



ПОВЕДЕНИЕ МАТЕРИАЛОВ В СИЛЬНЫХ ПОЛЯХ

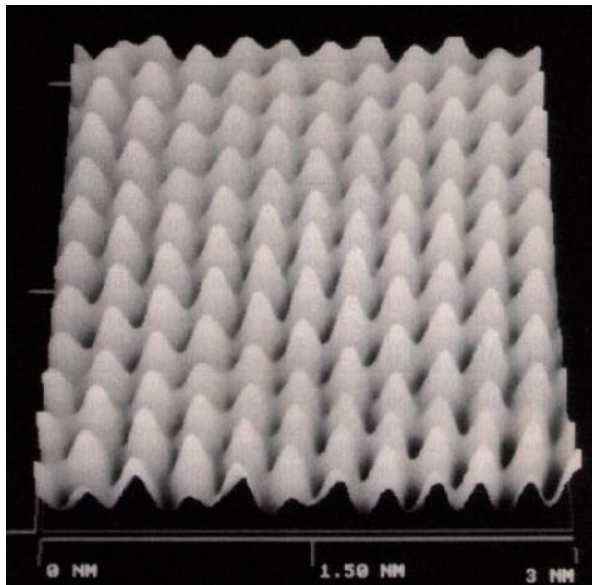
СТРОЕНИЕ АТОМА

Свойства веществ определяются:

- природой и электронным строением атомов;
- типом атомных орбиталей и характером их взаимодействия;
- типом химических связей;
- химическим, электронным и пространственным строением молекул).

СТРОЕНИЕ АТОМА

Протоны, нейтроны, электроны



Микрофотография
поверхности образца
золота.

ЯДРО=ПРОТОНЫ+НЕЙТРОНЫ=НУКЛОНЫ

$$N_p = N_n$$

Полное число протонов – атомный номер атома Z .

- Радиус молекулы $r_{\text{МОЛ}} \sim 1-10$ нм
- Радиус атома $r_{\text{АТОМ}} \sim 0.4 \cdot 10^{-10} - 1.5 \cdot 10^{-10}$ м
- Радиус электрона $r_e \sim 10^{-15}$ м
- Размеры ядра : $10^{-15} - 10^{-14}$ м

Субатомные частицы

Частица	Заряд		Масса:	
		Кл	кг	а.е.м.
Протон	+1	$1.6 \cdot 10^{-19}$	$1,67 \cdot 10^{-27}$	1,00728
Нейтрон	0		$1,67 \cdot 10^{-27}$	1,00867
Электрон	-1	$1.6 \cdot 10^{-19}$	$9,11 \cdot 10^{-31}$	0,000549

За атомную единицу массы принята ровно 1/12 часть массы атома углерода, в ядре которого содержится 6 протонов и 6 нейтронов.

$$1 \text{ а.е.м.} = \frac{1}{12} m(^{12}\text{C}) = 1,661 \cdot 10^{-27} \text{ кг} = 1,661 \cdot 10^{-24} \text{ г}$$

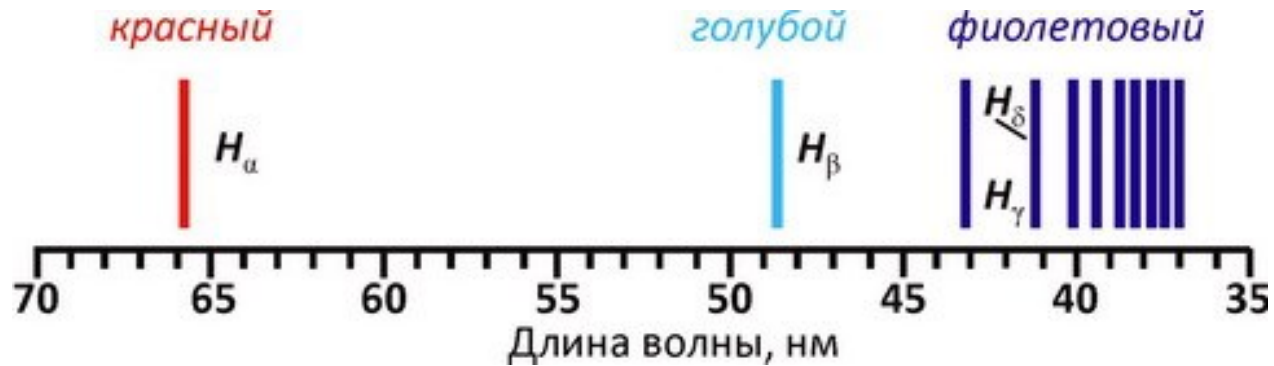
Сумма протонов и нейтронов в ядре ($\sum p + \sum n = A$) составляет **массовое число атома A**, которое так же указывается в ПСЭ.

Например: ${}_{30}^{64}\text{Zn}$

Атомы, имеющие в ядре одинаковое число протонов, но различное число нейтронов, называются **изотопами**, они обладают одинаковыми химическими свойствами: ${}_{30}^{64}\text{Zn}, {}_{30}^{66}\text{Zn}, {}_{30}^{67}\text{Zn}, {}_{30}^{68}\text{Zn}, {}_{30}^{70}\text{Zn}$.

Атомы, имеющие одинаковое число нуклонов в ядре A называются **изобарами**, число протонов и нейтронов у них различно, их химические свойства так же различны: ${}_{50}^{124}\text{Sn}, {}_{52}^{124}\text{Te}, {}_{54}^{124}\text{Xe}$

АТОМНЫЕ СПЕКТРЫ



Видимый спектр атомарного водорода

где E — энергия кванта; h — постоянная Планка, равная $6,626 \cdot 10^{-34}$ Дж·с;

Волновые числа линий этой серии: $\bar{\nu} = R_{\infty} \left(\frac{1}{2^n} - \frac{1}{n^2} \right)$
 $\bar{\nu}$ - волновое число, равное $1/\lambda$ (λ — длина волны), т. е. оно равно числу волн, укладывающихся на 1 см;

R_{∞} — постоянная Ридберга, равная $109\,737 \text{ см}^{-1}$;

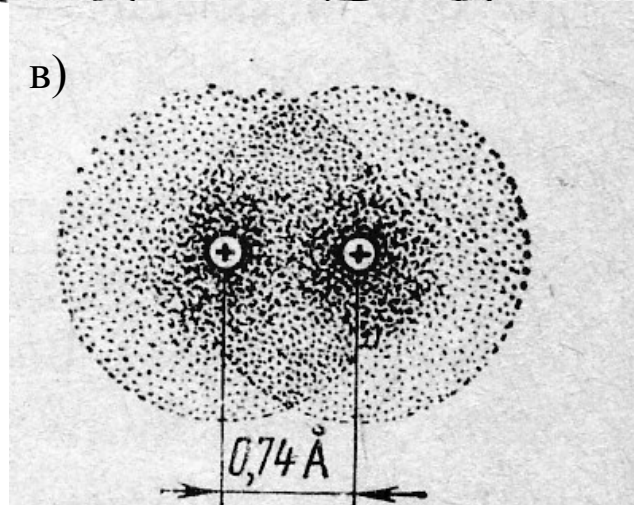
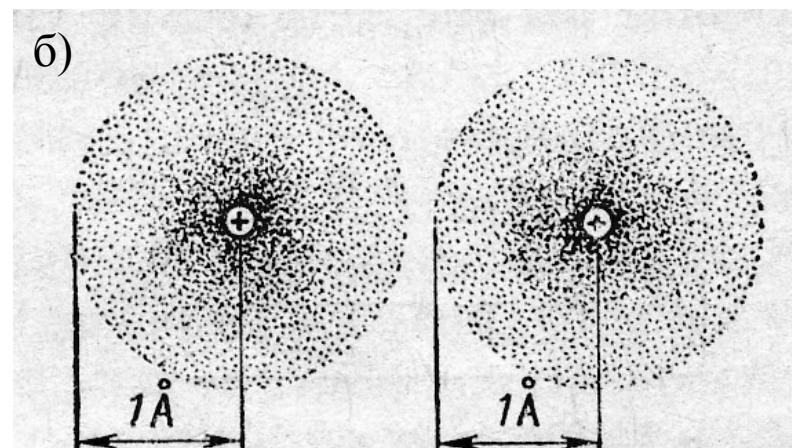
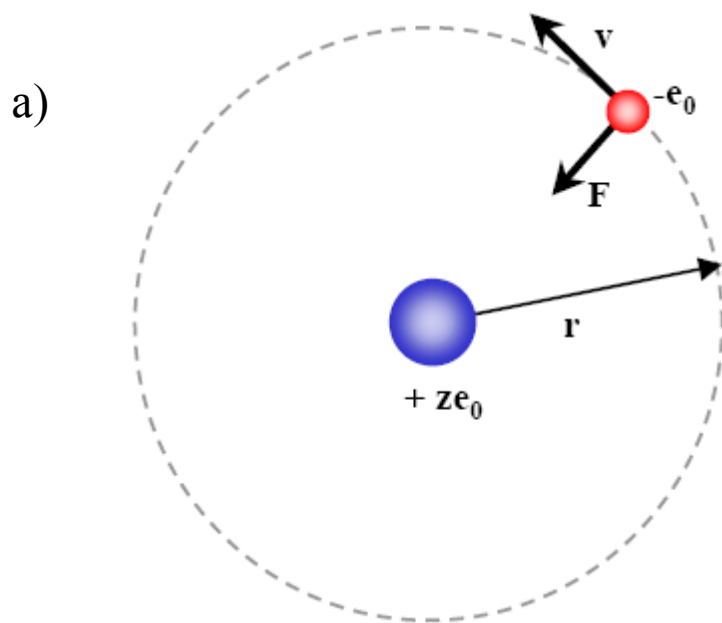
n — целое число, которое может принимать значения 3, 4, 5,...

$$E = h\nu$$

E - энергия кванта; h - постоянная Планка, равная $6,626 \cdot 10^{-34}$ Дж·с;

ν - частота колебаний, равная отношению скорости света c к длине волны.

МОДЕЛЬ АТОМА ПО ТЕОРИИ БОРА



Структура атома и молекулы водорода:

а) – простейшая планетарная модель водородного атома

б) – квантовомеханическая модель электронной структуры двух уединенных атомов водорода

в) – то же, для молекулы водорода (точками показана плотность заряда электрона).

МОДЕЛЬ АТОМА ПО ТЕОРИИ БОРА

- Движение электрона в атоме ограничено индивидуальной устойчивой орбитой.
- Пока электрон находится на этой орбите, он не излучает энергии.

Условие устойчивости орбиты:

$$n\lambda = 2\pi r_n, \quad n = 1, 2, 3, \dots,$$

r_n - радиус орбиты, на длине которой укладывается n длин волн.

λ - длина волны электрона

N - квантовое число орбиты

Радиус самой внутренней орбиты атома водорода - **боровский радиус** (a_0).

$$a_0 = r_1 = 0,053 \text{ нм.}$$

Радиусы других орбит:

$$r_n = n^2 a_0$$



расстояния между соседними орбитами постоянно возрастают. Разным разрешенным орбитам (т. е. орбитам, отвечающим условиям постулата Бора) соответствуют разные уровни энергии электронов.

Квантовое состояние с наименьшей энергией E_1 - **основное**,

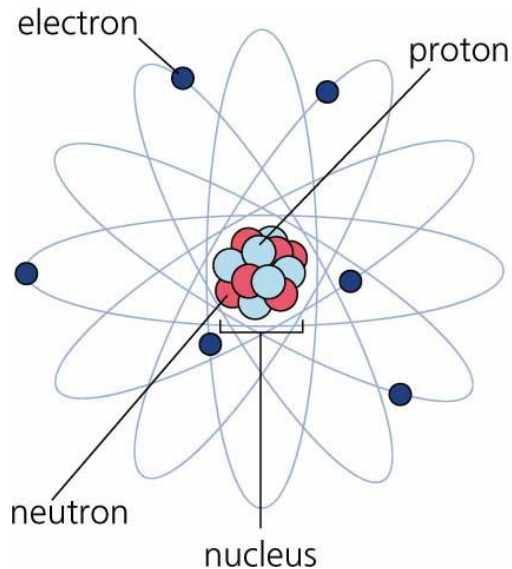
Квантовые состояния с большими уровнями энергии E_2, E_3, E_4 - **возбужденные**.

