

Строение атома

План

- 1. Экспериментальные основы теории**
- 2. Корпускулярно-волновое описание электрона. Квантовые числа**
- 3. Принципы построения и способы изображения электронных структур**
- 4. Строение атома и периодическая система элементов**

АТОМ

- ***Устойчивая микросистема элементарных частиц, состоящая из положительно заряженного ядра и электронов, движущихся в околоядерном пространстве***

- **Ядро атома** состоит из протонов и нейтронов
- **Число протонов** в ядре равно порядковому номеру элемента и числу электронов в атоме
- **Атом**
- *электронейтрален*

Свойства элементарных частиц

Частица	поло- жение	заряд	масса (у.е.)
Протон (p)	ядро	+1	1,00728
Нейтрон (n)	ядро	0	1,00867
Позитрон (e)	ядро	+1	0,00055
Электрон(e) 0,00055	обо-	-1 лочка	

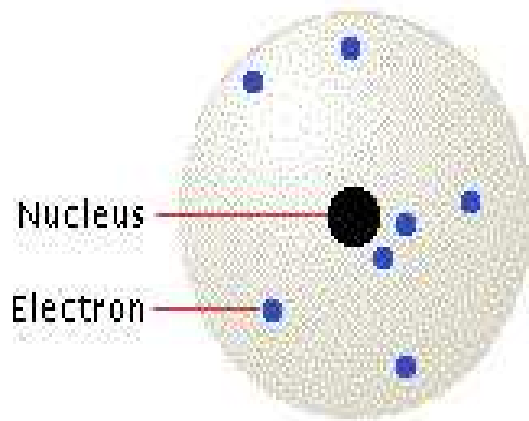
Экспериментальные основы

- **Спектральный анализ**
(Г. Кирхгоф, 1859)
- **Периодический закон**
(Д. Менделеев 1869)
- **Фотоэффект** (А. Столетов, 1888)
- **Катодные лучи** (Ж. Перрен, 1895)
- **Рентгеновские лучи** (В. Рентген 1895)
- **Радиоактивность**
(Л. Беккерель, 1896)
- **Открытие электрона**
(Дж. Томпсон, 1897)

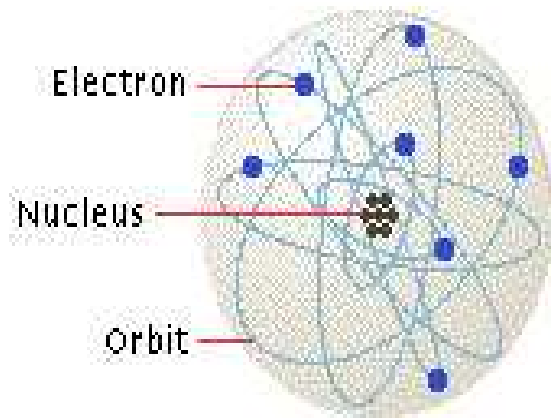
Модели атома

- **Модель Томсона**
- **Планетарная модель Резерфорда (1911)**
- **Квантово-механическая модель Бора (1913),**
- **Корпускулярно-волновая модель Н. Бор, Л. де Бройль, Ф. Хунд, Э. Шредингер, П. Дирак, В. Паули, В. Гейзенберг, М. В. Клоковский**

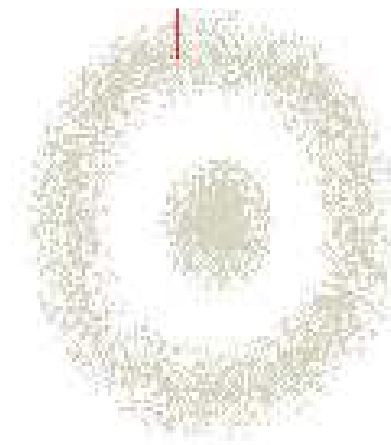
Модели атома



Резерфорд

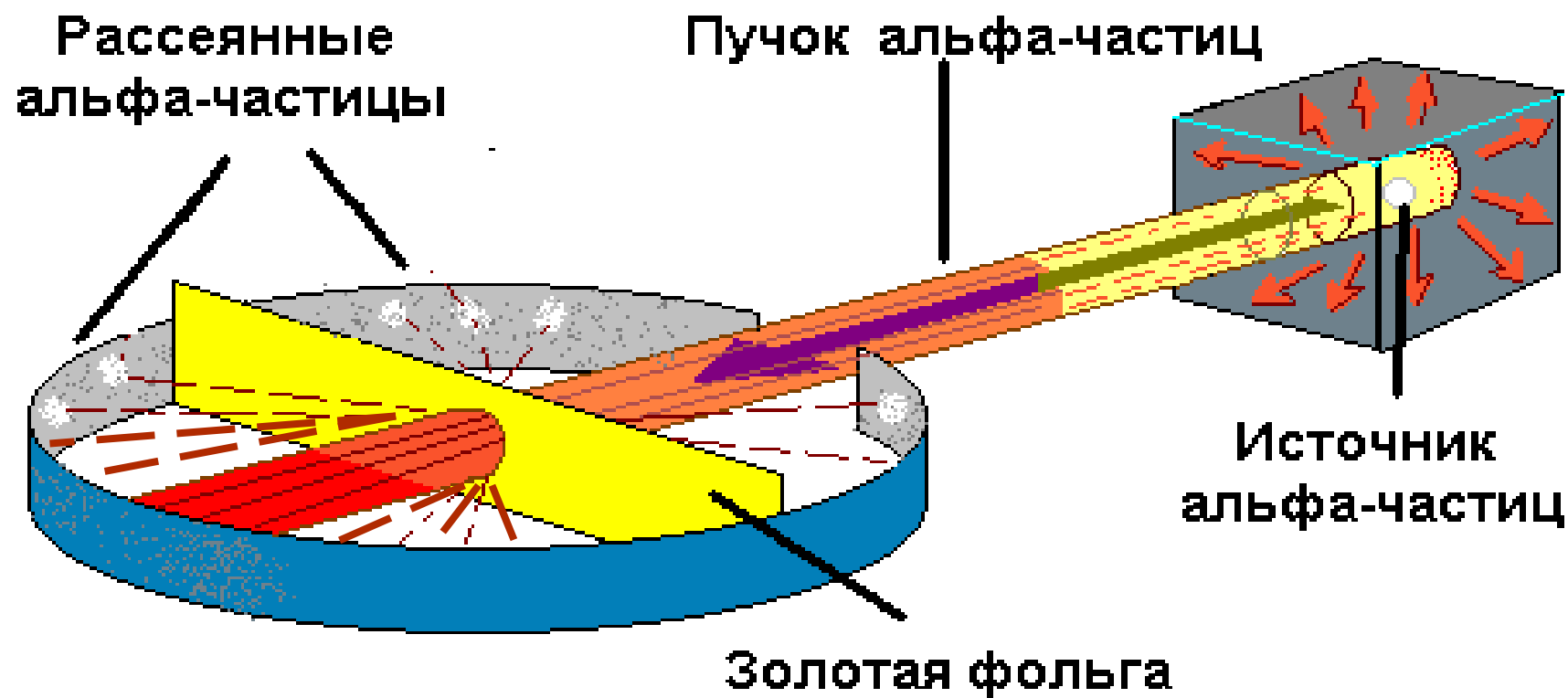


Нильс Бор



Квантовая
модель

Исследование атомов Резерфордом



Основы квантовых представлений

- В попытках объяснить *линейчатые спектры атомов* и *спектр излучения абсолютно черного тела* ученые пришли к выводу о двойственной природе света и микрочастиц - они являются **дискретными частицами** материи (корпускулами) и одновременно им соответствует **длина волны**, которая характеризует их движение. Можно выделить три принципа квантовой механики:

Принцип квантования

(М. Планк, 1900)

- атомы излучают энергию порциями, кратными некоторой минимальной величине - *кванту* (*фотон*) - **h**

$$E = h\nu$$

$h = 6,626 \cdot 10^{-34}$ (Дж·с) – пост. Планка

2. Принцип дуализма (корпускулярно-волновой природы)

- При свободном движении электронов проявляются волновые свойства
- При взаимодействии с веществом – корпускулярные
- волновые и корпускулярные свойства присущи электронам одновременно $\lambda = \frac{h}{m v}$

3. Принцип неопределенности (В. Гейзенберг, 1925)

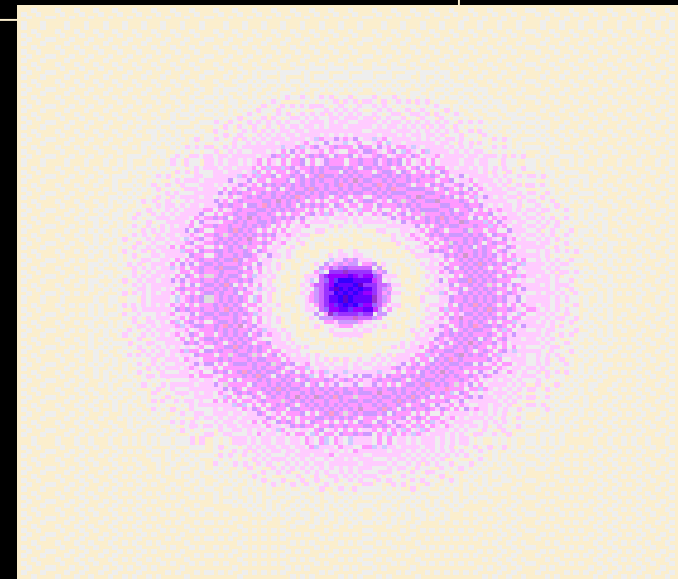
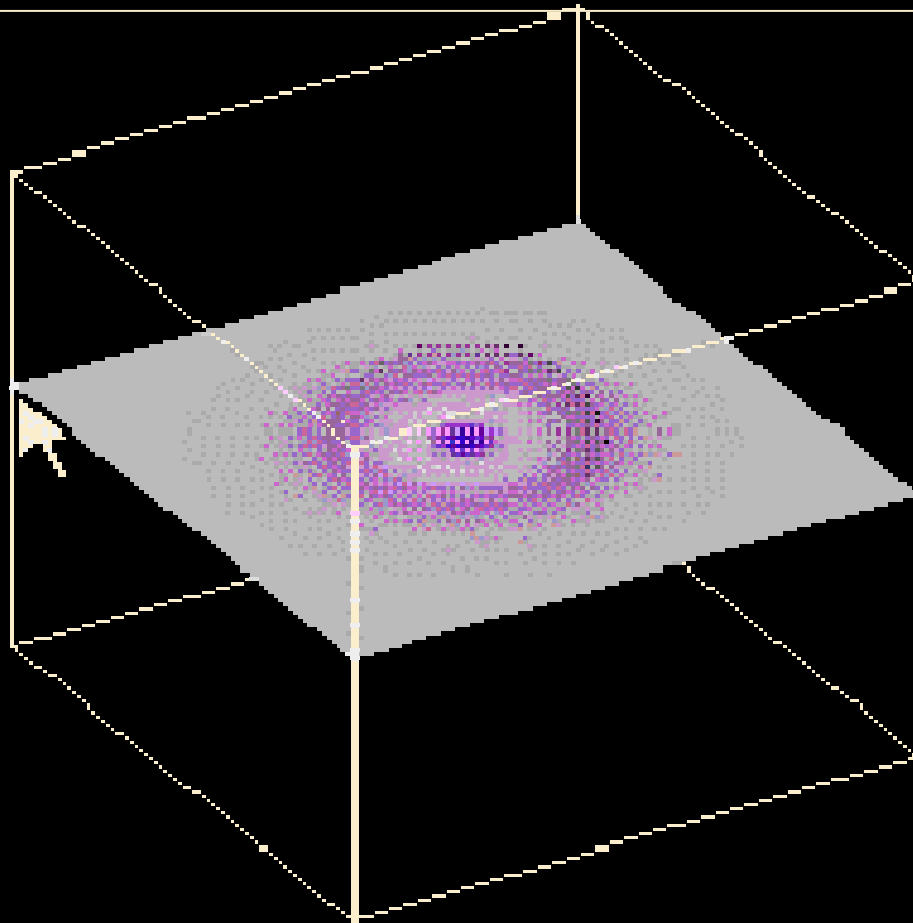
- Движение электрона в атоме не может быть точно фиксировано
- Координаты и скорость движения электрона в атоме можно найти лишь с некоторой неточностью, определяемой соотношением:

$$\Delta X \cdot \Delta(mv_x) \geq \frac{\hbar}{2\pi}$$

Некоторые выводы из квантовых представлений

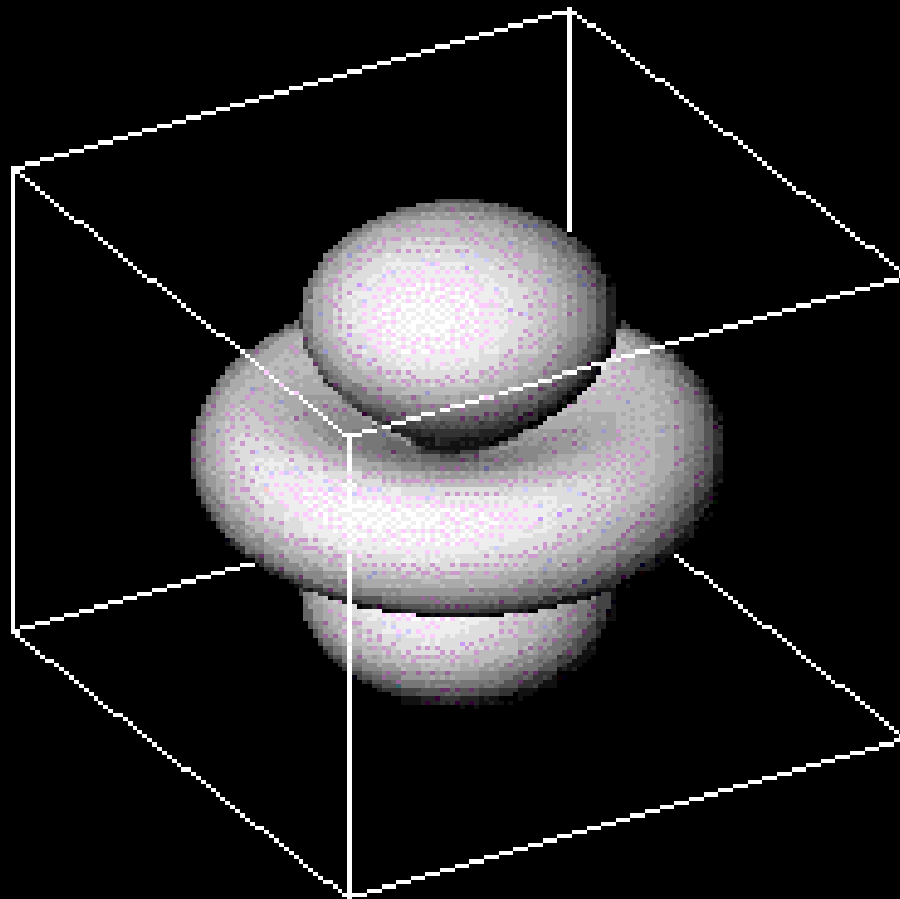
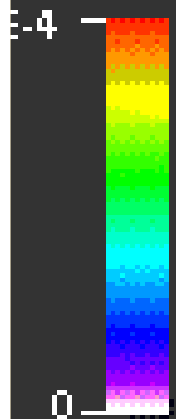
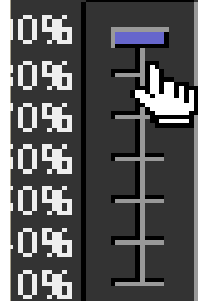
- Положение электрона можно характеризовать лишь вероятностью его пребывания в конкретной области пространства
- Область наиболее вероятного пребывания электрона в атоме называют атомной орбиталью - АО
- Вероятность обнаружения электрона пропорциональна квадрату волновой функции - ψ^2

Вероятностная модель



$$\psi^2(z, \delta) = \left[\frac{1}{4\sqrt{2\pi}} (z - R) e^{-R/2} \right]^2$$

Орбиталь d_{z^2}



$$\psi^2(3d_{z^2}) = \left[\frac{1}{81\sqrt{6}\pi} (3z^2 - R^2) e^{-R/3} \right]^2$$

Уравнение Шредингера - уравнение трехмерной волны

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

В квантовой механике движение электрона в атоме представляется в виде *стоячей волны*, для которой характерен набор колебаний с длинами волн: $\lambda, \lambda/2, \lambda/3, \dots, \lambda/n$; т.е. движение характеризуется **квантовым числом - n**

Квантовые числа

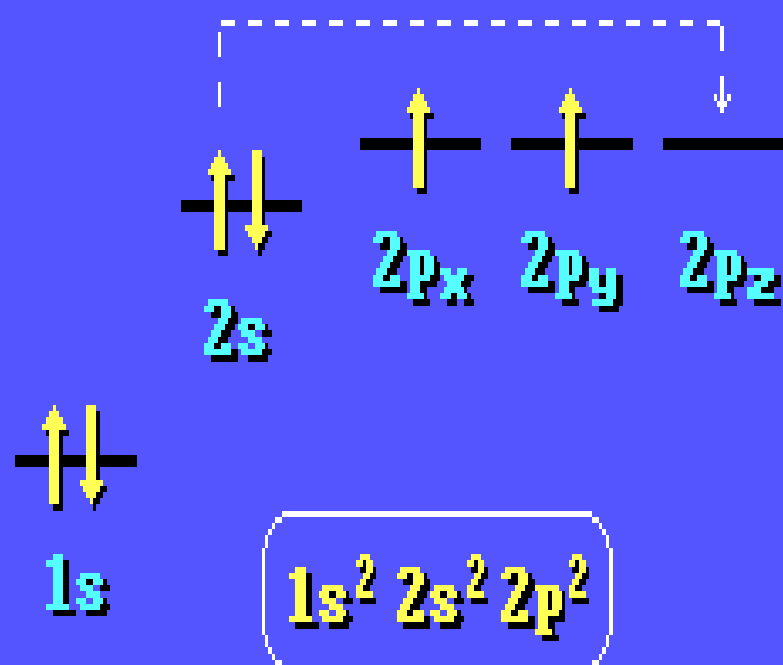
- Движение электрона **трехмерно**. Соответственно имеется - **три квантовых числа**.
- В сферической системе координат эти числа связаны с изменением R , φ и θ – размера, формы и ориентации электронного облака

Главное квантовое число(n)

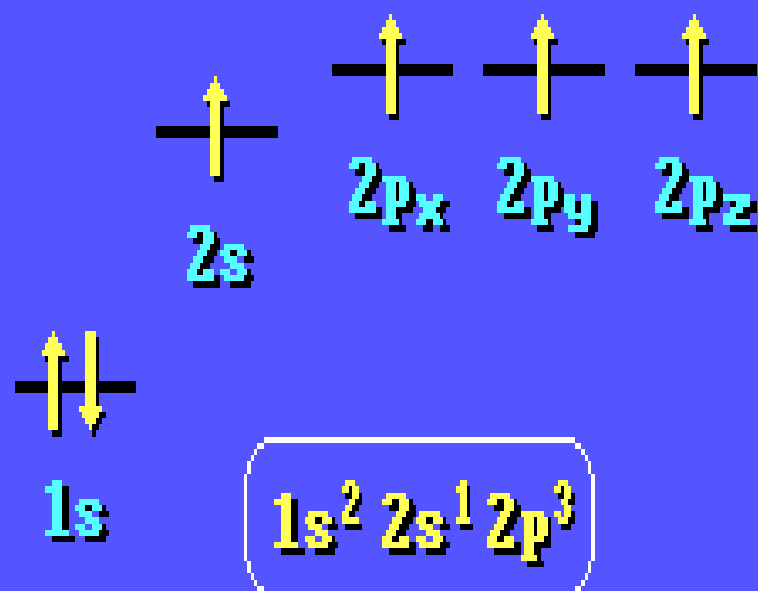
- $n = 1, 2, 3, \dots, \infty$, определяет энергию электрона в атоме и R АО
- **Энергетический уровень** - состояние электронов в атоме с определённым значением главного квантового числа
(**Основное состояние** атома - min энергия электронов;
Возбужденное состояние – более

СОСТОЯНИЯ АТОМА УГЛЕРОДА

Невозбужденное (основное)
состояние



Возбужденное состояние



■ Орбитальное кв. число (l)

■ $l = 0, 1, 2, 3, \dots, n-1$

s, p, d, f, g, h, \dots (всего n значений)

l определяет распределение волновой функции в околоядерном пространстве – форму АО

■ Магнитное квантовое число (m_l)

характеризует ориентацию электронных облаков в пространстве

■ m_l — целые числа от $-l$ до $+l$, всего

может быть $2l + 1$ значений

■ Например:

$$l = 0 (s); \quad m_l = 0$$

$$l = 1 (p); \quad m_l = 0, +1, -1$$

$$l = 2 (d); \quad m_l = 0, +1, -1, +2, -2$$

- **Спиновое квантовое число (m_s)** характеризует собственный магнитный момент электрона, который или совпадает с ориентацией орбитального момента, или направлен в противоположную сторону.
- m_s принимает значения: **$+1/2$** или **$-1/2$**

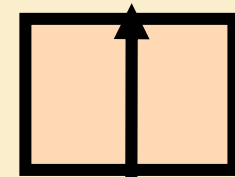
Атомная орбиталь (АО)

- это состояние электрона в атоме, которое описывается волновой функцией с набором из трех квантовых чисел n, l, m_l

- Число АО определяется числом значений m_l

- Условное изображение АО

- АО обозначают с помощью кв. чисел



- Пример:

- $1s(n = 1, l = 0, m_l = 0)$ — одна АО

- $2p(n = 2, l = 1, m_l = -1, 0, +1)$ — три АО

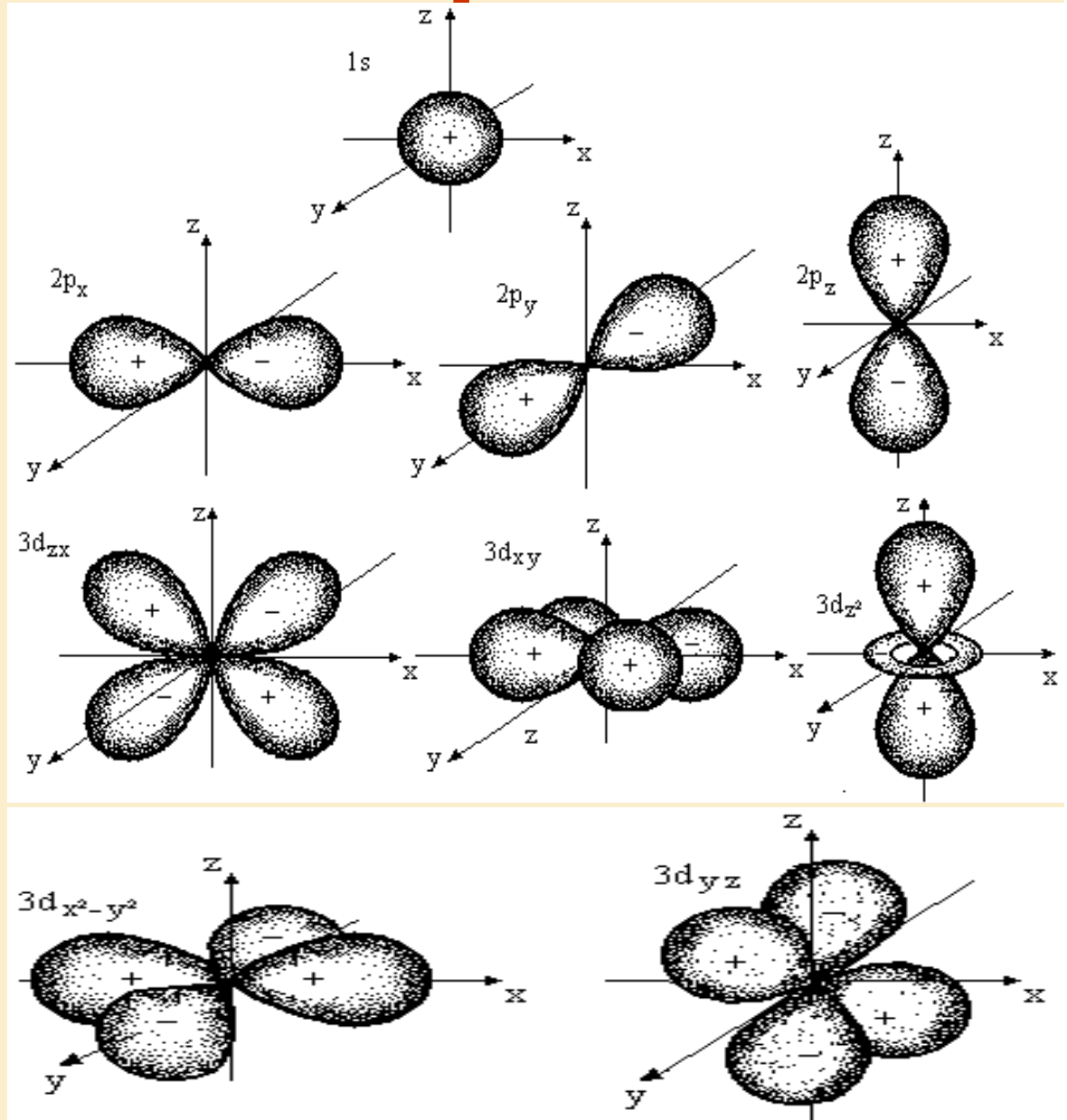
Формы атомных орбиталей

S

P_x, P_y, P_z

d_{xz}, d_{xy}, d_{z^2}

$d_{x^2-y^2}, d_{yz}$



Закономерности формирования электронных структур

- **Принцип наименьшей энергии:** электрон размещается на АО с минимальной энергией
- **Принцип Паули:** в атоме не может быть двух электронов с одинаковым набором всех четырех кв.чисел (определяет емкость АО)
- **Правила Гунда:** на одном подуровне
 - (1) суммарный спин электронов максимален,
 - (2) сумма m_l при этом максимальна

Правила Клечковского

- Заполнение электронами подуровней происходит в порядке **возрастания** суммы $(n + l)$
- Если сумма $(n+l)$ для двух подуровней одинакова, то сначала электроны заполняют АО с **меньшим n**

Последовательность АО (по правилам Клечковского)

- Принципу наименьшей энергии соответствует последовательность заполнения энергетических уровней и подуровней:
 - АО $1s2s2p3s3p4s3d4p5s4d5p6s4f5d6p7s$
 - $n+l$ 1 2 3 3 4 4 5 5 5 6 6 6 7 7 7 7

Графическое правило Клечковского

Орбитальное квантовое число l

		0	1	2	3	4
Главное квантовое число	1	1s				
	2	2s	2p			
	3	3s	3p	3d		
	4	4s	4p	4d	4f	
	5	5s	5p	5d	5f	5g
	6	6s	6p	6d	6f	6g
	7	7s	7p			

Сумма $(n+l)$

Способы изображения электронных структур

- **Электронная формула** –

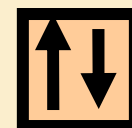
использует n и l ,

n - цифра, l – буква (s, p, d, f)

