

Строение атома

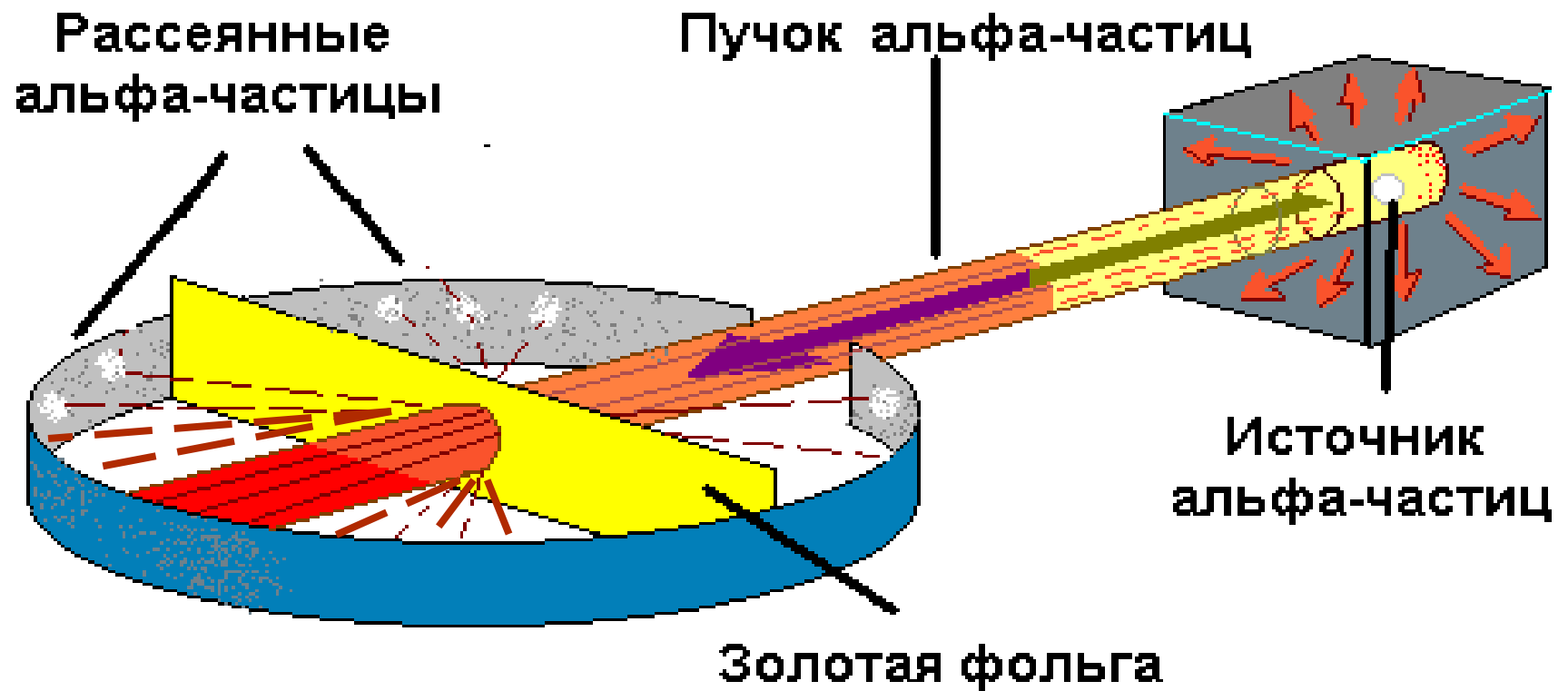
План лекции

- 1. Экспериментальная основа теории**
- 2. Квантовые числа**
- 3. Принципы построения и способы изображения электронных структур**
- 4. Строение атома и периодическая система элементов**

Экспериментальная основа

- **Открытие электрона**
(Дж. Томпсон, 1897)
- **Определение заряда электрона**
(Р. Мелликен, 1909)
- **Опыты по рассеянию α -частиц**
(Г. Резерфорд, 1907)
- **Модель строения атома водорода**
(Н. Бор 1910)
- **Корпускулярно-волновые свойства электрона**
(Луи де Бройль 1924)