При переходе электрона с верхнего уровня на нижний выделяется энергия. Если квантовое число начального состояния (с более высокой энергией E_H) равно n_k , а квантовое число конечного состояния (с более низкой энергией E_K) равно n_k то

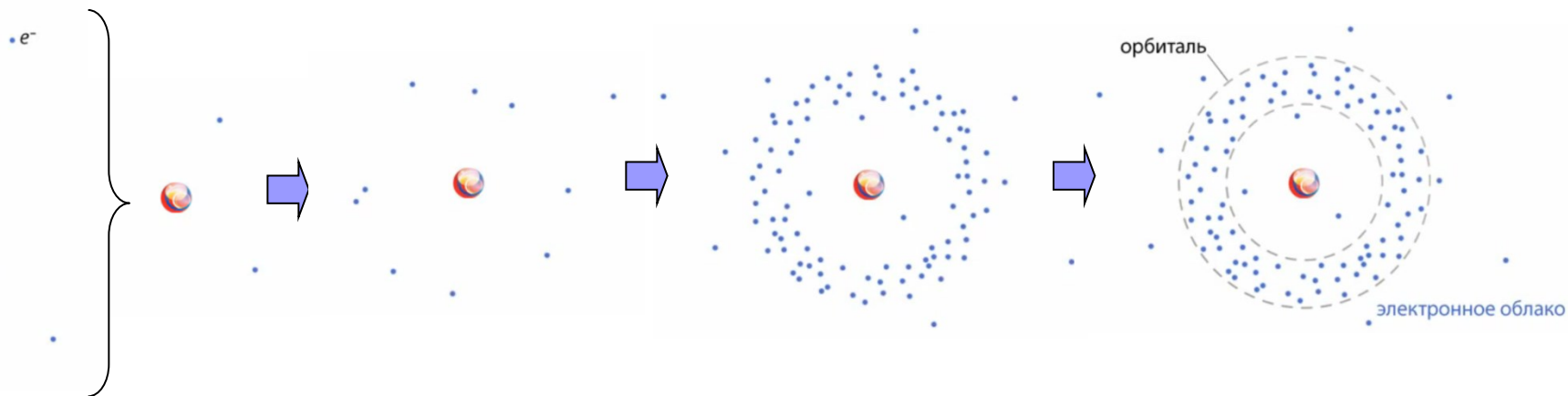
$$E_H - E_K = h \times \nu$$

С точки зрения квантовой механики электроны, вращающиеся вокруг ядра, лучше всего представить себе в виде непрерывно распределенного заряда. Вид распределения заряда определяется **состоянием движения электрона**.

Разницу между полуклассическим и квантово-механическими представлениями электрона, можно проиллюстрировать, рассмотрев вкратце структуру атома водорода с позиций старой квантовой теории Бора, развитой им в 1913 г., и сравнить результаты, полученные в этой теории, с результатами, полученными на основе квантовой теории, развитой Шредингером и Гейзенбергом в 1924 г.

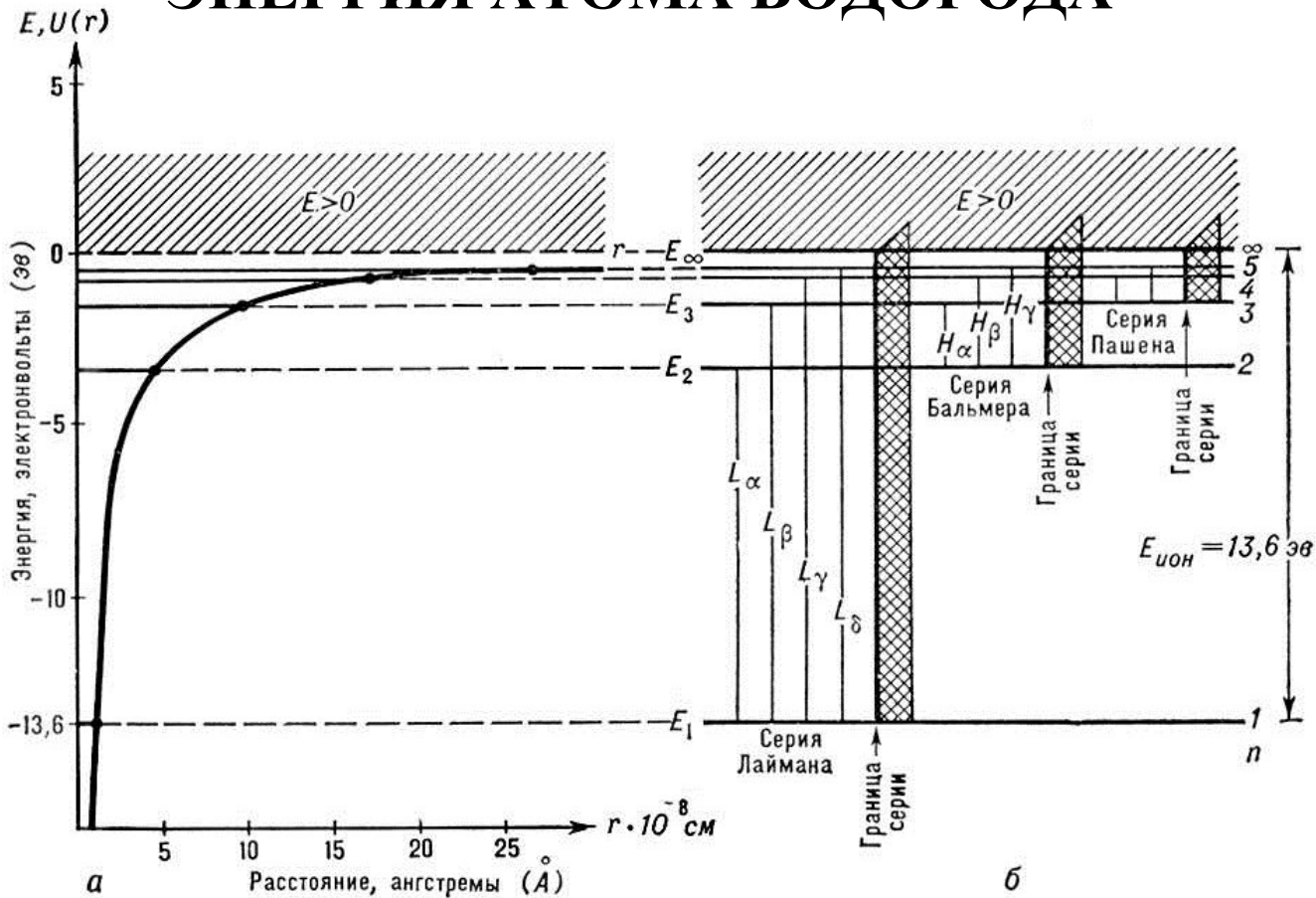


3D



В квантовой механике движение электрона описывается волновой функцией, обладающей в изолированном атоме водорода сферической симметрией, так что заряд электрона диффузно распределен, образуя облако.

ЭНЕРГИЯ АТОМА ВОДОРОДА



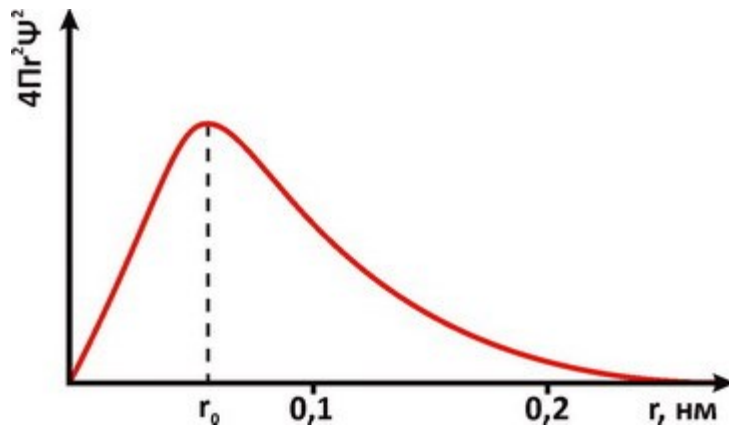
а - возможные значения полной энергии E_1, E_2, E_3, \dots (горизонтальные линии) и график потенциальной энергии (жирная кривая; точками показаны значения r_{\max} при $E = E_1, E_2, E_3, \dots$); б — схема уровней энергии (горизонтальные линии) и оптических квантовых переходов (вертикальные линии). Заштрихованная область ($E > 0$) соответствует свободному состоянию электрона.

Квантово-механическая модель атома

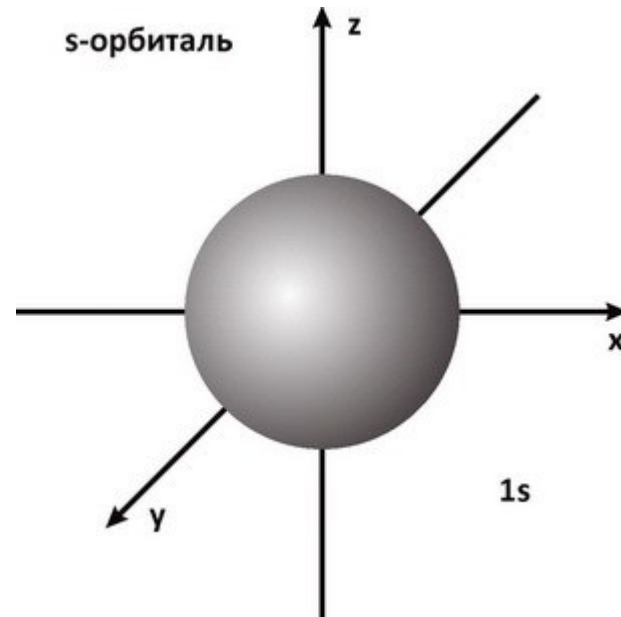
Длина волны де Бройля:

$$\lambda = \frac{h}{(m \times v)}$$

частице с массой m , движущейся со скоростью v соответствует волна длиной λ ; h - постоянная Планка.



Радиальное
распределение вероятности
пребывания электрона для основного
энергетического состояния атома
водорода



Электронное s-облако (1 - 0)

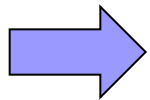
В. Гейзенбергом был предложен принцип неопределенности, согласно которому для микрочастиц невозможно одновременно точно определить и координату частицы X , и составляющую p_x импульса вдоль оси x .

Математически принцип неопределенности записывают следующими уравнениями:

$$\Delta x \Delta p_x \geq h;$$

$$\Delta x \Delta p_y \geq h;$$


$$\Delta x \Delta p_z \geq h.$$



невозможно утверждать, что электрон, имеющий определенную скорость, находится в данной точке пространства, здесь можно использовать лишь вероятностное описание.

Для описания свойств электрона используют волновую функцию Ψ

Квадрат ее модуля $|\Psi|^2$, вычисленный для определенного момента времени и определенной точки пространства, пропорционален вероятности обнаружить частицу в этой точке в указанное время. Величину $|\Psi|^2$ называют **плотностью вероятности**.



Чем больше величина $|\Psi|^2$, тем больше вероятность нахождения электрона в данной области атомного пространства.

В квантовой механике вместо термина «орбита» используют термин «орбиталь», которым называют волновую функцию электрона.

Орбиталь характеризует и энергию и форму пространственного распределения электронного облака.

Расчеты в квантовой механике проводят с помощью предложенного в 1926 г. австрийским ученым Э. Шредингером уравнения, которое является математическим описанием электронного строения атома в трехмерном-пространстве.

Уравнение Шредингера (математическое описание электронного строения атома в трехмерном пространстве)

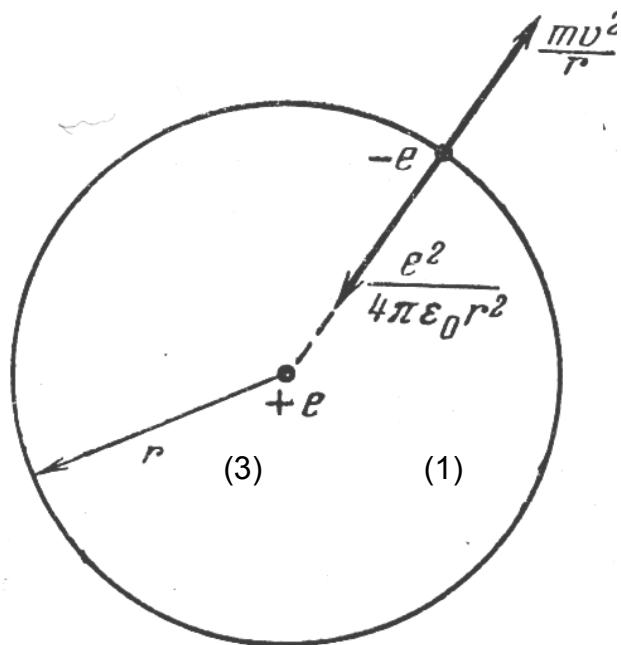
$$-\frac{\hbar^2}{8\pi^2 m} \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} \right) + U \psi = E \psi$$

\hbar — постоянная Планка;
 m — масса частицы;
 U — потенциальная энергия;
 E — полная энергия;
 x, y, z — координаты;
 Ψ — волновая функция.

Решение уравнения – волновая функция $\Psi=f(x, y, z)$

Определив вероятностную функцию можно оценить величину $|\Psi|^2 dV$ – вероятность нахождения электрона в объеме пространства dV , окружающего атомное ядро.

ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ СООТНОШЕНИЯ ЛЯ ПРОСТЕЙШЕЙ МОДЕЛИ АТОМА ВОДОРОДА



Схематическое изображение сил, соответствующих круговой орбите электрона в атоме водорода

Радиус орбиты остается стабильным, если в месте нахождения электрона существует равновесие между силой кулоновского притяжения и центробежной силой:

$$\frac{mv^2}{r} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2}; \quad (1)$$

v – скорость электрона на орбите,
 $\epsilon_0 = 8.854 \cdot 10^{-12}$ Ф/м – электрическая постоянная

Полная энергия движущегося электрона равна сумме кинетической энергии и потенциальной, обусловленной кулоновским полем протона:

$$W = \frac{mv^2}{2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad (2)$$

$$W = -\frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 r}. \quad (3)$$

Квантовое условие для движения электрона

- стабильны только те орбиты, для которых момент количества движения (кратен) в целое число раз больше $\hbar/2\pi$

$$mvr = n\hbar / 2\pi \quad (n=1, 2, 3 \dots \text{номер орбиты}).$$

- Возможные круговые орбиты электрона

$$r_n = \frac{\varepsilon_0 \hbar^2}{\pi m e^2} n^2 = 5,29 \cdot 10^{-10} n^2 \text{ (м)}$$

- Наименьший радиус орбиты электрона – 5.29 Å. Другие разрешенные радиусы орбит будут соответственно больше в 4, 9, 16 и т.д. раз.

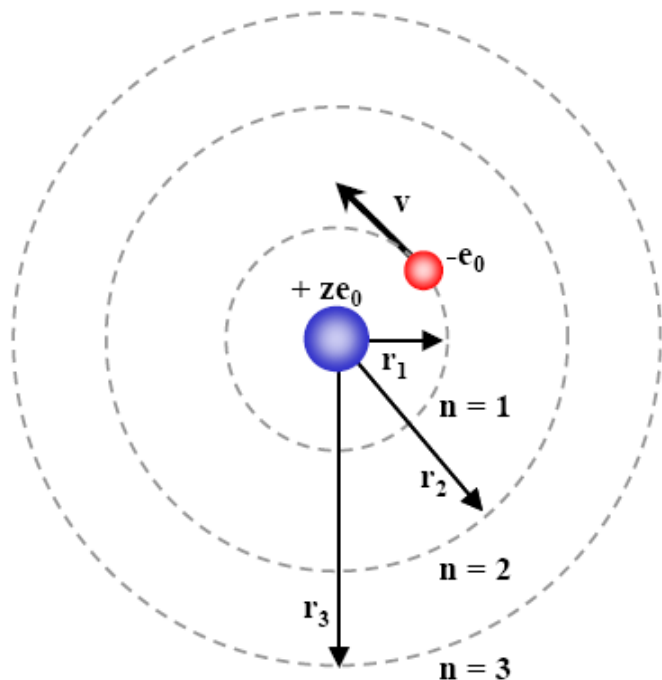
МОДЕЛЬ АТОМА ВОДОРОДА ПО ТЕОРИИ БОРА

- Электрон может обладать лишь рядом дискретных значений энергии W_n , определяемых формулой:

$$W_n = -\frac{me^4}{8\varepsilon_0^2\hbar^2} \cdot \frac{1}{n^2} = -\frac{13,6}{n^2} \text{ эВ}$$

1 электронвольт (эВ) = $1,6 \cdot 10^{-19}$ Дж.

- Наименьшая энергия связи электрона в поле протона на «основном» энергетическом уровне ($n=1$): $W_n=13,6$ эВ



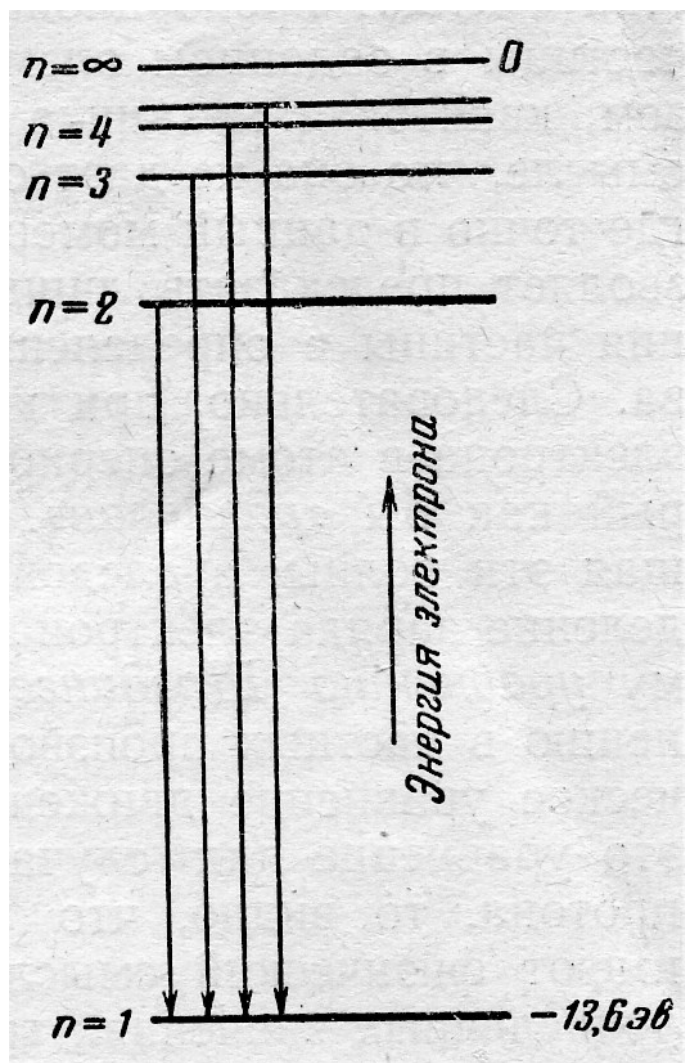
Энергия ионизации
H → H⁺ + e⁻: 13,6 эВ

$$r_n = n^2 \frac{\varepsilon_0 \hbar^2}{\pi m_e e_0^2}$$

$$r_n = n^2 a_0$$

$$r_1 = a_0 = \frac{\varepsilon_0 \hbar^2}{\pi m_e e_0^2} \approx 0,529 \text{ нм}$$

ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ УРОВНИ

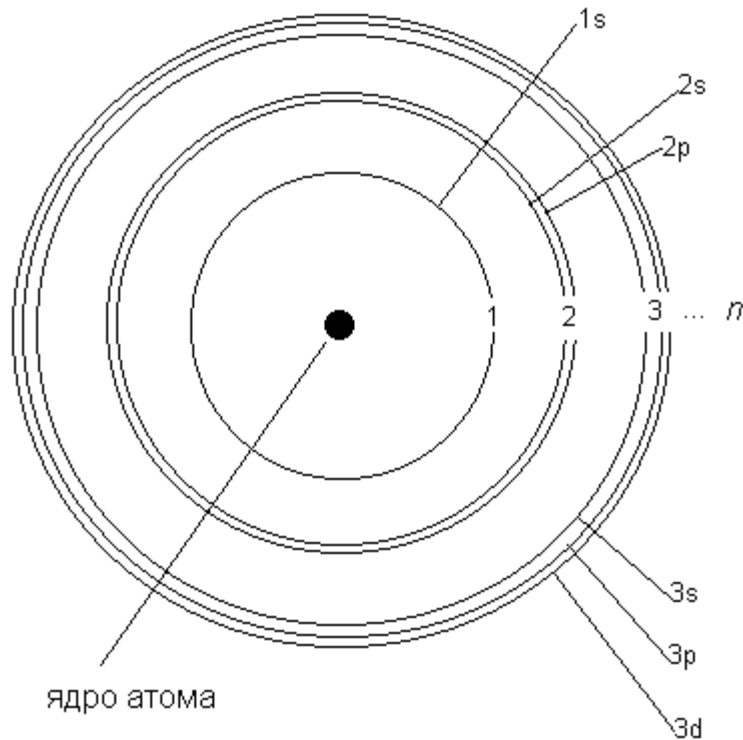


Схематическое изображение энергетических уровней электрона в атоме водорода. Стрелками показаны переходы с более высоких уровней в основное состояние. Эти переходы соответствуют испусканию электромагнитного излучения.

Переход электрона из одного энергетического уровня (W_{n1}) в другой (W_{n2}) связан с испусканием или поглощением электромагнитной волны, частотой ν :

$$\hbar\nu = |W_{n1} - W_{n2}|.$$

ЭЛЕКТРОННЫЕ ОРБИТЫ



Схематичное изображение строения электронной оболочки атома в модели Бора

Контур атомной орбитали - это графическое отображение волновой функции, полученной при решении волнового уравнения для одного электрона.

- Электронные орбиты в модели Бора обозначаются целыми числами $1, 2, 3, \dots, n$, начиная от ближайшей к ядру - *уровни*.

- Уровни, в свою очередь, могут состоять из близких по энергии *подуровней*

- Подуровни, в свою очередь, состоят из одинаковых по энергии *орбиталей*

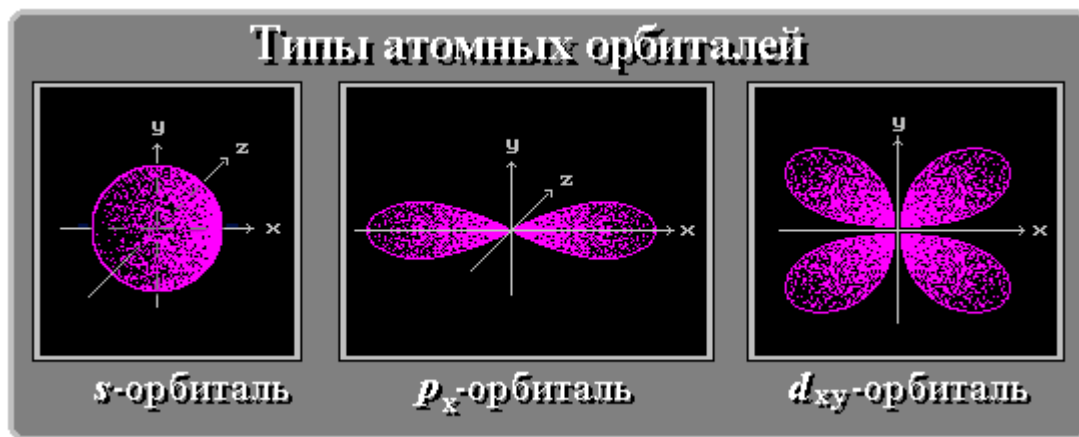
ПРИНЦИП НЕОПРЕДЕЛЕННОСТИ ГЕЙЗЕНБЕРГА – невозможно одновременно

точно определить положение микрочастицы в пространстве и его импульс

- **Атомная орбиталь** - область наиболее вероятного пребывания электрона (электронное облако) в электрическом поле ядра атома

Положение элемента в Периодической системе определяет тип орбиталей его атомов (s-, p-, d-, f-АО и т.д.), различающихся энергией, формой, размерами и пространственной направленностью.

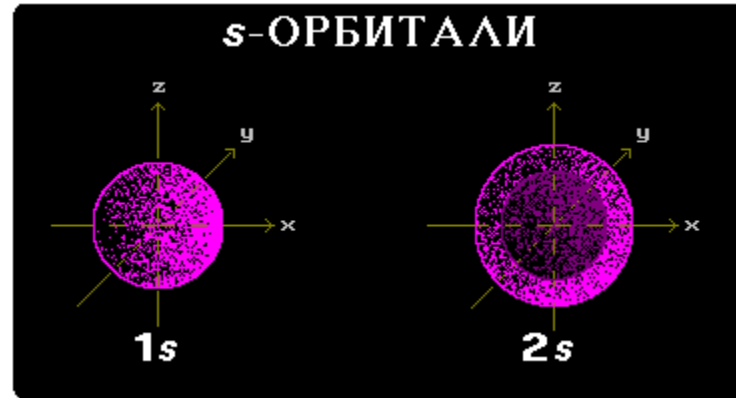
Атомные орбитали (АО) разных типов отличаются друг от друга формой и энергией и обозначаются символами: s, p, d, f и т.д.



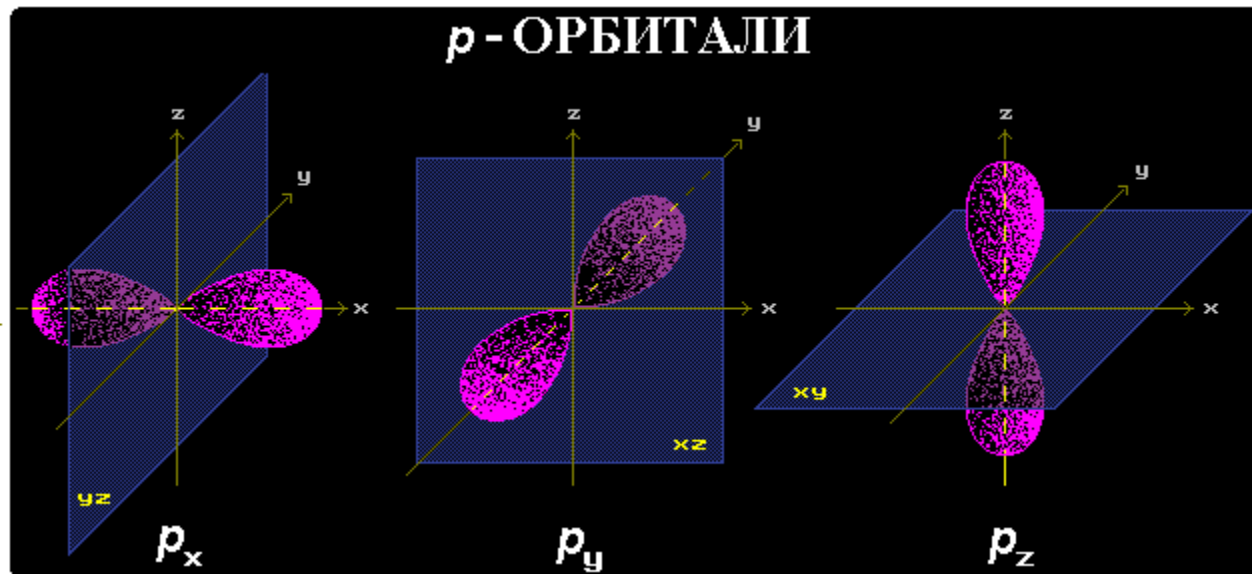
Для элементов 1-го периода (H, He) характерна одна АО - 1s.