- **Электронно – графическая формула**

- m_l – квантовая ячейка

m_s - $+1/2$, $-1/2$



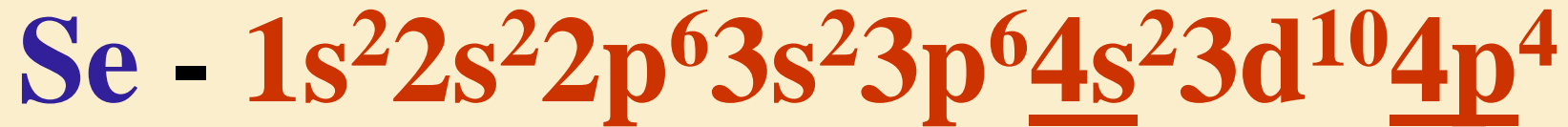
- **Энергетическая диаграмма** -



Примеры электронных

структур

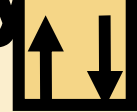
Полная электронная формула



Краткая формула Se - $\underline{4s^2} \underline{4p^4}$

Электроно-графическая формула

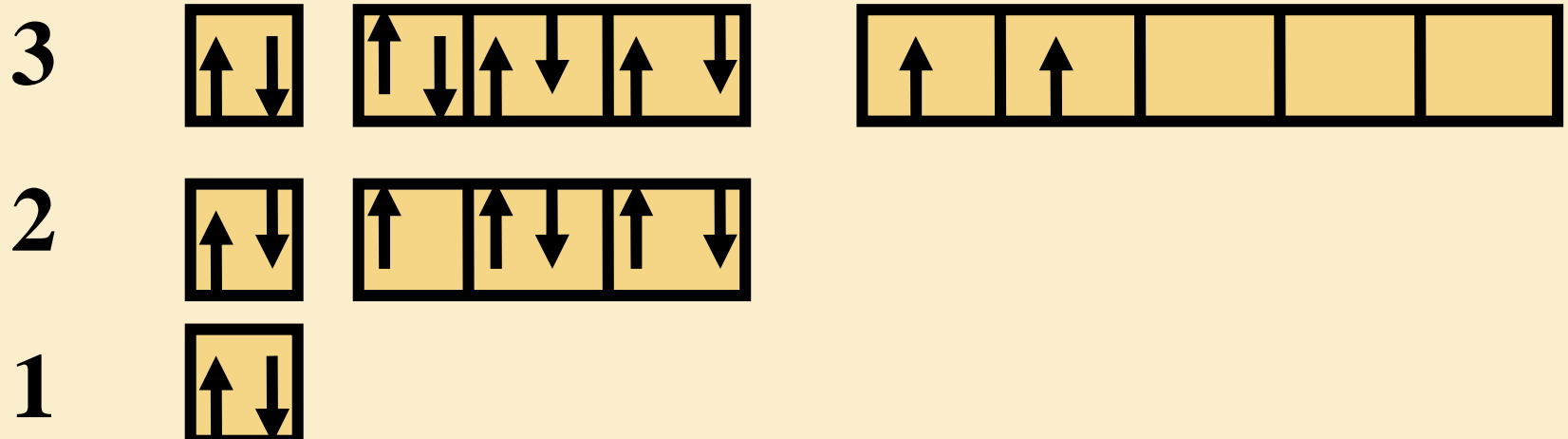
4 s



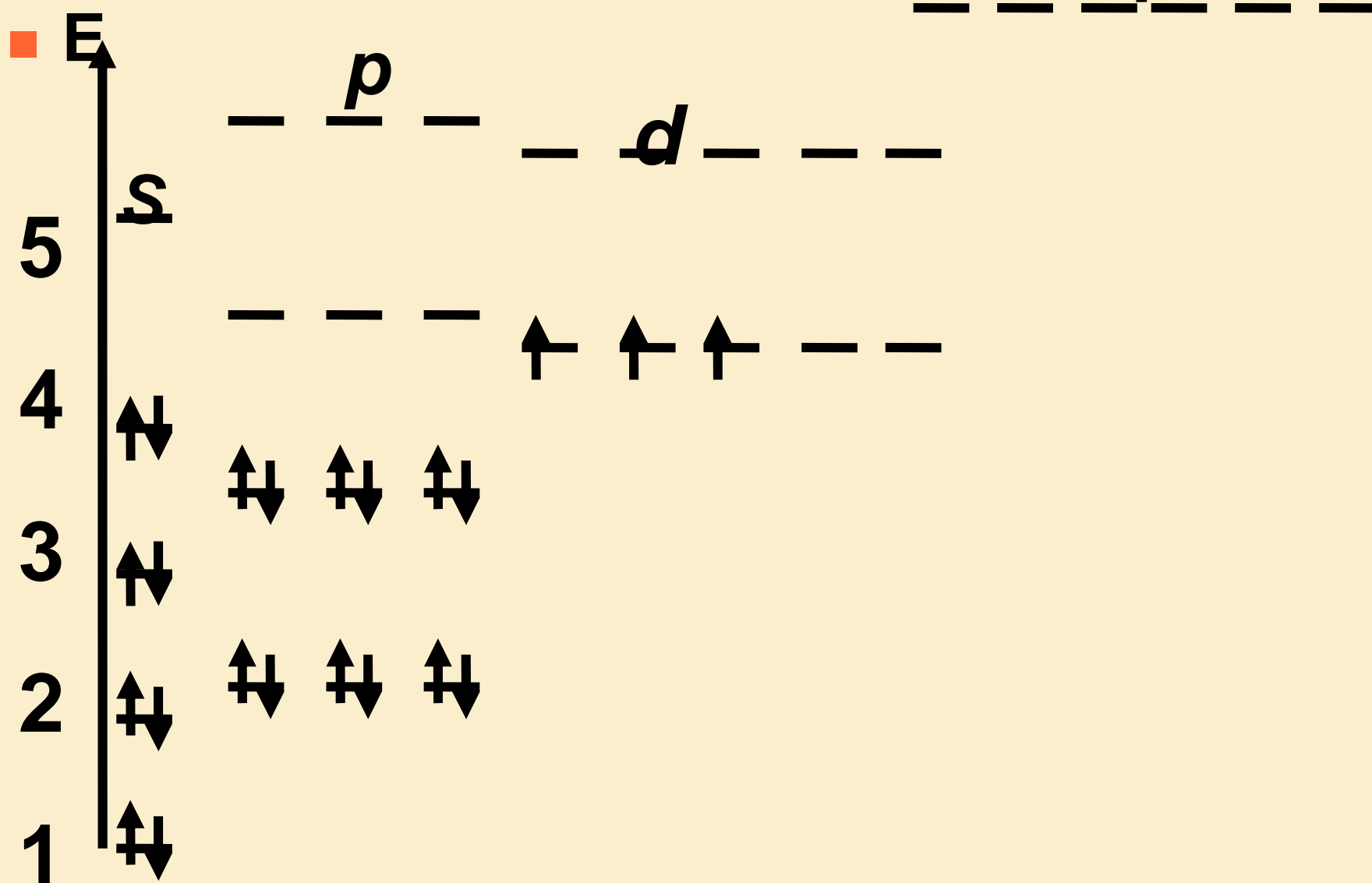
p

Ti

d



Энергетическая диаграмма ванадия



Количество электронов

- - на подуровне l - $2(2l+1)$ электрона;
- - на уровне n - $2n^2$ электронов.

Номера элементов, завершающих подуровни

$1s^2$	$2s^2$	$2p^6$	$3s^2$	$3p^6$	$4s^2$	$3d^{10}$	$4p^6$	$5s^2$	$4d^{10}$
2	4	10	12	18	20	30	36	38	48

$5p$	$6s^2$	$4f^{14}$	$5d^{10}$	$6p^6$	$7s^2$	$5f^{14}$	$6d^{10}$	$7p^6$
54	56	70	80	86	88	102	112	118

Периодическая система элементов

Д.И. Менделеева (1869г.)

- «Свойства элементов, а также формы и свойства их соединений находятся в периодической зависимости от **атомных весов**»

Необходимо объяснить:

- В чем причина периодичности?
- Почему элементы одной группы имеют одинаковую валентность и образуют одинаковые соединения?
- Почему число элементов в периодах не одинаковое?
- Почему в ПС расположение элементов не всегда соответствует возрастанию атом. массы (Ar – K, Co – Ni, Te – I)?

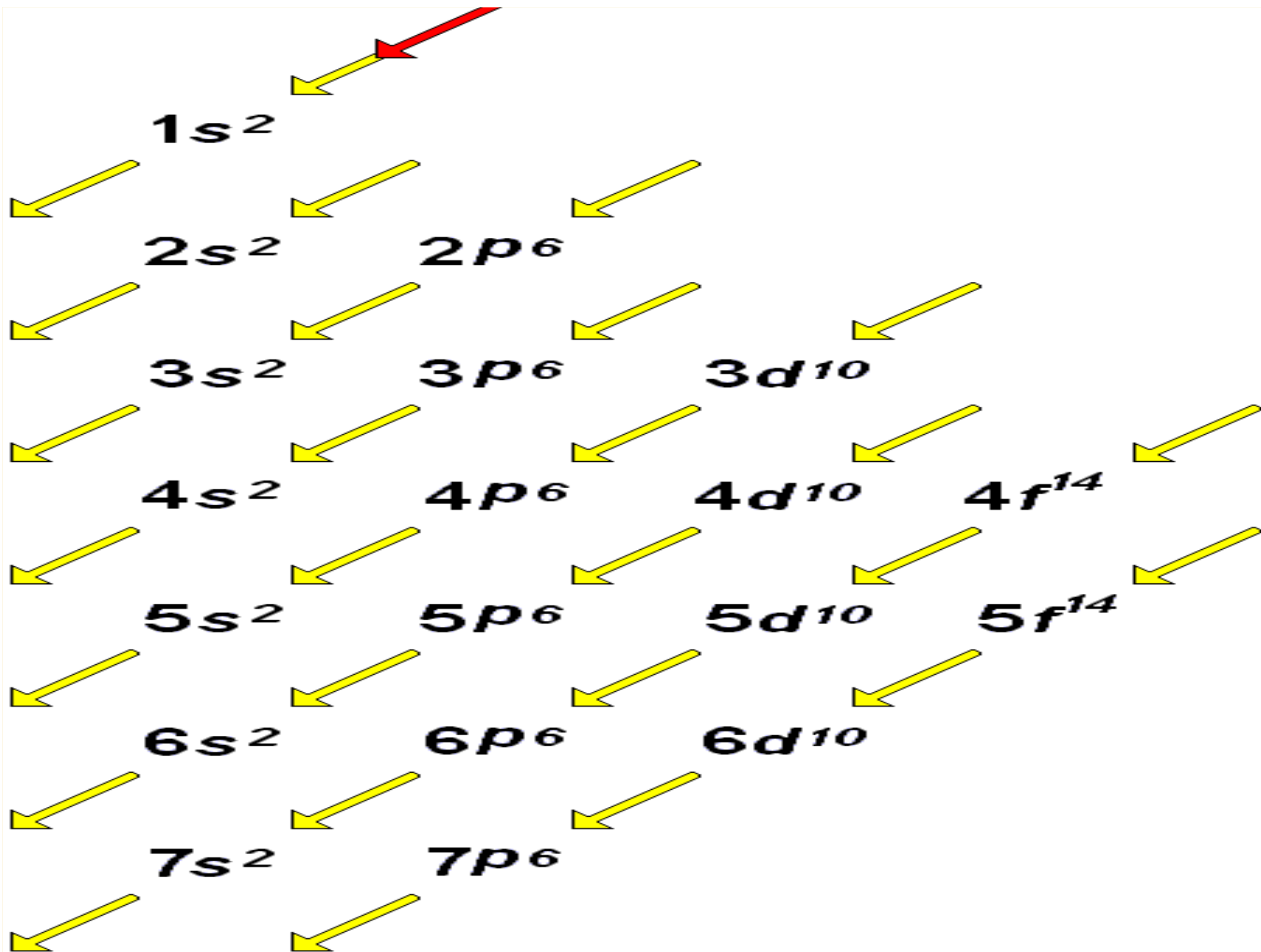
Периодический закон

(Современная формулировка)

- **Свойства элементов, а также формы и свойства их соединений находятся в периодической зависимости от заряда ядер атомов**

Причина периодичности – электронное строение атомов

- **Определенная последовательность формирования электронных оболочек: энергетических уровней и подуровней (принцип Паули, правила Хунда, Клечковского)**
- **Периодическое повторение сходных электронных слоёв и их усложнение при увеличении главного квантового числа**



Короткие периоды

■ 1 период ($n=1$):

2 элемента ($1s^2$)

■ 2 период ($n=2$):

8 элементов ($2s^2 2p^6$)

■ 3 период ($n=3$):

8 элементов ($3s^2 3p^6$)

Длинные периоды

- 4 период ($n=4$):
18 элементов ($4s^23d^{10}4p^6$)
- 5 период ($n=5$):
18 элементов ($5s^24d^{10}5p^6$)
- 6 период ($n=6$):
32 элемента ($6s^24f^{14}5d^{10}6p^6$)
- 7 период ($n=7$):
32 элемента ($7s^25f^{14}6d^{10}7p^6$),
незавершенный

■ **Период** - горизонтальная последовательность элементов, атомы которых имеют равное число энергетических уровней, частично или полностью заполненных электронами

■ **Группа** - вертикальная последовательность элементов с однотипной электронной конфигурацией атомов, равным числом внешних электронов (одинаковой максимальной валентностью и похожими химическими свойствами)

Периодичность свойств элементов

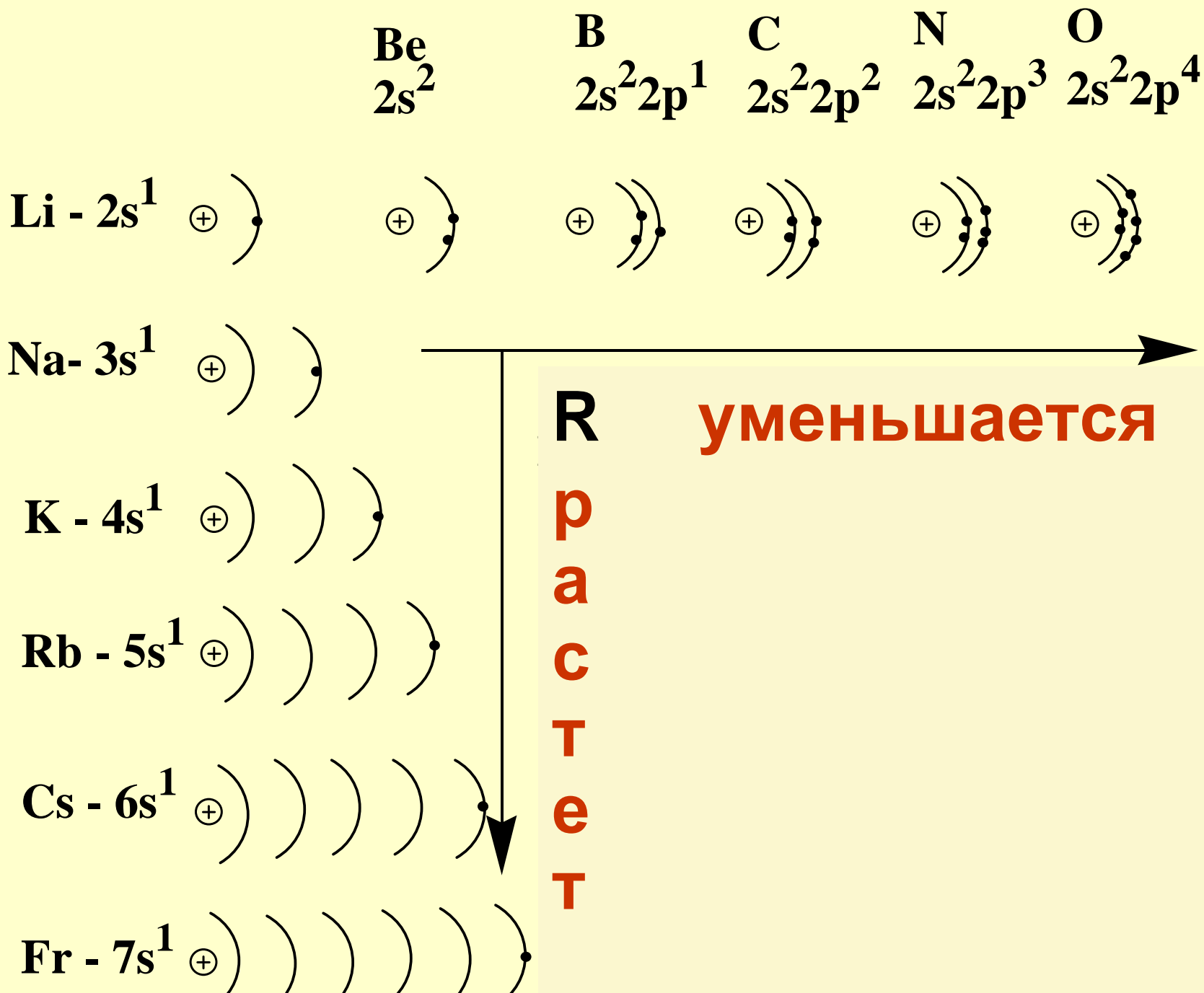
- атомные и ионные радиусы
- энергия ионизации
- сродство к электрону
- электроотрицательность
- валентность элементов

Периодичность свойств простых веществ и соединений

- температура плавления и кипения
- длина химической связи
- энергия химической связи
- электродные потенциалы
- стандартные энтальпии образования веществ
- энтропии веществ и т.д.