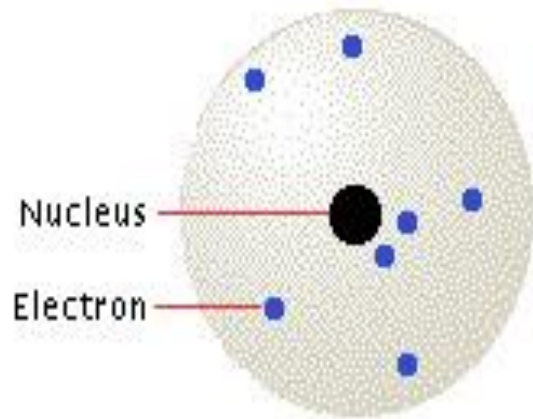
Исследования Резерфорда



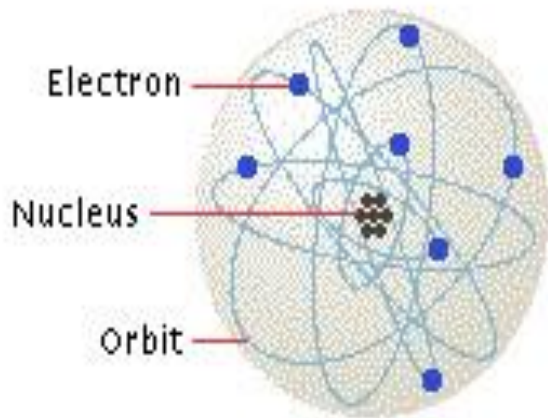
Модели атома

- **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. Клечковский.**

Модели атома



Резерфорд



Нильс Бор



Квантовая
МОДЕЛЬ

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

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. Так появились три принципа квантовой механики.

Принцип квантования

(М. Планк, 1900)

- атомы излучают энергию порциями, кратными некоторой минимальной величине - *кванту*, фотону - h

$$E = h\nu$$

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

Принцип дуализма (корпускулярно-волновой природы)

- При свободном движении эл-ов проявляются волновые свойства
- При взаимодействии с веществом – корпускулярные
- волновые и корпускулярные свойства присущи электронам одновременно

$$\lambda = \frac{h}{(m\vartheta)}$$

Принцип неопределенности (В. Гейзенберг, 1925)