В элементах 2-го периода электроны занимают пять АО на двух энергетических уровнях: первый уровень 1s; второй уровень — 2s, 2p_x, 2p_y, 2p_z. (цифры обозначают номер энергетического уровня, буквы – форму орбитали).

Атомные орбитали s-типа имеют форму сферы:



p-АО имеют форму объемной восьмерки (гантели), направленной по оси x, y или z.

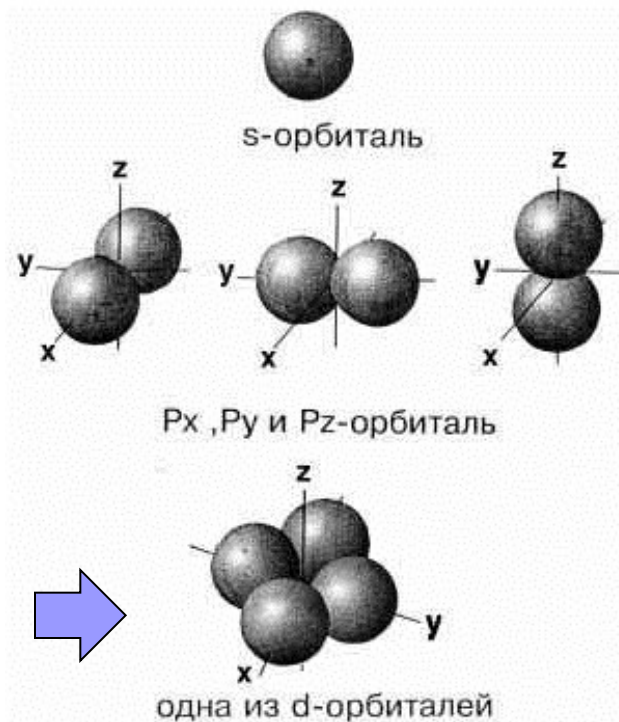


Энергия орбитали возрастает по мере удаления электрона от ядра атома (т.е. с увеличением номера электронного уровня).

Так, энергия s -АО увеличивается в ряду: $1s < 2s < 3s$ и т.д. Аналогично изменяется энергия p -АО: $2p < 3p < 4p$ и т.д.

Внутри одного энергетического уровня энергия АО возрастает от s -АО к p -АО: $2s < 2p$; $3s < 3p$.

Форма в волновой модели атома "области вероятности" существования электронов: s -, p -, и d -орбитали. Ядро атома находится в точке пересечения координат.



Заполнение атомных орбиталей электронами

При заполнении атомных орбиталей электронами соблюдаются **три** основные правила.

Принцип устойчивости. АО заполняются электронами в порядке повышения их энергетических уровней:

$$1s < 2s < 2p < 3s < 3p < 4s < 3d \dots$$

Принцип Паули. На одной АО могут находиться не более двух электронов с противоположными спинами.

Правило Хунда. На АО с одинаковой энергией, так называемых вырожденных орбиталях, электроны располагаются по одному с параллельными спинами.

Разрешенные и неразрешенные электронные конфигурации

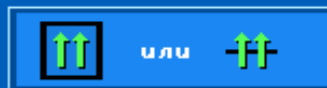
Разрешенная конфигурация

Неразрешенные конфигурации

Принцип Паули

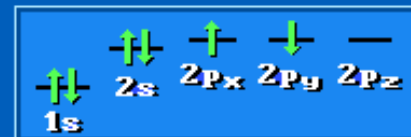
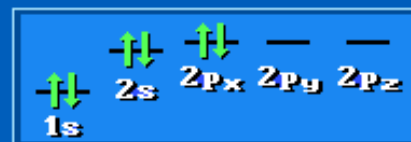
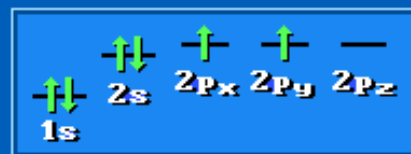


электронная ячейка уровень энергии



Правило Хунда

(на примере атома углерода)



В химических превращениях принимают участие электроны внешнего электронного уровня – **валентные электроны**.

Во всех моделях атома электроны называют s-, p-, d- и f-электронами в зависимости от подуровня, на котором они находятся.

Элементы, у которых внешние (то есть наиболее удаленные от ядра) электроны занимают только s-подуровень, принято называть **s-элементами**.

Точно так же существуют **p-элементы**, **d-элементы** и **f-элементы**.

Распределение электронов в атоме

Чем выше (то есть чем дальше от ядра) находится электронный уровень, тем больше на нем может разместиться электронов за счет того, что число подуровней и орбиталей на удаленных уровнях постоянно увеличивается.

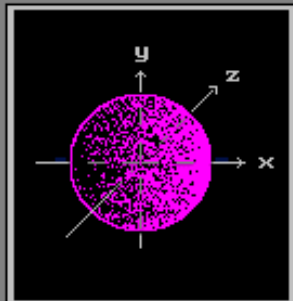
На n -м уровне помещается в сумме n^2 различных орбиталей, а электронов - вдвое больше: $2n^2$, потому что любая орбиталь способна вмещать *не более двух электронов*.

Наибольшее возможное число электронов на первых 4-х электронных уровнях

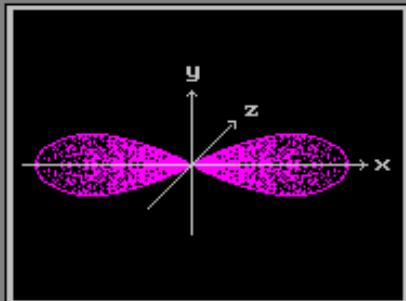
Электронный уровень (n)	Сколько может разместиться электронов на данном уровне ($2n^2$)
1	2 ↑↓
2	8 ↑↓
3	18 ↑↓
4	32 ↑↓

Химические свойства элемента определяются электронами самого последнего (наиболее отдаленного от ядра) заселенного уровня

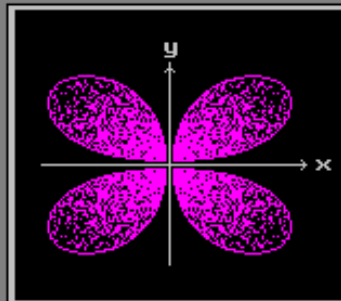
Типы атомных орбиталей



s -орбиталь

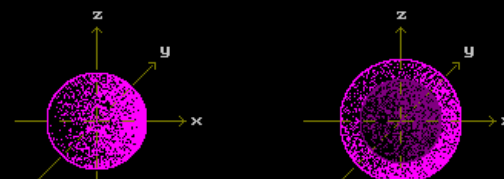


p_x -орбиталь



d_{xy} -орбиталь

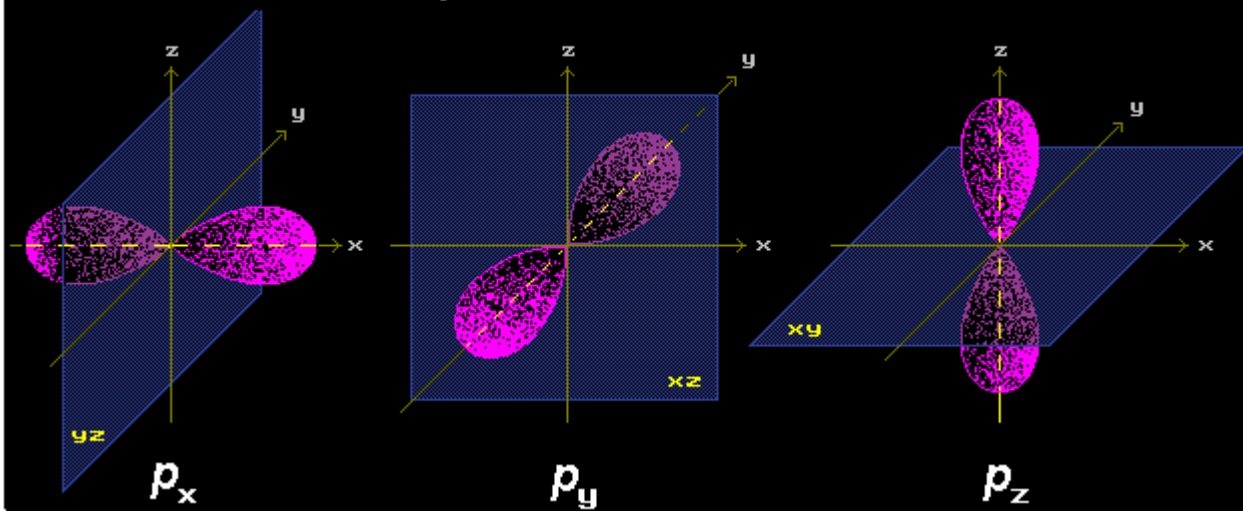
s -ОРБИТАЛИ



$1s$

$2s$

p -ОРБИТАЛИ

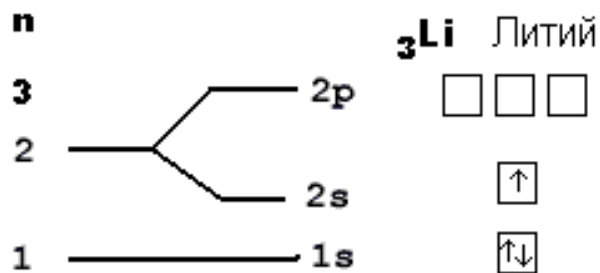
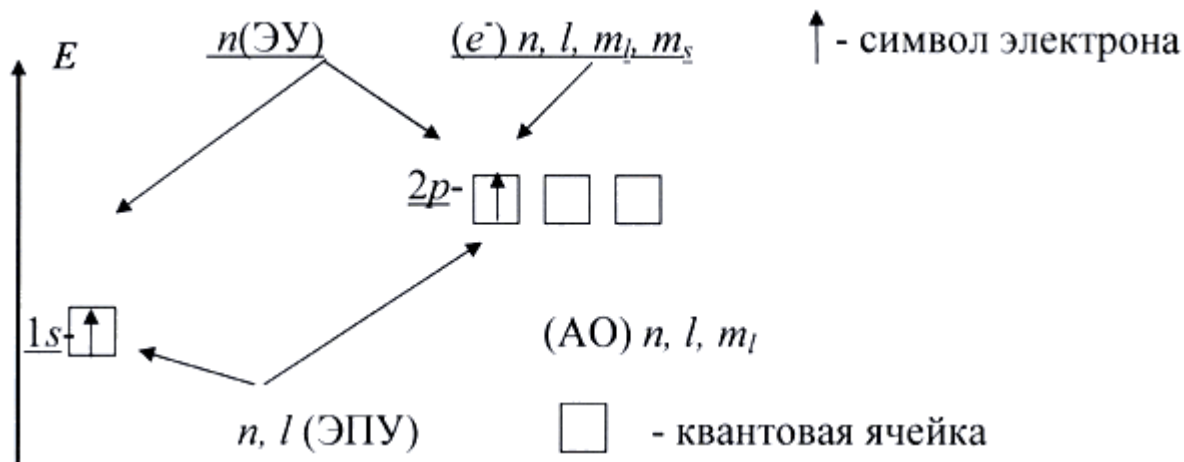


