и N_2
Ориентационные	взаимодействие межу двумя полярными молекулами	HCl и HCl HBr и HCl

«Строение вещества»

Лектор: к.т.н., Мачехина Ксения Игоревна

http://portal.tpu.ru/SHARED/m/MACHEKHINAKSU

Email: mauthksu@yandex.ru

10 корпус ТПУ 024Б