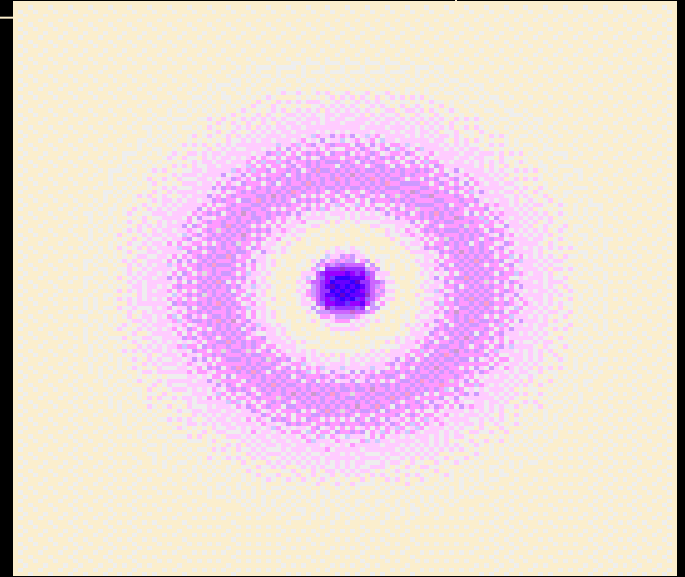
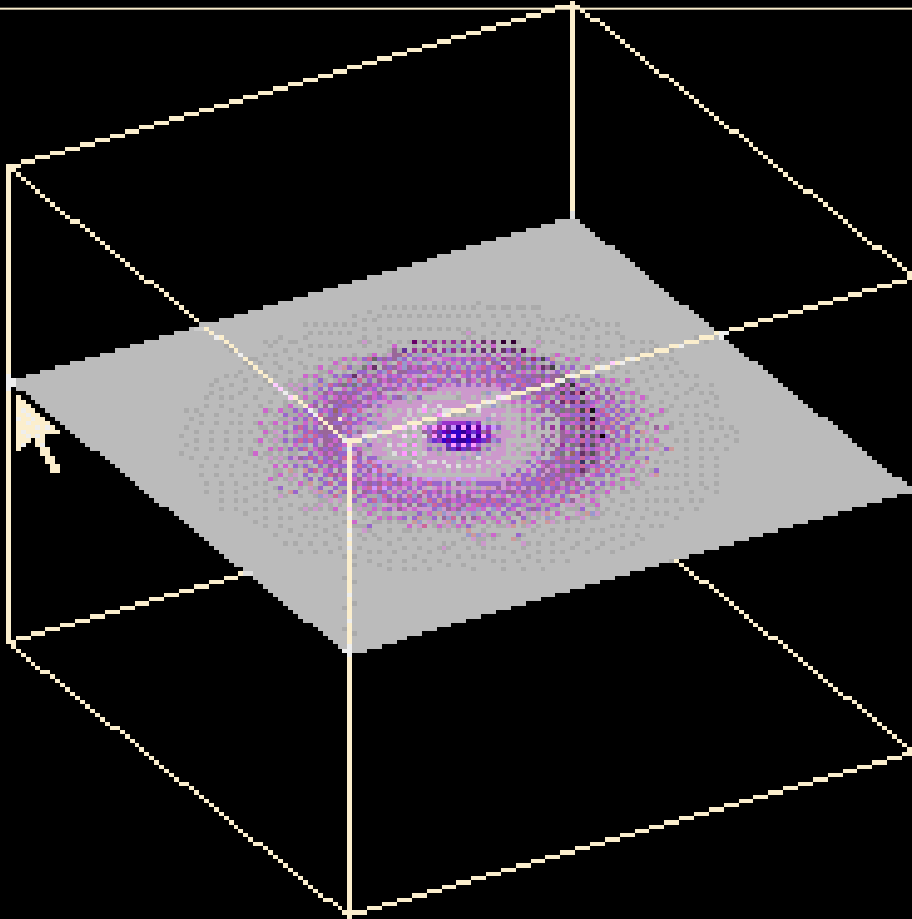
- Движение электрона в атоме не может быть точно фиксировано
- Положение и скорость движения электрона в атоме можно найти лишь с определенной долей вероятности

$$\Delta X \cdot \Delta (m v_x) \geq \frac{h}{2\pi}$$

Основа квантовых представлений

- Положение электрона характеризуется вероятностью пребывания частицы в конкретной области пространства
- Область наиболее вероятного пребывания электрона в атоме называют атомной орбиталью - АО
- Вероятность обнаружения электрона определяется квадратом волновой функцией - ψ^2