p_x

p_y

p_z

ОРБИТАЛЬНАЯ ДИАГРАММА



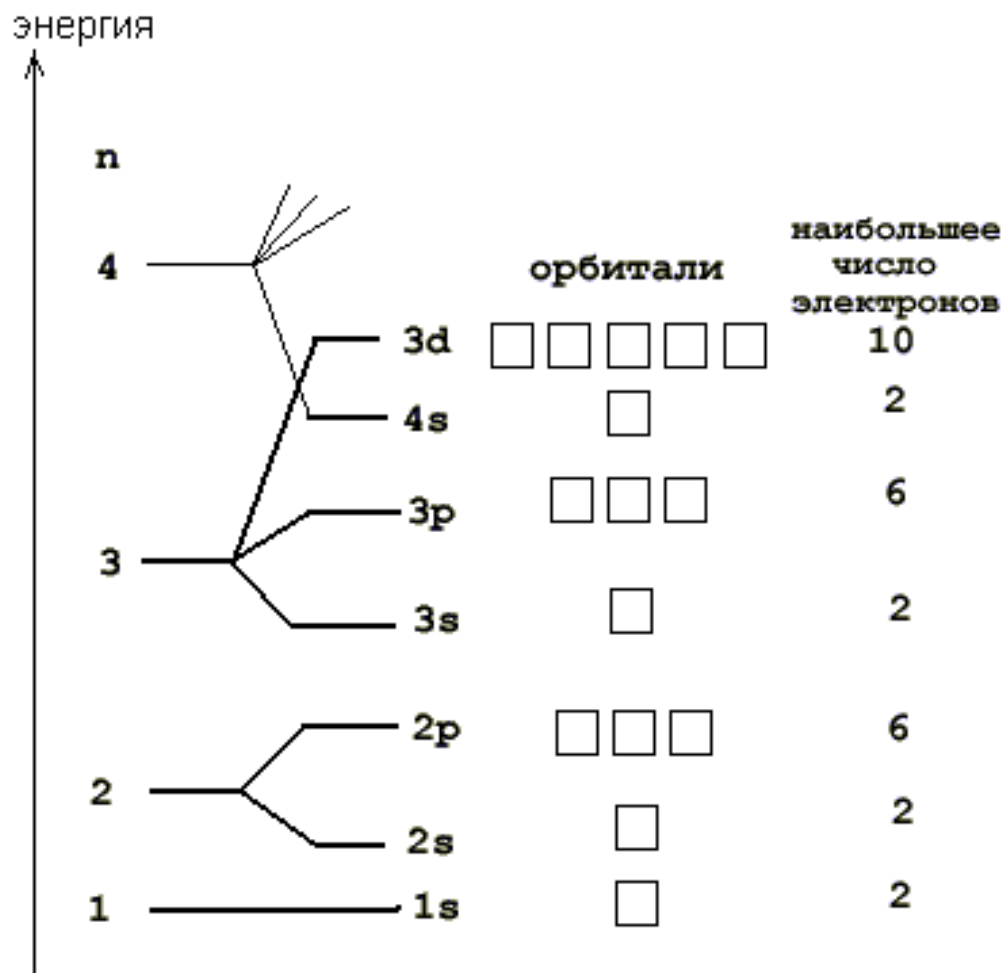
Электронная формула водорода - $1s^1$

Электронная формула гелия - $1s^2$

Электронная формула лития - $1s^2 2s^1$

- ПРИНЦИП МИНИМУМА ЭНЕРГИИ – в первую очередь заполняются более низкие, ближайшие к ядру уровни и подуровни.

ПОРЯДОК ЗАПОЛНЕНИЯ ОРБИТАЛЕЙ НА ЭЛЕКТРОННЫХ УРОВНЯХ АТОМА



Порядок заполнения уровней и подуровней в атомах большинства элементов:

1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 4s, 3d, 4p, 5s, 4d, 5p, 6s, 4f, 5d, 6p, 7s, 5f, 6d, ...

Чем дальше от ядра располагаются уровни и подуровни, тем выше их энергия. По некоторым (до сих пор не вполне понятным) причинам 4s-подуровень большинства атомов (за исключением атомов самых "легких" элементов) заполняется электронами раньше, чем 3d-подуровень. Такие аномалии встречаются и на более высоких уровнях.

Порядок заполнения уровней и подуровней в атомах большинства элементов:

1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 4s, 3d, 4p, 5s, 4d, 5p, 6s, 4f, 5d, 6p, 7s, 5f, 6d, ...

При этом энергия электронов на заполняемой орбите выше чем на заполненной.

Правила заполнения электронных оболочек

1. Сначала выясняем, сколько всего электронов содержит атом элемента. Для этого достаточно знать заряд его ядра, который, всегда равен порядковому номеру элемента в Периодической таблице Д.И.Менделеева.

Порядковый номер (число протонов в ядре) в точности равен и числу электронов во всем атоме.

2. Последовательно заполняем орбитали, начиная с нижней 1s-орбитали, имеющимися электронами. При этом нельзя располагать на каждой орбитали более двух электронов.

3. Записываем *электронную формулу* элемента.

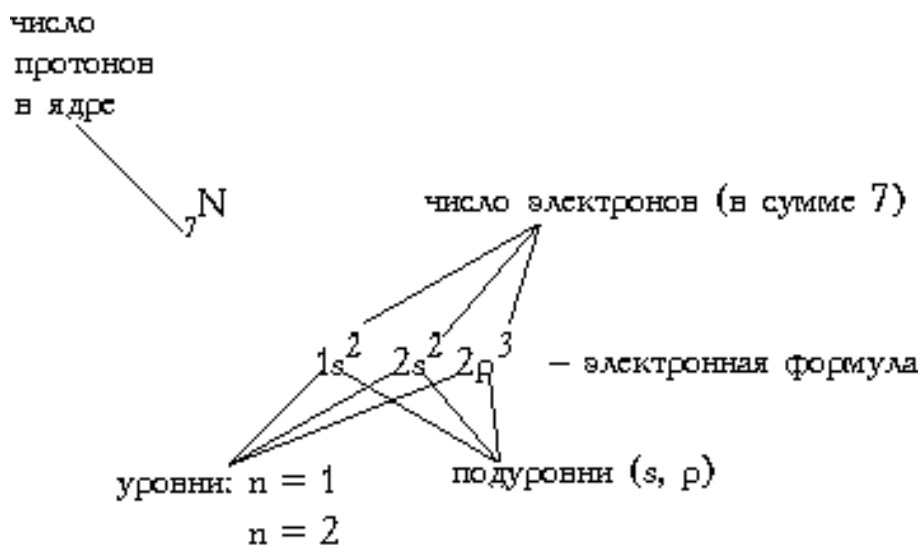
Электронная формула описывает распределение электронов по энергетическим уровням, существующим в электронном облаке. Такое распределение называется также *электронной конфигурацией* атома.

Пример: выяснить электронную формулу элемента с порядковым номером 7.

В атоме такого элемента должно быть 7 электронов. Заполним орбитали семью электронами, начиная с нижней 1s-орбитали.

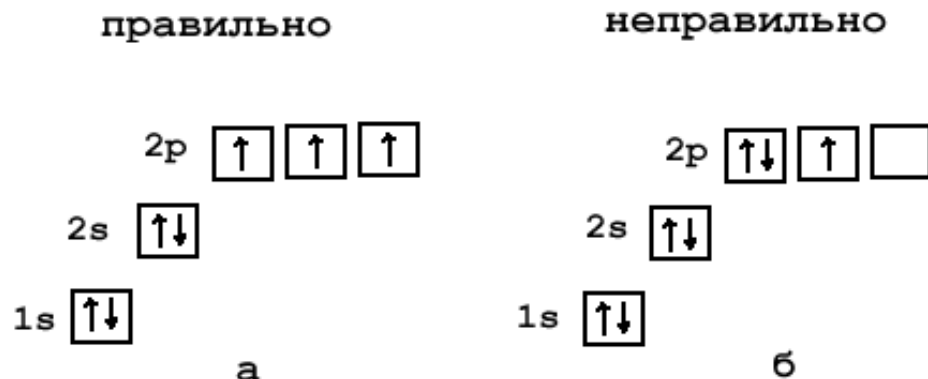
2 электрона расположатся на 1s-орбитали, еще 2 электрона - на 2s-орбитали, а оставшиеся 3 электрона смогут разместиться на трех 2p-орбиталях.

Электронная формула элемента с порядковым номером 7 (это элемент азот, имеющий символ “N”) выглядит так:



ПРАВИЛО ГУНДА

- При наличии орбиталей с одинаковой энергией (например, трех p -орбиталей одного подуровня) каждая орбиталь заполняется вначале **наполовину** (и поэтому на p -подуровне не может быть более трех неспаренных электронов), а затем уже полностью, с образованием **электронных пар**
- В каждой из орбиталей подслоя заполняется сначала один электрон, а только после исчерпания незаполненных орбиталей на эту орбиталь добавляется второй электрон. При этом на одной орбитали находятся два электрона с полупротивными спинами (образуют двухэлектронное облако) и, в результате, суммарный спин орбитали становится равным нулю.



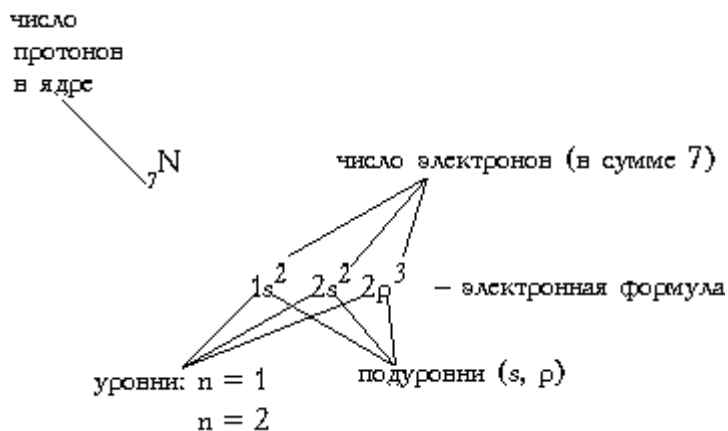
Правильная (а) и неправильная (б) орбитальная диаграмма азота. В соответствии с правилом Гунда орбитали заселяются сначала одиночными, а не спаренными электронами.

- **Внешний уровень** атома - самый далекий от ядра уровень, на котором еще есть электроны. Именно эта оболочка соприкасается при столкновении с внешними уровнями других атомов в химических реакциях.

Например, при взаимодействии с другими атомами азот способен принять 3 дополнительных электрона на свой внешний уровень. При этом атом азота получит *завершенный*, то есть **максимально заполненный внешний электронный уровень**, на котором расположатся 8 электронов.

- **Завершенный** уровень энергетически выгоднее незавершенного. Поэтому атом азота должен легко реагировать с любым другим атомом, способным предоставить ему 3 дополнительных электрона для завершения его внешнего уровня.

- Каждый заполненный внешний электронный уровень благородных элементов содержит $(s^2 + p^6)$ то есть 8 электронов. *Заполненные* внешние электронные уровни являются причиной химической инертности благородных элементов, поскольку все другие элементы имеют частично незаполненные внешние электронные уровни.



ПРАВИЛО ОКТЕТА

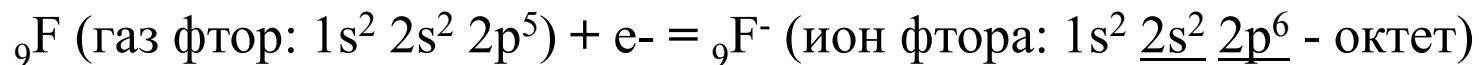
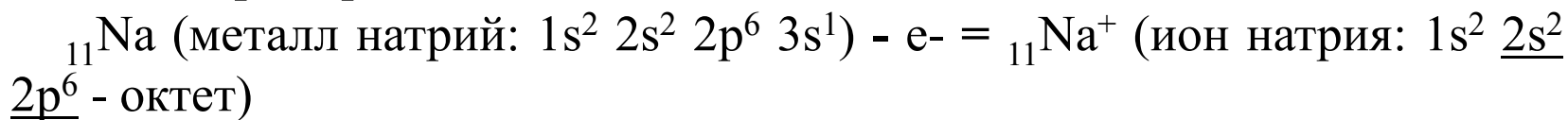
Химические свойства "не благородных" элементов связаны с их стремлением завершить свои внешние электронные оболочки.

Атомы элементов стремятся создавать завершенные внешние электронные уровни (оболочки) из **8 электронов**, отдавая свои электроны другим атомам или, наоборот, принимая электроны других атомов. Такой обмен электронами и вызывает все многообразие химических реакций.

Атомы элементов стремятся к наиболее устойчивой электронной конфигурации. Устойчивой является электронная конфигурация с завершенным внешним электронным уровнем из $(s^2 + p^6)$, т.е. из октета электронов.

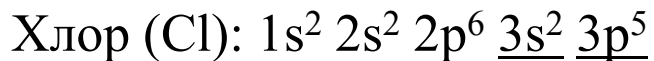
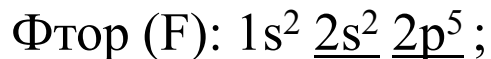
С правилом октета тесно связаны *донорные* и *акцепторные* свойства атомов. Атомы - *доноры* электронов - склонны достигать октета, отдавая "лишние" электроны со своих внешних электронных уровней. Это атомы, у которых внешние электронные уровни только начинают застраиваться. Наоборот, атомы-*акцепторы* электронов легче достраивают свои внешние уровни до октета, принимая на них электроны других атомов. Обычно это элементы с уже почти завершенными внешними электронными уровнями.

Принимая или отдавая электроны, атомы могут превращаться в ионы. Например:



При прочих равных условиях - то есть при одинаковом строении внешних уровней, более акцепторные свойства проявляют более "легкие" элементы.

Например, два близких по свойствам газа - **фтор** (порядковый номер 9) и **хлор** (порядковый номер 17) - имеют одинаковое строение внешних электронных уровней:



Акцепторные свойства фтора выше, потому что его внешний электронный уровень находится ближе к ядру, чем у хлора. Это означает, что фтор (по сравнению с хлором) в химических реакциях ведет себя более "агрессивно" и легче заполняет свой внешний уровень до октета, забирая недостающий электрон у какого-либо другого элемента.