АТОМНЫЕ И ИОННЫЕ РАДИУСЫ ХИМИЧЕСКИХ ЭЛЕМЕНТОВ

- Орбитальный радиус атома (иона) – это расстояние от ядра до максимума электронной плотности наиболее удаленной занятой орбитали этого атома



Радиусы катионов и анионов

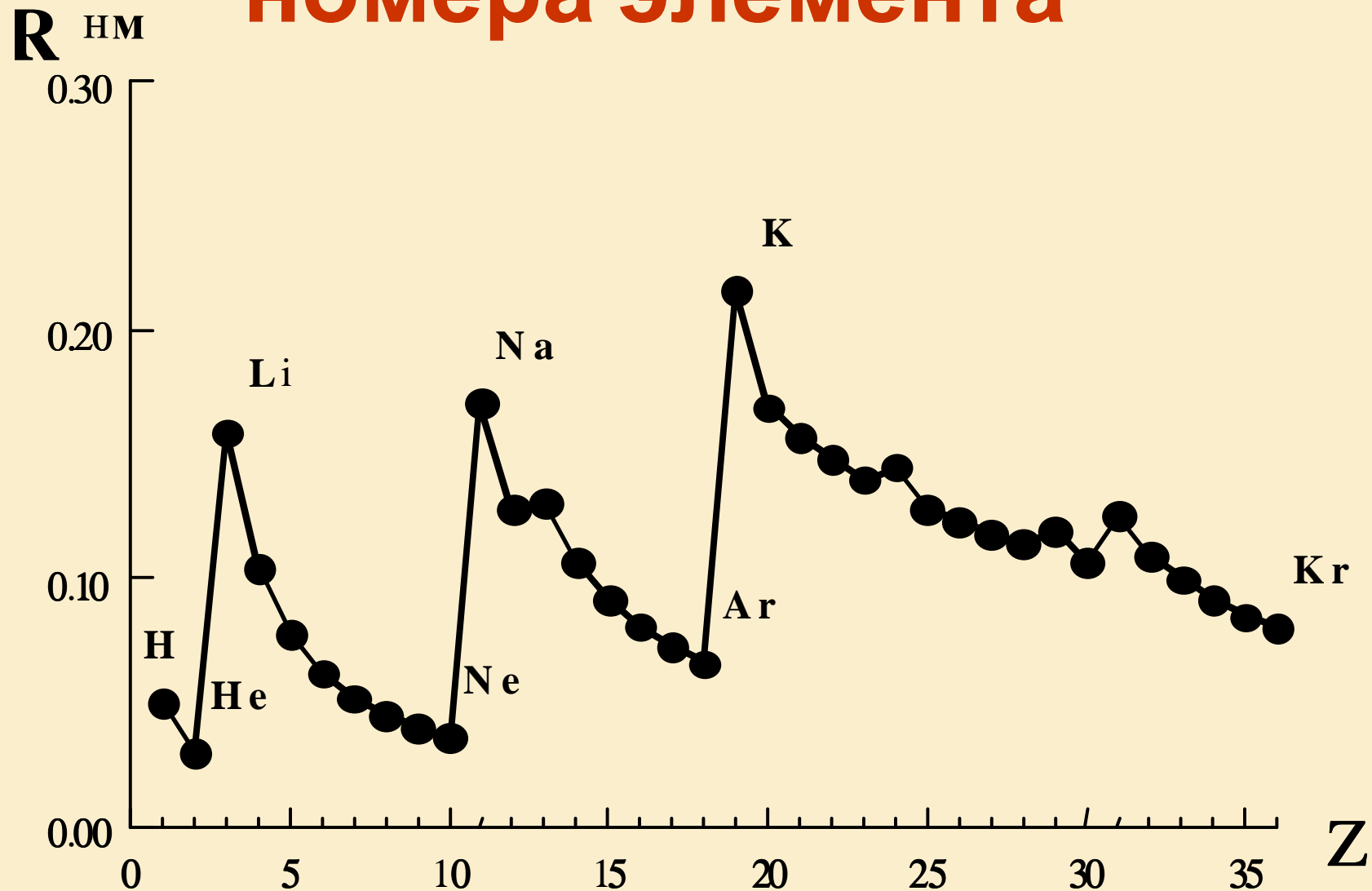
- Превращение атома в катион – резкое уменьшение орбитального радиуса
- Превращение атома в анион – увеличение орбитального радиуса

$$R_{\text{кат}} < R_{\text{ат}} < R_{\text{ан}}$$

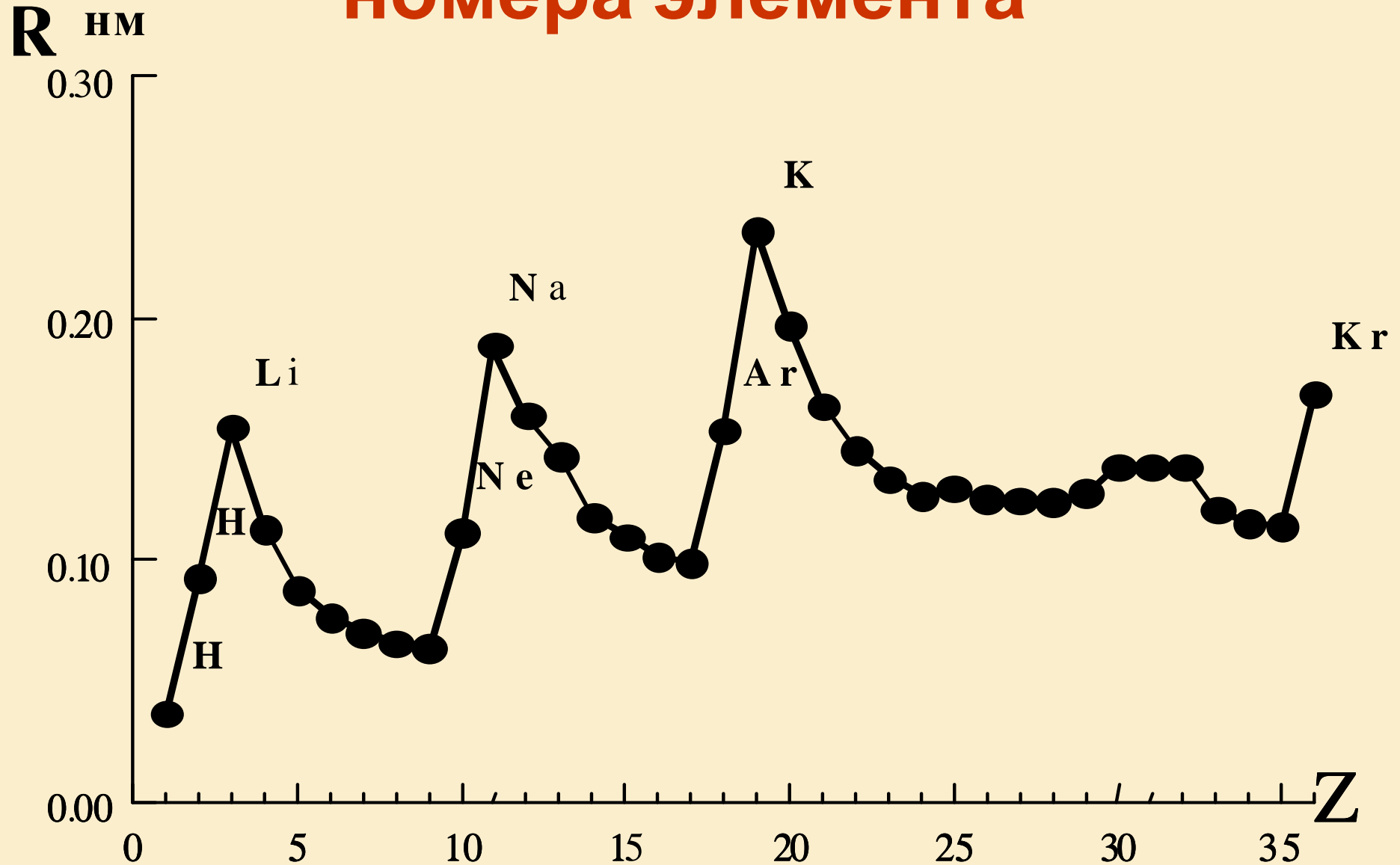


$$0,027 \quad 0,099 \quad 0,181 \text{ нм}$$

Зависимость орбитального радиуса атома от атомного номера элемента



Зависимость эффективного радиуса атома от атомного номера элемента



■ **Эффективные радиусы**

атомов и ионов определяют

по межъядерным

расстояниям

в молекулах и кристаллах,

при этом

предполагают, что атомы –

несжимаемые шары

- **Ковалентные радиусы** - это эффективные радиусы, определяемые по межъядерным расстояниям в ковалентных молекулах
- **Металлические радиусы** - это эффективные радиусы в металлах
- **Ионные радиусы** – это эффективные радиусы в ионах, определяемые по минимуму электронной плотности

Энергия и потенциал ионизации атомов

- Энергия ионизации – это энергия, необходимая для отрыва электрона от атома и превращение атома в положительно заряженный ион

$E_{\text{ион}}$ [кДж/моль]

- Ионизационный потенциал – это разность потенциалов, при которой происходит ионизация

$\varphi_{\text{ион}}$ [В]