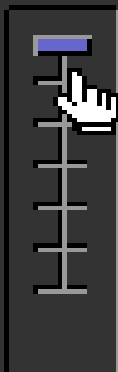
Вероятностная модель



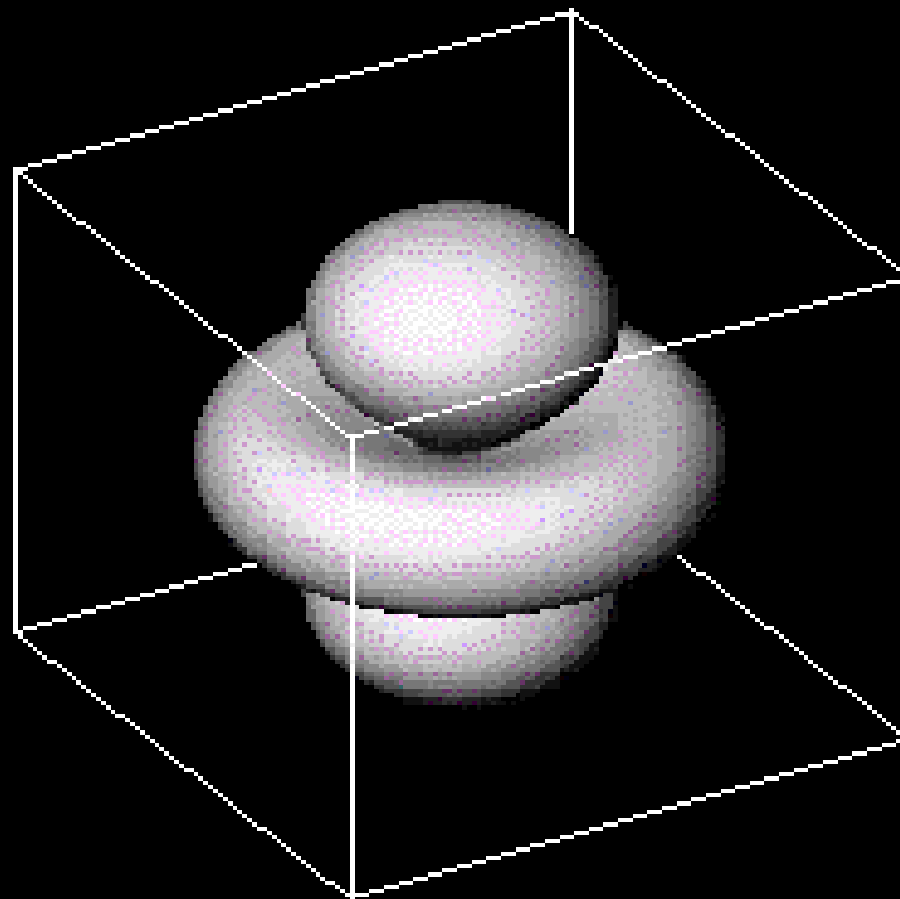
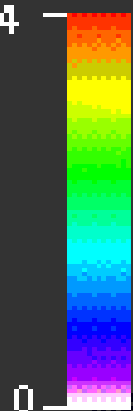
$$\psi^2(zs) = \left[\frac{1}{4\sqrt{2\pi}} (2 - R) e^{-R/2} \right]^2$$

Орбиталь d_{z^2}

0%
0%
0%
0%
0%
0%
0%



$\times 10^{-4}$



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

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 волновой теории движение электрона представ-ся в виде стоячей волны, для которой характерен набор колебаний с длинами волн: $\lambda, \lambda/2, \lambda/3, \dots, \lambda/n$; т.е. движение хар-ся квант. числом - n

Квантовые числа

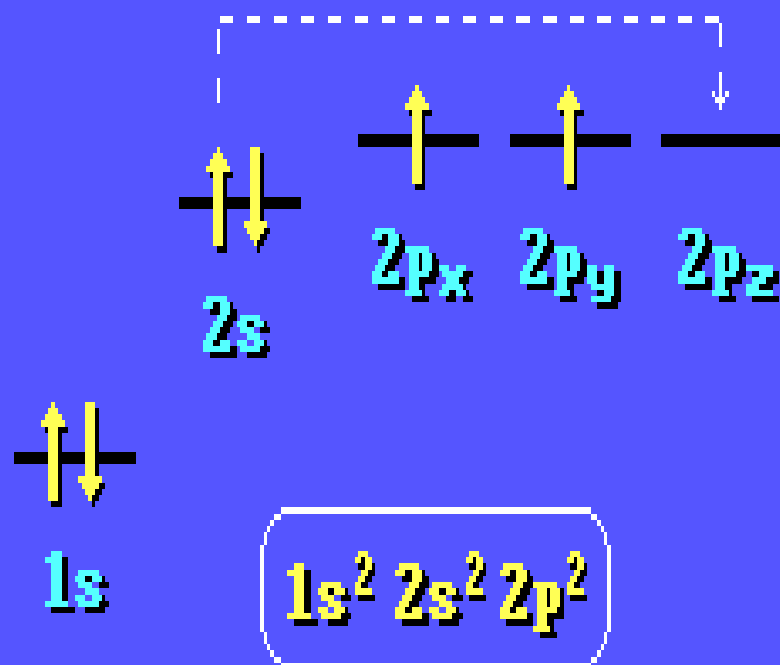
- Уравнение Шредингера - трехмерно. Соответственно - три набора квантовых чисел. Каждой координате свое квантовое число.
- Размер электронного облака (энергия) изменяются в атоме скачками (квантами)
- То же относится к форме и ориентации электронных облаков, поэтому эти характеристики атома квантованы