ПОРЯДОК ЗАПОЛНЕНИЯ ОРБИТАЛЕЙ НА ЭЛЕКТРОННЫХ УРОВНЯХ АТОМА

- Принцип устойчивости
- Принцип Паули
- Правило Хунда

Разрешенные и неразрешенные электронные конфигурации

Разрешенная конфигурация

Неразрешенные конфигурации

Принцип Паули

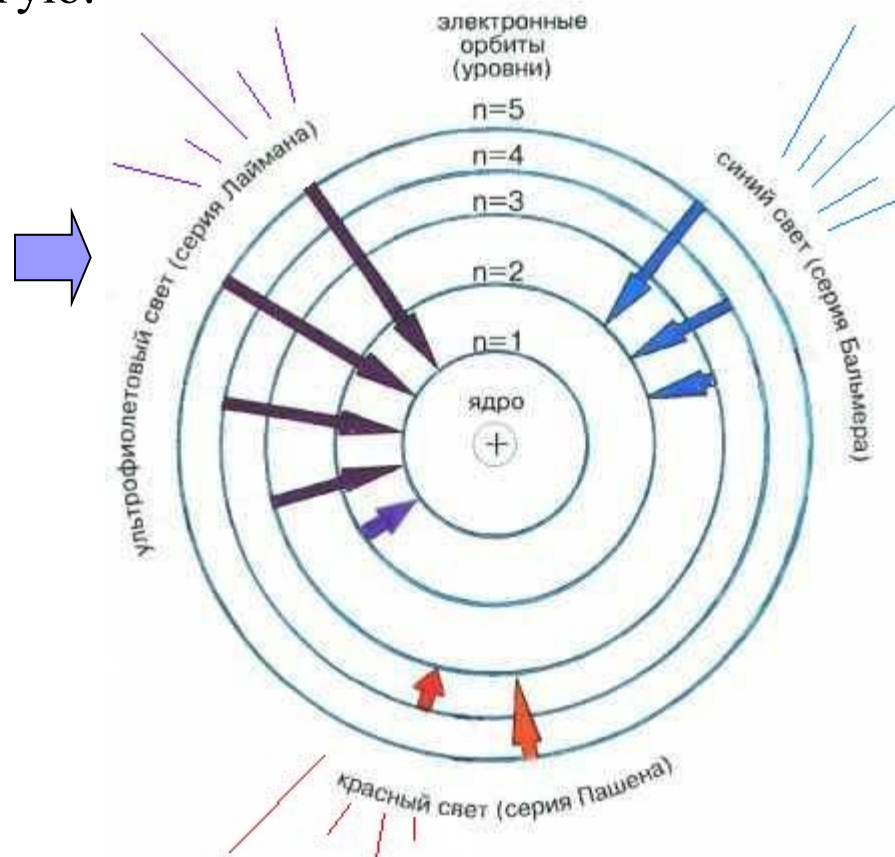
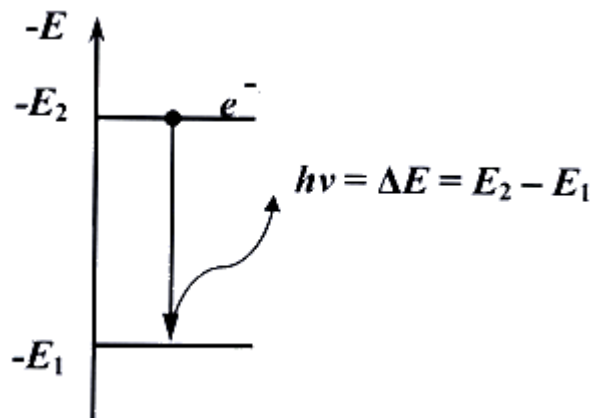
Правило Хунда
(на примере атома углерода)

В химических превращениях принимают участие электроны внешнего электронного уровня – **валентные электроны**.

ПОСТУЛАТЫ БОРА

- В атоме существуют орбиты, находясь на которых электрон не излучает энергию. Эти орбиты называются **стационарными**.
- Излучение происходит только при переходе электрона с одной стационарной орбиты на другую.

Свет испускается возбужденным атомом при переходе электрона с верхних стационарных орбит (уровней) на нижние.



Еще до появления модели Бора физики научились различать в таких спектрах близко расположенные линии, отличающиеся по внешнему виду. Одни из них (очень узкие) получили название "резких" (от англ. **sharp**). Наиболее яркие линии называли "главными" (от англ. **principle**). Наблюдались более широкие линии - их называли "размытыми" (**diffuse**). Еще один сорт линий имеет название "фундаментальных" (от англ. **fundamental**). По первым буквам английских названий говорили о наличии в спектрах испускания **s-, p-, d-** и **f-линий**.

В спектрах атомов более сложных, чем водород, постоянные электронные уровни могут состоять из нескольких близко расположенных подуровней:

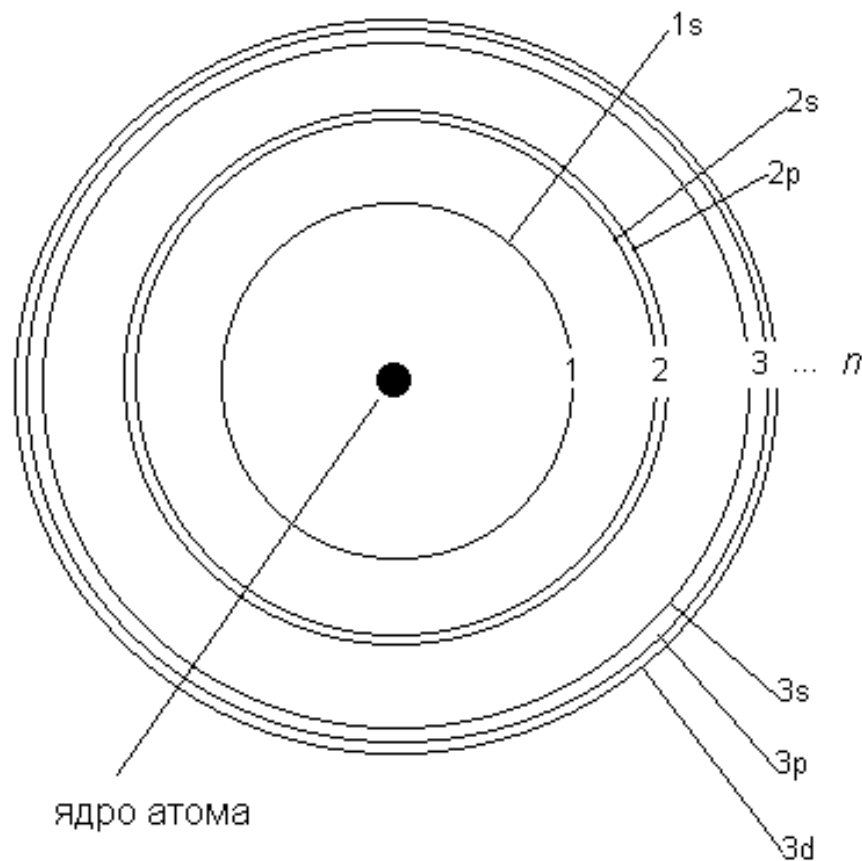
s-подуровень назван по "резкой" (**sharp**) линии,

p-подуровень назван по "главной" (**principal**) линии,

d-подуровень назван по "диффузной", "размытой" (**diffuse**) линии,

f-подуровень назван по "фундаментальной" (**fundamental**) линии.

Электронные подуровни атома, объясняющие происхождение в спектрах "резких" (sharp), "главных" (principle) и "размытых" (diffuse) линий. Более высокие уровни на рисунке не показаны



ГЛАВНЫЕ КВАНТОВЫ ЧИСЛА

Каждая атомная орбиталь (положение электрона) характеризуется набором из четырех квантовых чисел: главного n , орбитального l , магнитного m_l и спинового квантового числа m_s

- **Главное квантовое число n** характеризует энергию атомной орбитали. Оно может принимать любые положительные целочисленные значения. Чем больше значение n , тем выше энергия и больше размер орбитали.
- **Орбитальное квантовое число l** характеризует энергетический подуровень. Атомные орбитали с разным орбитальными квантовыми числами различаются энергией и формой. Для каждого n разрешены целочисленные значения l от 0 до $(n-1)$. Значения $l=0, 1, 2, 3\dots$ соответствуют энергетическим подуровням s, p, d, f.
- **Магнитное квантовое число m_l** отвечает за ориентацию атомных орбиталей в пространстве относительно внешнего магнитного и электрического поля. Для каждого значения l магнитное квантовое число m_l может принимать целочисленные значения от $-l$ до $+l$ (всего $2l+1$ значений).
- **Спиновое квантовое число m_s** характеризует спин электрона (вращение заряда электрона вокруг собственной оси по и против часовой стрелки). Спиновое квантовое число может принимать только два значения $+1/2$ и $-1/2$.

Главное квантовое число n определяет энергию электрона и размеры электронных облаков. Энергия электрона главным образом зависит от расстояния электрона от ядра: чем ближе к ядру находится электрон, тем меньше его энергия.

Главное квантовое число имеет значения ряда целых чисел от 1 до ∞ . При значении главного квантового числа, равного единице ($n=1$), электрон находится на первом энергетическом уровне, расположенном на минимально возможном расстоянии от ядра. Полная энергия такого электрона наименьшая.

Энергетические уровни обозначают прописными буквами согласно схеме:

<i>Значение n.....</i>	<i>1</i>	<i>2</i>	<i>3</i>	<i>4</i>	<i>5</i>
<i>Обозначение.....</i>	<i>K</i>	<i>L</i>	<i>M</i>	<i>N</i>	<i>Q</i>

Орбитальное квантовое число l характеризует энергетический подуровень.

Атомные орбитали с разными орбитальными квантовыми числами различаются энергией и формой. Для каждого n разрешены целочисленные значения l от 0 до $(n-1)$. Значения $l = 0, 1, 2, 3...$ соответствуют энергетическим подуровням s, p, d, f .

$l = 0$ – это s-подуровень

$l = 1$ – это p-подуровень

$l = 2$ – это d-подуровень

$l = 3$ – это f-подуровень

Значения l тесно связаны с *числом орбиталей* на каждом подуровне. Например, в значении $l = 2$ “скрыты” пять орбиталей d-подуровня: -2, -1, 0, +1, +2. Значение $l = 1$ дает три орбитали p-подуровня: -1, 0, +1. А при $l = 0$ орбиталь на s-подуровне только одна. Нетрудно вычислить, что в значении $l = 3$ “зашифрованы” семь орбиталей f-подуровня: -3, -2, -1, 0, +1, +2, +3

Магнитное квантовое число m_l .

Магнитное квантовое число m_l отвечает за ориентацию атомных орбиталей в пространстве относительно внешнего магнитного или электрического поля. Для каждого значения l магнитное квантовое число m_l может принимать целочисленные значения от $-l$ до $+l$ (всего $2l + 1$ значений).

Например, p -орбитали ($l = 1$) могут быть ориентированы тремя способами ($m_l = -1, 0, +1$).

Например, при $l = 1$ число m принимает 3 значения: $+1, 0, -1$, поэтому существуют 3 типа p -АО: p_x, p_y, p_z .

Внешнее магнитное или электрическое поле изменяет пространственную ориентацию электронных облаков, поэтому при воздействии магнитного или электрического поля происходит расщепление энергетических подуровней электронов. В магнитном и электрическом полях наблюдается расщепление атомных спектральных линий.

Атомные орбитали (АО).

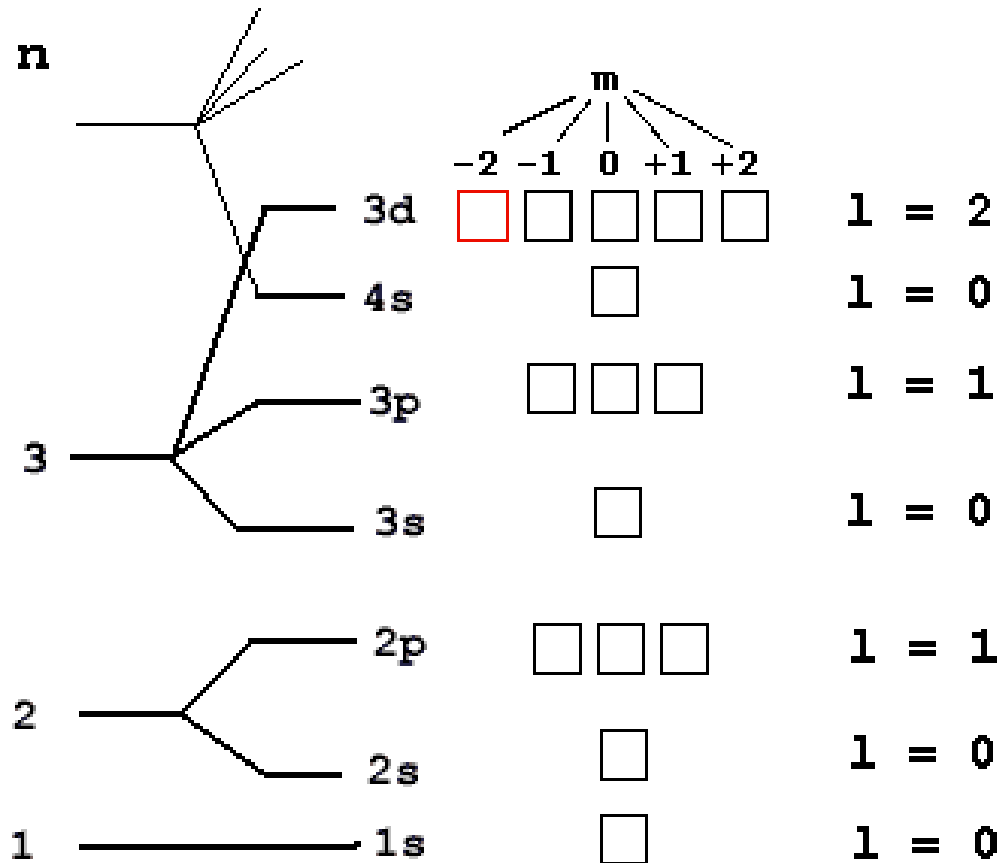
Совокупность положений электрона в атоме, характеризующихся определенными значениями квантовых чисел n , l и m_l , называют атомной орбиталью (АО).