1-й, 2-й,і потенциал ионизации

- Энергия отрыва каждого последующего электрона больше, чем предыдущего

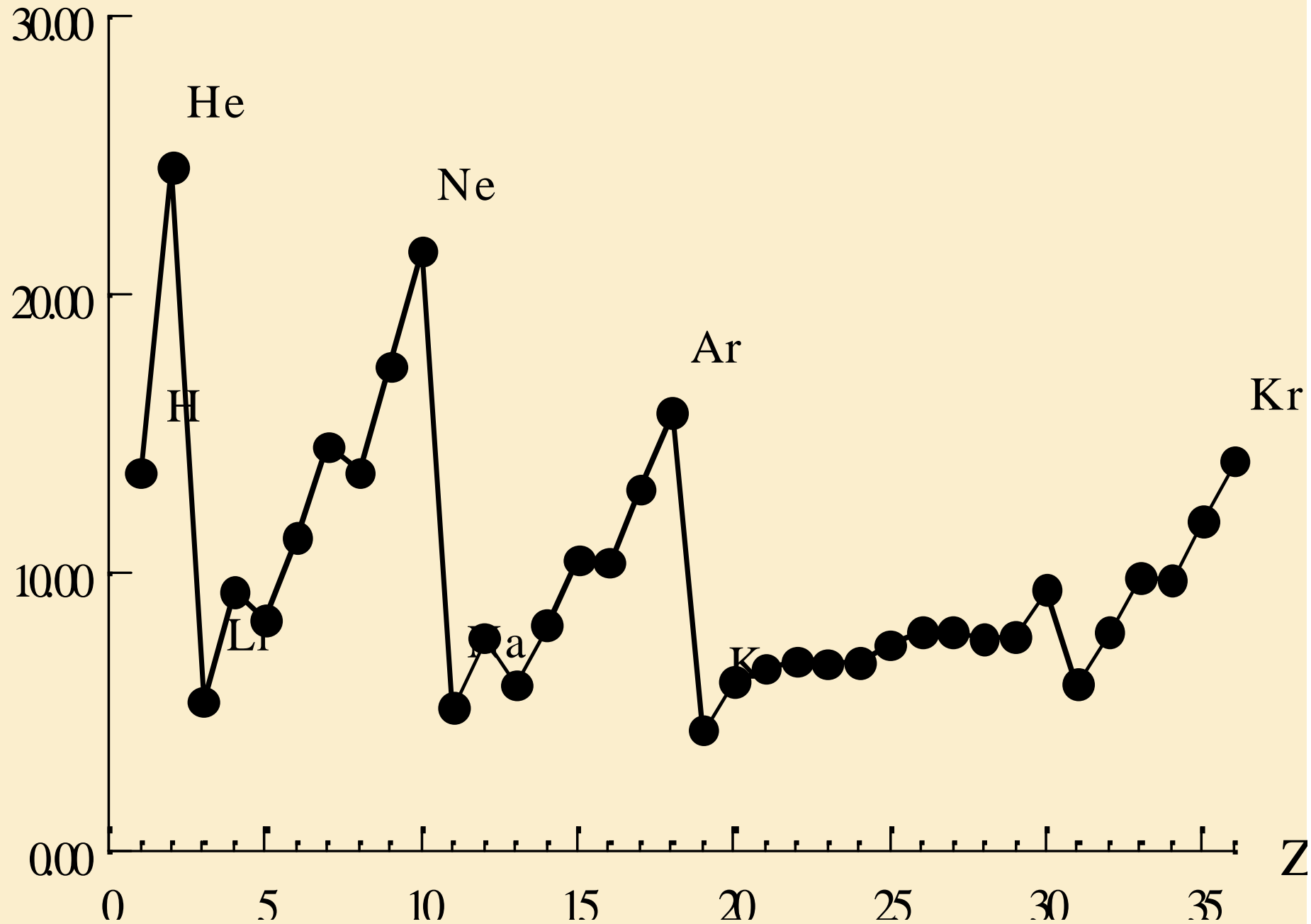
$$J_1 < J_2 < J_3 < J_4 \dots\dots$$

- Резкое увеличение J происходит на границах уровней и подуровней

Периодичность изменения J

Элемент	J_1	J_2	J_3	
J_4				
Li	5,39	75,6	122,4	–
Be	9,32	18,2	158,3	217,7
B	8,30	25,1	37,9	
259,3 C	11,26	24,4	47,9	
64,5 N	14,53	29,6	47,5	
77,4				

$J, \text{эВ/ атом}$

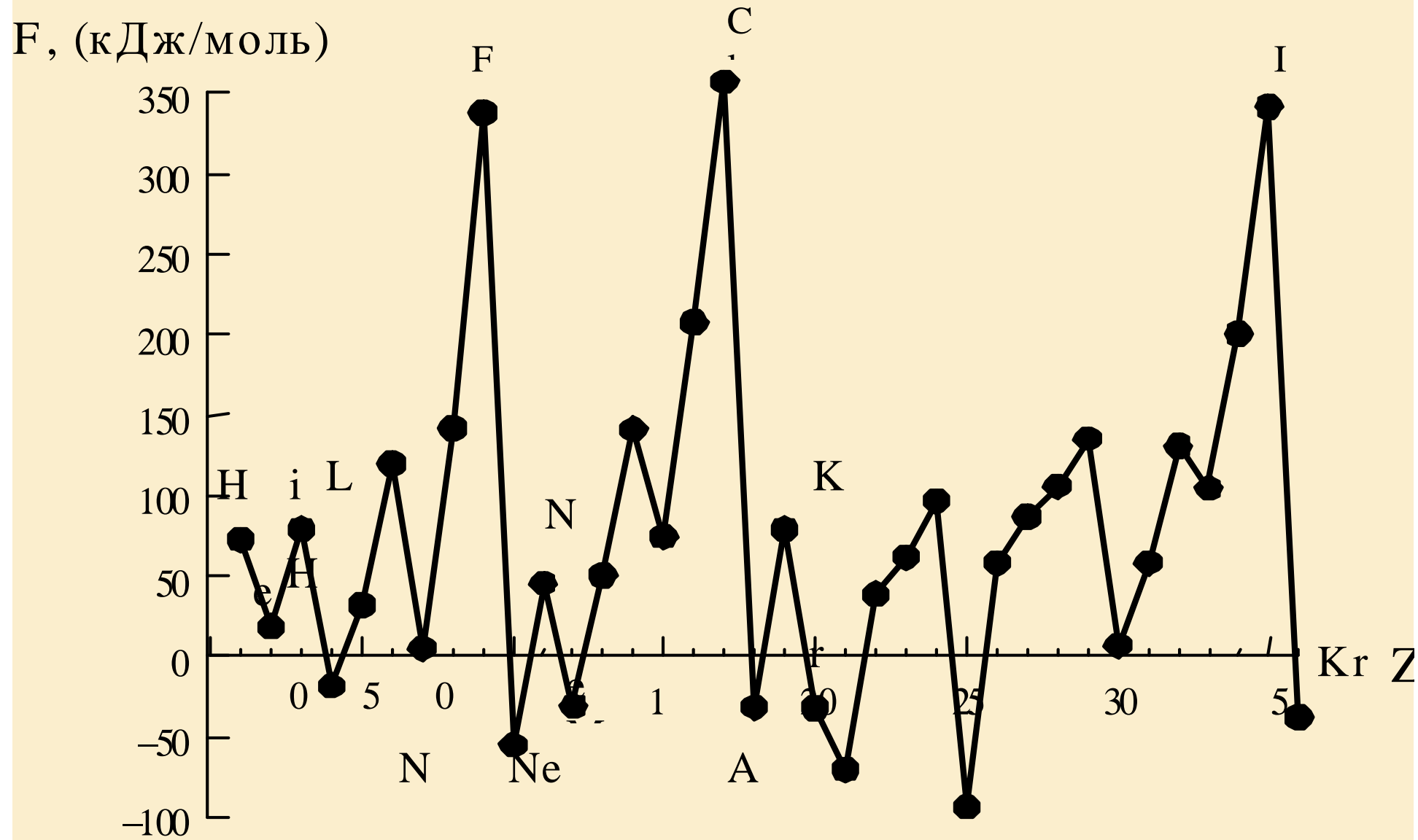


Сродство к электрону

- это энергия, выделяющаяся при захвате электрона атомом или энергия, необходимая для присоединения электрона к атому

E [кДж/моль]

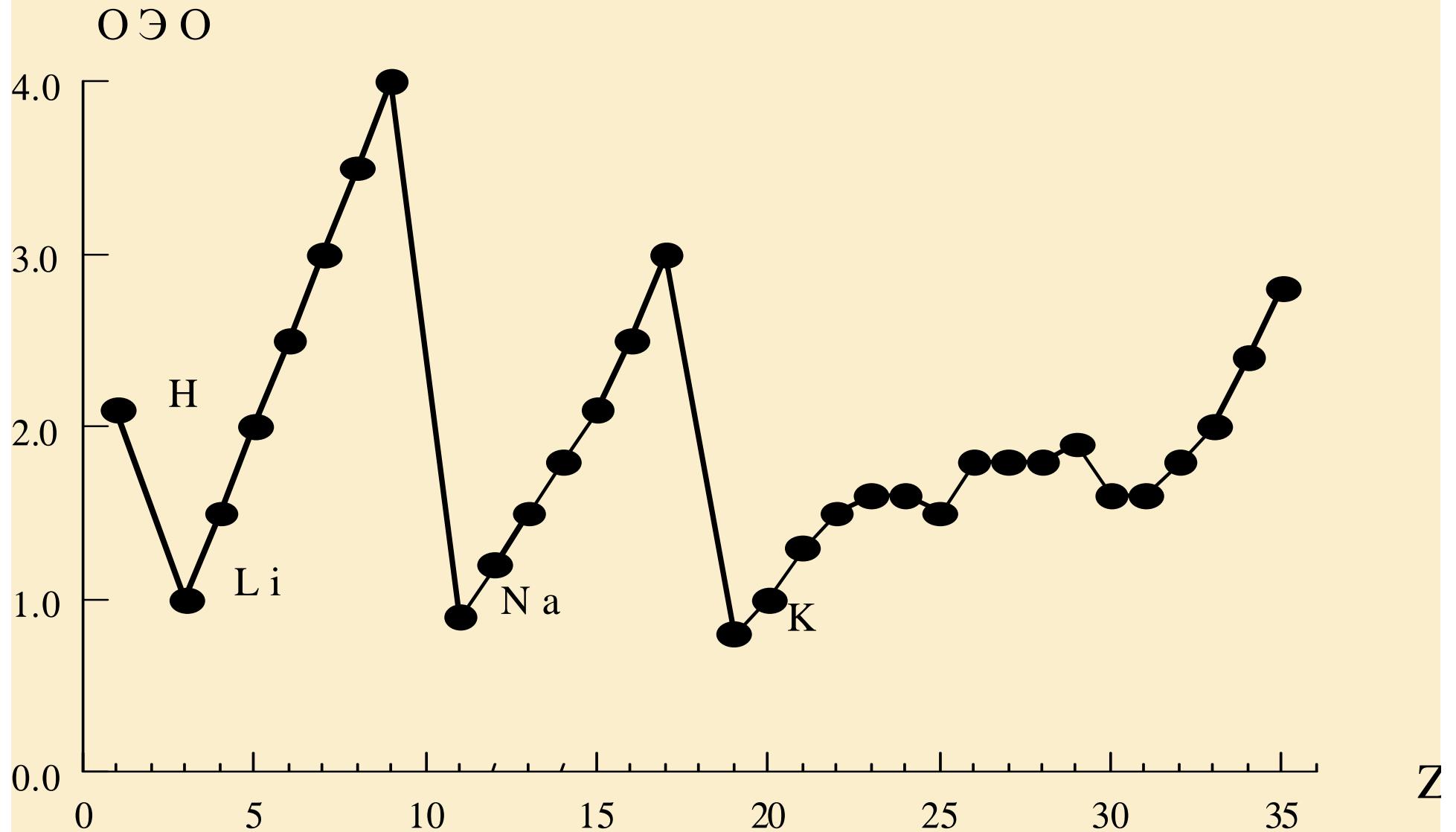
Периодичность изменения F для элементов первых 3-х периодов