Главное квантовое число(n)

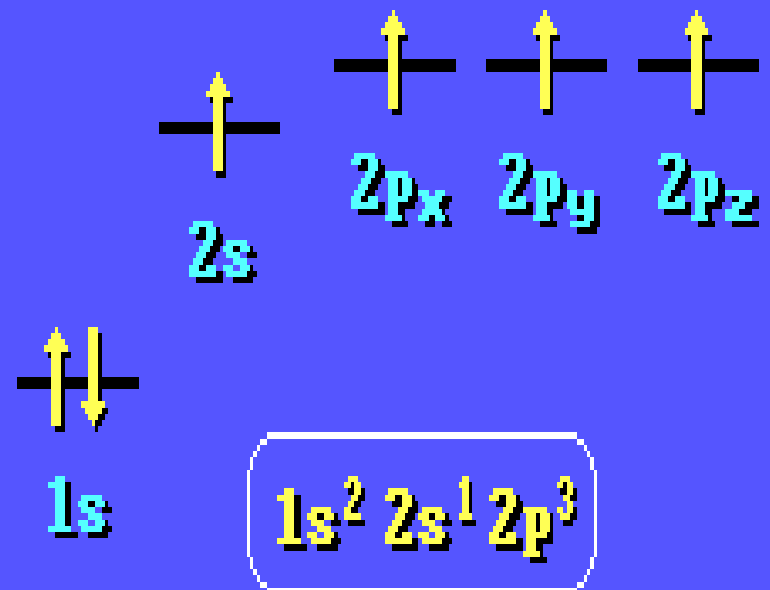
- $n - 1, 2, 3, \dots, \infty$, определяет энергию электрона в атоме
- **Энергетический уровень** - состояние электронов в атоме с тем или иным значением гл. кв. числа
- **Основное состояние** атома - \min энергия электронов
- **Возбужденное состояние** – более высокие значения энергии эл-в

СОСТОЯНИЯ АТОМА УГЛЕРОДА

Невозбужденное (основное)
состояние



Возбужденное состояние



- **Орбитальное квантовое число**
(*l*) характеризует форму электронного облака

$$l = 0, 1, 2, 3, \dots, n-1$$

s, p, d, f, g, h...

l определяет распределение волновой функции в околоядерном пространстве

■ **Магнитное квантовое число**
 (m_l) характеризует
ориентацию электронных
облаков в пространстве

■ **m_l** меняется от **$-l$** до **$+l$** , а
всего **$\Sigma = 2l + 1$** значений

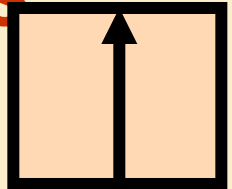
■ **Например:**

$$l = 0 \text{ (s)}; \quad m_l = 0$$

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

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

Атомная орбиталь (АО)

- это состояние электрона в атоме, которое описывается волновой функцией с набором из четырех квантовых чисел n, l, m_l, m_s
- Условное изображение АО 
- АО обозначают с помощью кв. чисел
- Например: $1s$ ($n = 1, l = 0, m_l = 0$),
 $2p$ ($n = 2, l = 1, m_l = -1, 0, +1$)