Спиновое квантовое число m_s .

Электрон, двигаясь в поле ядра атома, кроме орбитального момента импульса обладает также собственным моментом импульса, характеризующим его веретенообразное вращение вокруг собственной оси. Это свойство электрона получило название **спина**.

Величину и ориентацию спина характеризует спиновое квантовое число m_s , которое может принимать значения $m_s = +\frac{1}{2}$ и $m_s = -\frac{1}{2}$. Положительное и отрицательное значения спина связаны с его направлением. Поскольку спин — величина векторная, его условно обозначают стрелкой, направленной вверх или вниз: \downarrow или \uparrow .

ГЛАВНЫЕ КВАНТОВЫЕ ЧИСЛА ДЛЯ ОПИСАНИЯ ЭЛЕКТРОННЫХ ОБОЛОЧЕК АТОМОВ



Определим “адрес”, орбитали, которая на рисунке выделена красным цветом

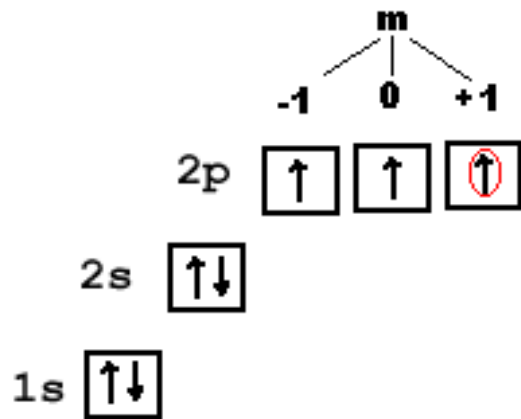
Принцип или ***запрет Паули***:

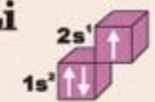

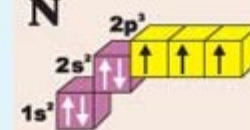


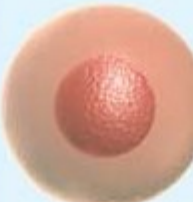


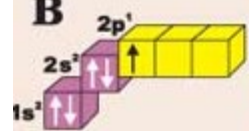

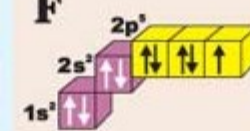

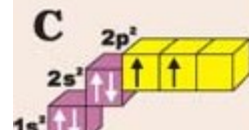

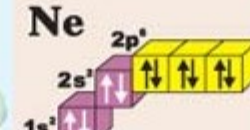

Никакие два электрона в одном атоме не могут характеризоваться одинаковым набором всех четырех квантовых чисел.

Совокупность состояний электрона в атоме с одним и тем же значением n называют **энергетическим уровнем**. Число уровней, на которых находятся электроны в основном состоянии атома, совпадает с номером периода, в котором располагается элемент. Номера этих уровней обозначают цифрами: 1, 2, 3, ... (реже - буквами K, L, M, \dots).

Энергетический подуровень - совокупность энергетических состояний электрона в атоме, характеризующихся одними и теми же значениями квантовых чисел n и l . Подуровни обозначают буквами: s, p, d, f, \dots . Первый энергетический уровень имеет один подуровень, второй - два подуровня, третий - три подуровня и так далее.

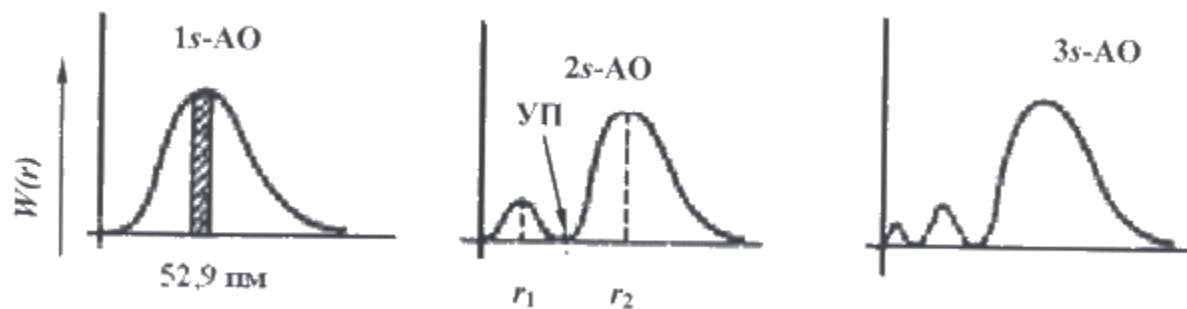
${}^7\text{N}$ Азот



Электронная схема	Орбитальная модель	Электронная схема	Орбитальная модель
<p>Li</p> 		<p>N</p> 	
<p>Be</p> 		<p>O</p> 	
<p>B</p> 		<p>F</p> 	
<p>C</p> 		<p>Ne</p> 	

n	l	АО	m_l	Энергетические подуровни	Максимальное число электронов на энергетическом уровне
1	0	1s	0	$\uparrow\downarrow$	2
2	0	2s	0	$\uparrow\downarrow$	8
	1	2p	-1, 0, 1	$\uparrow\downarrow \uparrow\downarrow \uparrow\downarrow$	
3	0	3s	0	$\uparrow\downarrow$	18
	1	3p	-1, 0, 1	$\uparrow\downarrow \uparrow\downarrow \uparrow\downarrow$	
	2	3d	-2, -1, 0, 1, 2	$\uparrow\downarrow \uparrow\downarrow \uparrow\downarrow \uparrow\downarrow \uparrow\downarrow$	

Электронная плотность



ГЛАВНЫЕ КВАНТОВЫ ЧИСЛА

q.n.	values		meaning
n	1,2,3..	K,L,M,N,...	principal quantum number
l	0,1,2...(n-1)	s,p,d,f,....	subshells of n
m_l	0,±1,±2,...(±l)	-	number of states for each subshell
m_s	±1/2	-	spin moment, oriented up or down (±1/2)

- **ПРИНЦИП ПАУЛИ** – никакие два электрона в одном атоме не могут характеризоваться одинаковым набором всех четырех квантовых чисел, то есть на каждой орбите может находиться не больше двух электронов, различающихся спинами (спаренные электроны). Максимальное количество электронов в подоболочках s, p, d, f равно соответственно 2, 6, 8, 10 и 14.

ПЕРИОДИЧЕСКАЯ СИСТЕМА ХИМИЧЕСКИХ ЭЛЕМЕНТОВ Д.И.МЕНДЕЛЕЕВА

www.calc.ru



Д.И. Менделеев
1834–1907

Периоды	Ряды	Г Р У П П Ы Э Л Е М Е Н Т О В																Энергетические уровни	
		I		II		III		IV		V		VI		VII		VIII			
		а	б	а	б	а	б	а	б	а	б	а	б	а	б	а	б		
1	1	H водород 1,008															He гелий 4,003	2	
2	2	Li литий 6,941	Be бериллий 9,0122	B бор 10,811	C углерод 12,011	N азот 14,007	O кислород 15,999	F фтор 18,998									Ne неон 20,179	10	
3	3	Na натрий 22,99	Mg магний 24,312	Al алюминий 26,982	Si кремний 28,086	P фосфор 30,974	S сера 32,064	Cl хлор 35,453									Ar аргон 39,948	18	
4	4	K калий 39,102	Ca кальций 40,08		Sc скандий 44,956	Ti титан 47,956	V ванадий 50,941	Cr хром 51,996	Mn марганец 54,938	Fe железо 55,849	Co кобальт 58,933	Ni никель 58,7							
	5	Cu медь 63,546	Zn цинк 65,37	Ga галлий 69,72	Ge германий 72,59	As мышьяк 74,922	Se селен 78,96	Br бром 79,904										Kr криптон 83,8	36
5	6	Rb рубидий 85,468	Sr стронций 87,62		Y иттрий 88,906	Zr цирконий 91,22	Nb ниобий 92,906	Mo молибден 95,94	Tc технеций [99]	Ru рутений 101,07	Rh родий 102,906	Pd палладий 106,4							
	7	Ag серебро 107,868	Cd кадмий 112,41	In индий 114,82	Sn олово 118,69	Sb сурьма 121,75	Te теллур 127,6	I иод 126,905										Xe ксенон 131,3	54
6	8	Cs цезий 132,905	Ba барий 137,34	57–71 лантаноиды		Hf гафний 178,49	Ta тантал 180,948	W вольфрам 183,85	Re рений 186,207	Os осмий 190,2	Ir иридий 192,22	Pt платина 195,09							
	9	Au золото 196,967	Hg ртуть 200,59	Tl таллий 204,37	Pb свинец 207,19	Bi висмут 208,98	Po полоний [210]	At астат [210]										Rn радон [222]	86
7	10	Fr франций [223]	Ra радий [226]	89–103 актиноиды		Rf резерфордий [261]	Db дубний [262]	Sg сиборгий [263]	Bh борий [262]	Hn ханний [265]	Mt мейтнерий [265]								
Высшие оксиды		R ₂ O	RO	R ₂ O ₃	RO ₂	R ₂ O ₅	RO ₃	R ₂ O ₇	RO ₄										
Летучие водородные соединения					RH ₄	RH ₃	H ₂ R	HR											

СИМВОЛ ЭЛЕМЕНТА ПОРЯДКОВЫЙ НОМЕР



НАЗВАНИЕ ЭЛЕМЕНТА
ОТНОСИТЕЛЬНАЯ АТОМНАЯ МАССА

РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ЭЛЕКТРОНОВ ПО СЛОЯМ

- s-элементы
- p-элементы
- d-элементы
- f-элементы

Л А Н Т А Н О И Д Ы

57 La лантан 138,906	58 Ce церий 140,12	59 Pr празеодим 140,908	60 Nd неодим 144,24	61 Pm прометий [145]	62 Sm самарий 150,4	63 Eu европий 151,96	64 Gd гадолиний 157,25	65 Tb тербий 158,926	66 Dy диспрозий 162,5	67 Ho гольмий 164,93	68 Er эрбий 167,26	69 Tm тулий 168,934	70 Yb иттербий 173,04	71 Lu лютеций 174,97
-----------------------------------	---------------------------------	--------------------------------------	----------------------------------	-----------------------------------	----------------------------------	-----------------------------------	-------------------------------------	-----------------------------------	------------------------------------	-----------------------------------	---------------------------------	----------------------------------	------------------------------------	-----------------------------------

А К Т И Н О И Д Ы

89 Ac актиний [227]	90 Th торий 232,038	91 Pa протактиний [231]	92 U уран 238,29	93 Np нептуний [237]	94 Pu плутоний [244]	95 Am амерций [243]	96 Cm кюрий [247]	97 Bk берклий [247]	98 Cf калифорний [251]	99 Es эйнштейний [254]	100 Fm фермий [257]	101 Md менделевий [258]	102 No нобелий [259]	103 Lr лоуренсий [260]
----------------------------------	----------------------------------	--------------------------------------	-------------------------------	-----------------------------------	-----------------------------------	----------------------------------	--------------------------------	----------------------------------	-------------------------------------	-------------------------------------	----------------------------------	--------------------------------------	-----------------------------------	-------------------------------------

ТАБЛИЦА МЕНДЕЛЕЕВА

Номер группы в Периодической системе определяет число валентных электронов а атомах элементов.

В группах А – элементы, в которых идет заселение *s*- и *p*-подуровней – *s*-элементы (IA- и IIA-группы) и *p*-элементы (IIIA-VIIIA-группы),

В группах Б – элементы, в которых заселяются *d*-подуровни - *d*-элементы.

Номер периода в периодической системе соответствует числу энергетических уровней атома данного элемента, заполненных электронами.