Электроотрицательность

- - свойство атома притягивать электроны от других атомов, с которыми он образует химическую связь в соединениях
- Электроотрицательность определяли Полинг, Малликен и др. ученые
- Электроотрицательность выражается в относительных (условных единицах)

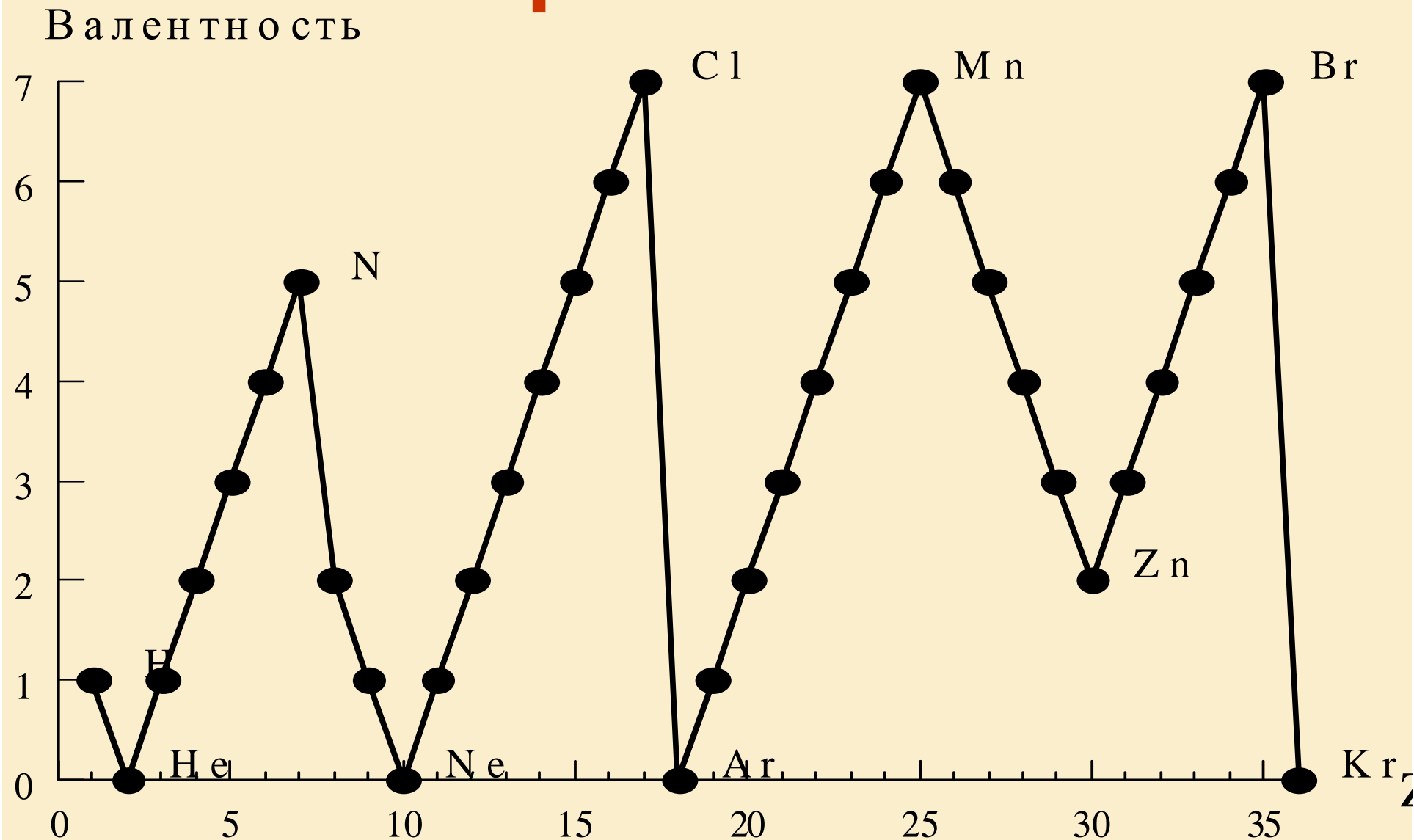
Электроотрицательность элементов первых 3-х периодов



Валентность

- Валентность определяется электронами внешнего уровня
- высшая валентность элементов главных подгрупп равна номеру группы

ЗАВИСИМОСТЬ ВЫСШЕЙ ВАЛЕНТНОСТИ ОТ АТОМНОГО НОМЕРА ЭЛЕМЕНТА



Периодические свойства соединений

- **ОСНОВНО-КИСЛОТНЫЕ СВОЙСТВА** **ОКСИДОВ И ГИДРОКСИДОВ:**
- **В периодах** **основные свойства** *ослабляются*, но *усиливаются* **кислотные свойства** **этих соединений**
- **В группах** **основные свойства** *усиливаются*, а **кислотные** *ослабляются*

Периодичность кислотно-основных свойств

Группа	s-эл-ты	Н	p-эл-ты
Основы	Основ.	d-эл-ты	Кислотные
свойства	оксиды	кисл.-осн. св-ва	оксиды для
ув-ся		зависят от с.о.	неметалл

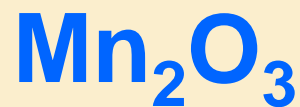
f- эл-ты - преимущественно основные

Кислотно-основные свойства

■ с. о. ↑ кислотные свойства ↑



осн.



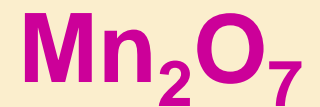
слабо осн.



амфот.

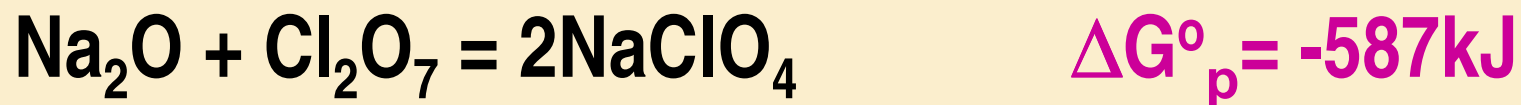
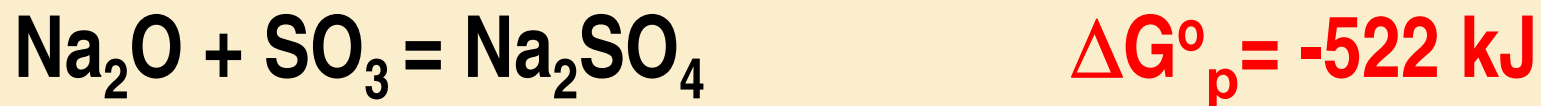
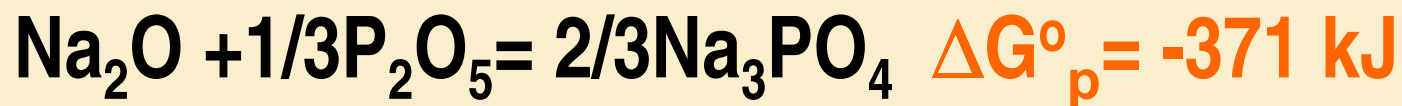
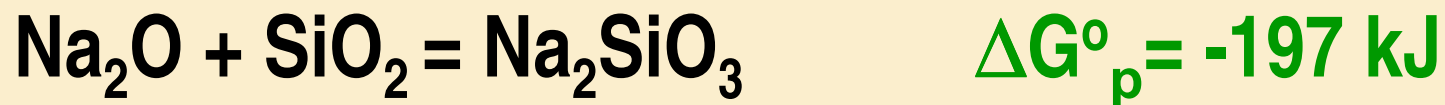
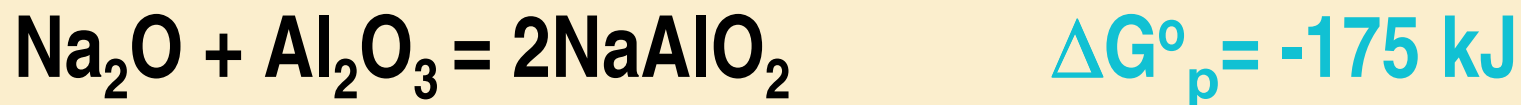


кисл.



кисл.

- По периоду:
- (-) значения ΔG_p° ↑
- КИСЛОТНЫЕ СВ-ВА ОКСИДОВ ↑



- **Окислительная способность простых веществ и однотипных соединений:**
- **в периодах увеличивается**
- **в группах уменьшается**

термическая устойчивость однотипных солей

- **в периодах уменьшается и
возрастает их склонность к
гидролизу**
- **в группах увеличивается**

Периодичность окислительно-восстановительных свойств простых веществ

Н

s-элементы

Металлы,
сильные
вос-ли

(пр., Na

Ca вос-ся хол.