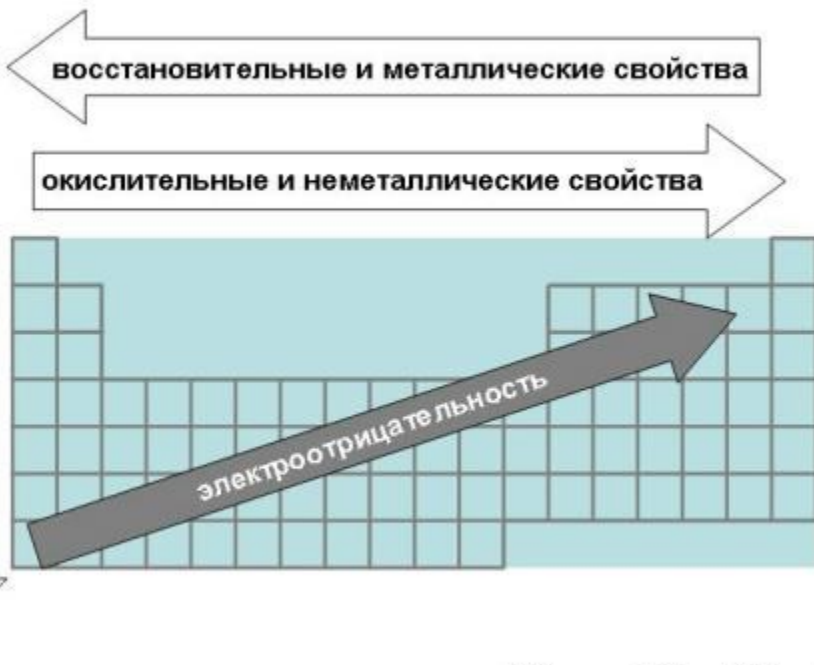
В группах – элементы с похожими химическими свойствами, в периодах химические свойства постепенно изменяются.

В левой части периодов элементы проявляют ярко выраженные восстановительные свойства (металлы Li, Na, Mg, Ca).

В правой части собраны типичные неметаллы, обладающие окислительными свойствами (O, F, Cl).

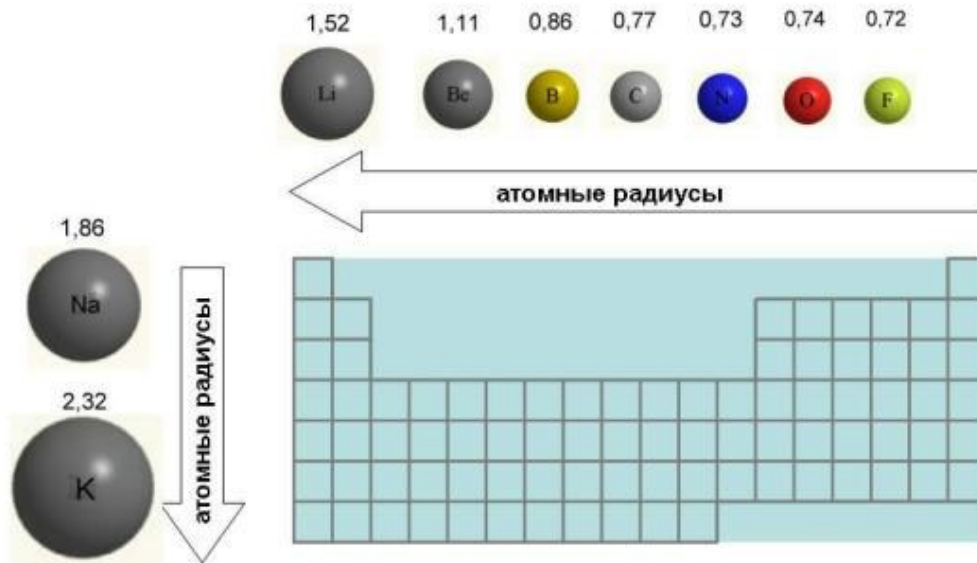
Периодическое изменение свойств элементов в периоде объясняется последовательностью заполнения электронами уровней и подуровней в атомах при увеличении порядкового номера элемента и заряда ядра атома.

Элемент	Порядковый номер	Заселение электронами АО			Электронная конфигурация
		1s	2s	2p	
C	6	$\boxed{\uparrow\downarrow}$	$\boxed{\uparrow\downarrow}$	$\boxed{\uparrow\uparrow\quad}$	$[\text{He}]2s^22p^2$
N	7	$\boxed{\uparrow\downarrow}$	$\boxed{\uparrow\downarrow}$	$\boxed{\uparrow\uparrow\uparrow}$	$[\text{He}]2s^22p^3$
O	8	$\boxed{\uparrow\downarrow}$	$\boxed{\uparrow\downarrow}$	$\boxed{\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow}$	$[\text{He}]2s^22p^4$
F	9	$\boxed{\uparrow\downarrow}$	$\boxed{\uparrow\downarrow}$	$\boxed{\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow}$	$[\text{Ne}]2s^22p^5$
Ne	10	$\boxed{\uparrow\downarrow}$	$\boxed{\uparrow\downarrow}$	$\boxed{\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow}$	$[\text{Ne}]2s^22p^6$



B БОР	C УГЛЕРОД	N АЗОТ	O КИСЛОРОД	F ФТОР	Ne НЕОН
Al АЛЮМИНИЙ	Si КРЕМНИЙ	P ФОСФОР	S СЕРА	Cl ХЛОР	Ar АРГОН
Ga ГАЛЛИЙ	Ge ГЕРМАНИЙ	As МЫШЬЯК	Se СЕЛЕН	Br БРОМ	Kr КРИПТОН
In ИНДИЙ	Sn ОЛОВО	Sb СУРЬМА	Te ТЕЛЛУР	I ИОД	Xe КСЕНОН
Tl ТАЛЛИЙ	Pb СВИНЕЦ	Bi ВИСМУТ	Po ПОЛОНИЙ	At АСТАТ	Rn РАДОН

МЕТАЛЛЫ **ПОЛУМЕТАЛЛЫ** НЕМЕТАЛЛЫ



МАГНИТНЫЕ И ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ АТОМА

Собственный магнитный момент электрона – квантуется по направлению параллельно или противоположно приложенному магнитному полю.

Спаренные электроны – занимают одну орбиталь и имеют противоположно направленные спины (гасят друг друга).

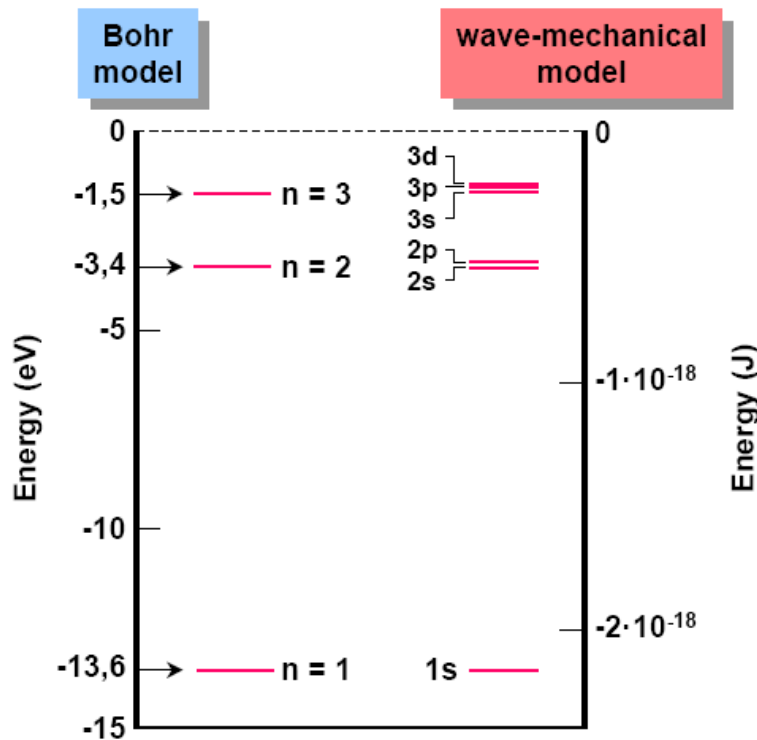
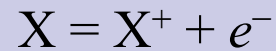
Диамагнитные атомы – имеют только спаренные электроны, выталкиваются из магнитного поля.

Парамагнитные атомы – имеют один или несколько неспаренных электронов, втягиваются в магнитное поле.

Магнитный момент атома, характеризующий интенсивность взаимодействия атома с магнитным полем, практически пропорционален числу неспаренных электронов.

ЭНЕРГИЯ ИОНИЗАЦИИ

Энергия (потенциал) ионизации атома E_i – энергия, необходимая для отрыва электрона от нейтрального невозбужденного атома.



Энергия электрона в атоме
водорода

Энергия ионизации атома водорода соответствует переходу электрона с 1s-подуровня энергии (-1312,1 кДж/моль) на подуровень с нулевой энергией и равна +1312,1 кДж/моль.

СРОДСТВО К ЭЛЕКТРОНУ

Сродство атома к электрону A_e – способность атомов присоединять добавочный электрон и превращаться в отрицательный ион.

Энергию, освобождающуюся при присоединении электрона к нейтральному невозбужденному атому с образованием аниона, называют **энергией сродства к электрону**.

Наибольшим сродством к электрону обладают атомы галогенов: F – 3.4 эВ, Cl – 3,6 эВ, Br – 3,4 эВ, I – 3.1 эВ.

ЭЛЕКТРООТРИЦАТЕЛЬНОСТЬ

Электроотрицательность характеризует способность атома химического элемента смещать в свою сторону электронное облако при образовании химической связи (в сторону элемента с более высокой электроотрицательностью):

$$\chi = 1/2 (E_i + A_e)$$

Электроотрицательность элементов подчиняется периодическому закону: она растет слева направо в периодах и снизу вверх в главных подгруппах Периодической системы элементов Д.И. Менделеева.

Элемент	K	Na	Li	Mg	H	S	C	I	Br	Cl	N	O	F
χ	0.8	0.9	1.0	1.2	2.1	2.5	2.5	2.5	2.8	3.0	3.0	3.5	4.0

ВАЛЕНТНОСТЬ

- Внешняя электронная оболочка атома, если она не полностью заполнена, называется **валентной оболочкой**, а электроны этой оболочки называются **валентными электронами**. Число валентных электронов определяет то, как атом связывается с другими атомами посредством химической связи. Путём образования химических связей атомы стремятся заполнить свои внешние валентные оболочки.
- Элементы с одинаковым числом валентных электронов формируют группу, которая изображается в таблице в виде столбца (движение по горизонтальному ряду соответствуют заполнению валентной оболочки электронами). Элементы, находящиеся в самом правом столбце таблицы, имеют полностью заполненную электронами внешнюю оболочку, поэтому они отличаются крайне низкой химической активностью и называются инертными или благородными газами.

ЭЛЕКТРООТРИЦАТЕЛЬНОСТЬ

- Электроотрицательность χ (греч. *χι*) — способность атома удерживать внешние (валентные) электроны. Она определяется степенью притяжения этих электронов к положительно заряженному ядру.
- Это свойство проявляется в химических связях как **смещение электронов связи в сторону более электроотрицательного атома.**

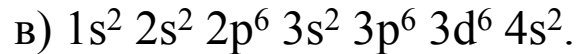
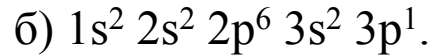
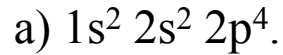
Электроотрицательность атомов, участвующих в образовании химической связи – один из главных факторов, который определяет не только ТИП, но и СВОЙСТВА этой связи, и тем самым влияет на характер взаимодействия между атомами при протекании химической реакции.

Электроотрицательность элементов подчиняется периодическому закону: она растет слева направо в периодах и снизу вверх в главных подгруппах Периодической системы элементов Д.И. Менделеева.

Элемент	K	Na	Li	Mg	H	S	C	I	Br	Cl	N	O	F
χ	0.8	0.9	1.0	1.2	2.1	2.5	2.5	2.5	2.8	3.0	3.0	3.5	4.0

ЗАДАЧИ

1. Элементы имеют следующие электронные формулы:



Какие это элементы?

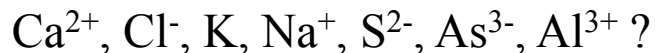
2. Элемент имеет внешний электронный уровень такого строения: $\dots 3p^3$. Что это за элемент?

3. Заполните пропуски в таблице:

Символ	$^{14}_7\text{N}$	$^{35}_{17}\text{Cl}^-$			
Число протонов	7		18		17
Число нейтронов	7		22	20	20
Число электронов	7	18		18	18
Суммарный заряд	0	-1	0	+2	

ЗАДАЧИ

4. Какие из перечисленных атомов и ионов имеют электронные конфигурации, одинаковые с атомом ${}_{18}\text{Ar}$:



5. Какие из перечисленных подуровней не существуют: $2s$, $4f$, $2p$, $3d$, $1p$, $2d$, $1s$, $3f$?

6. Сколько электронов и протонов содержит молекула аммиака NH_3 ?

7. Даны элементы с зарядами ядер $Z = 3$ и $Z = 19$. Который из них лучший донор электронов?