H_2O до H_2

ОКИСЛИТЕЛИ

d-элементы

Металлы,
слаб. вос-ли

(пр., Fe вос-ся

водян.паром)

p-элементы

Эл.отрицательность
и окисл. спос-ть
увеличивается

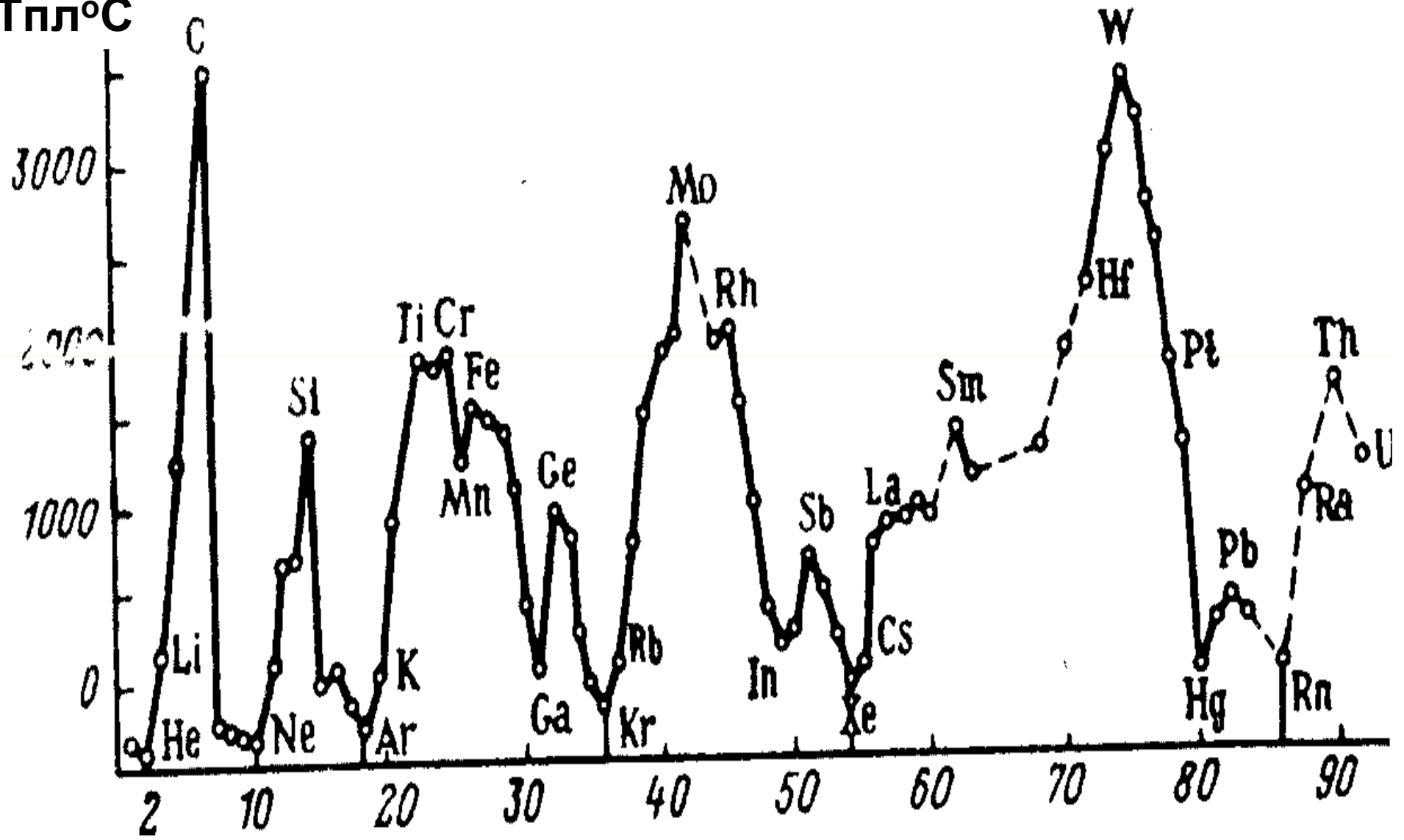
Галогены -



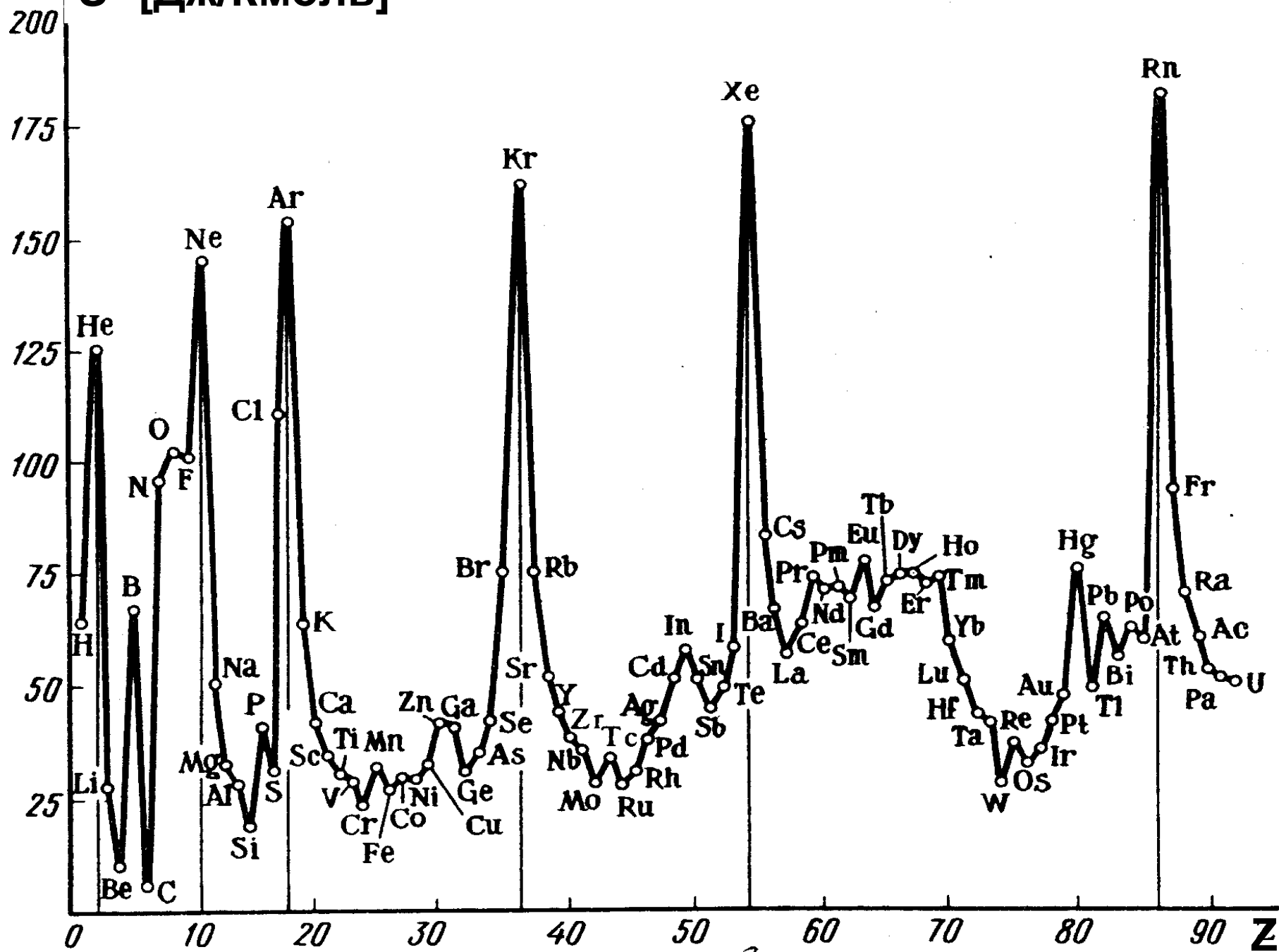
- Периодическими являются многие другие свойства соединений: энергия хим. связи, энтальпия, энергия Гиббса образования и др.

- Место химического элемента в ПС определяет его свойства и свойства его многих соединений

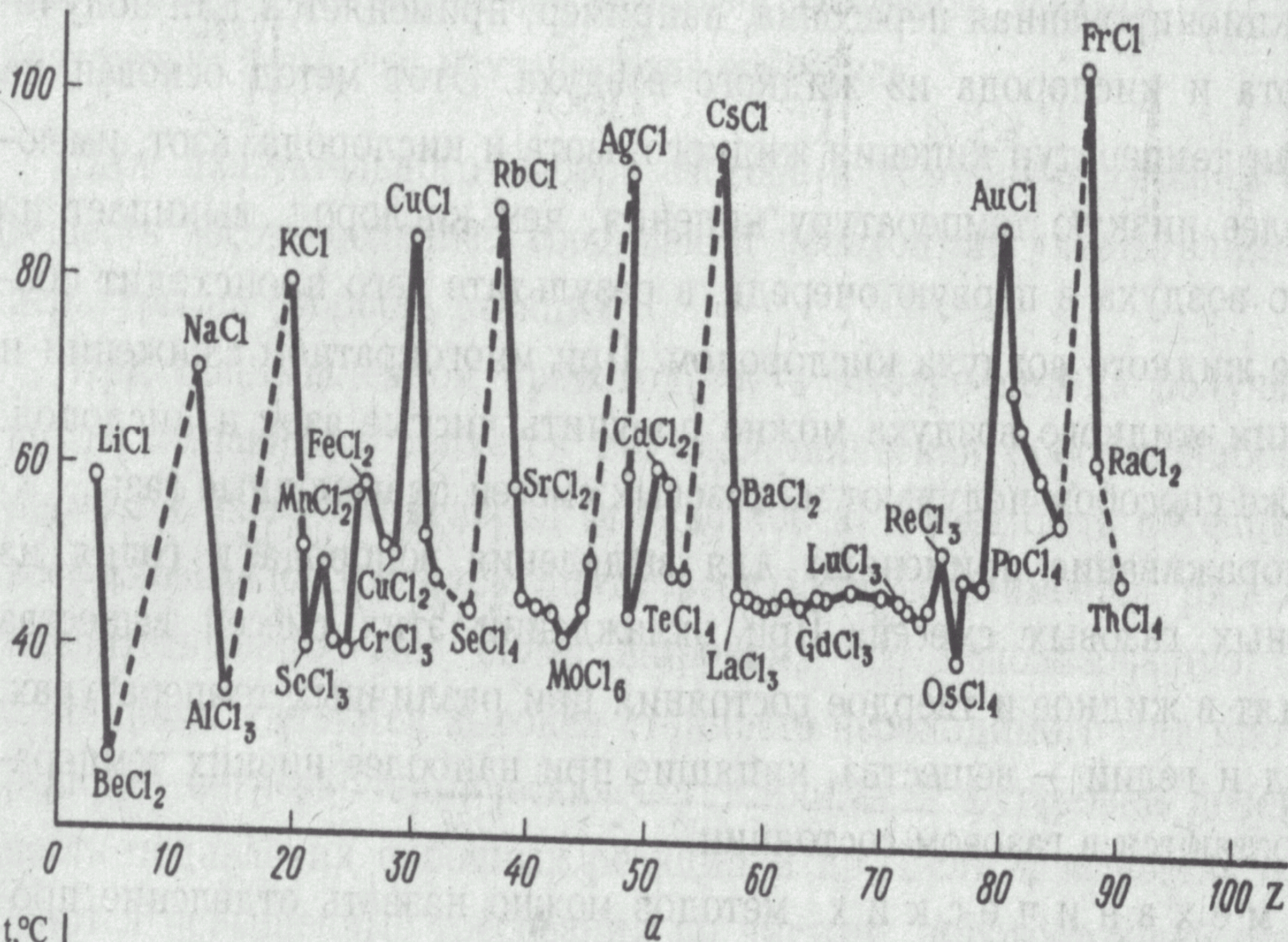
Тпл°С



S° [Дж/Кмоль]



S_{298}° , Дж/(К·моль Cl)



Основные умения по теме:

- 1) Записывать длинную и короткую ЭФ атома
 - по номеру
 - по положению в ПС
 - 2) Изображать графические ЭФ, формы АО со знаками «+» и «-» на лепестках, качественные энергетические диаграммы
 - 3) Определять квантовые числа всех электронов атома
-