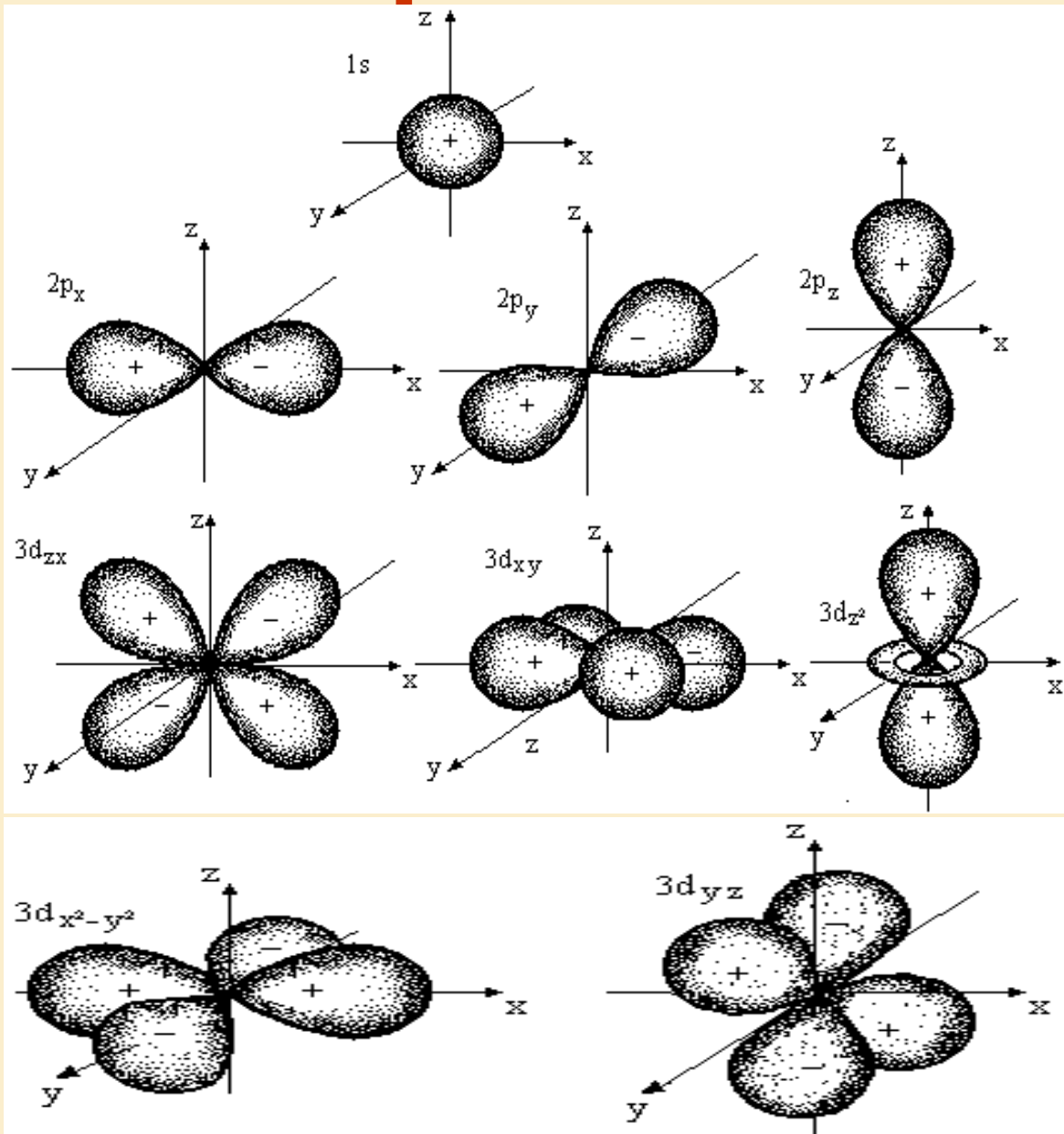
Типы атомных орбиталей

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 \min энергией
- **Принцип Паули:** в атоме не может быть двух электронов с одинаковым набором всех четырех кв.чисел. Определяет емкость АО
- **Правило Гунда:** на одном подуровне суммарный спин электронов максимален

Правило Клечковского

- Порядок заполнения подуровней в атоме определяется возрастанием суммы $(n + l)$
- Если сумма $(n+l)$ для двух подуровней одинакова, то сначала эл-ны заполняют АО с меньшим n

Принцип построения электронных структур

- Принципу наименьшей энергии соответствует последовательность заполнения энергетических уровней и подуровней

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

1 2 3 3 4 4 5 5 5 6 6 6 7 7 7 7

Графическое правило Клеchkовского

Орбитальное квантовое число l

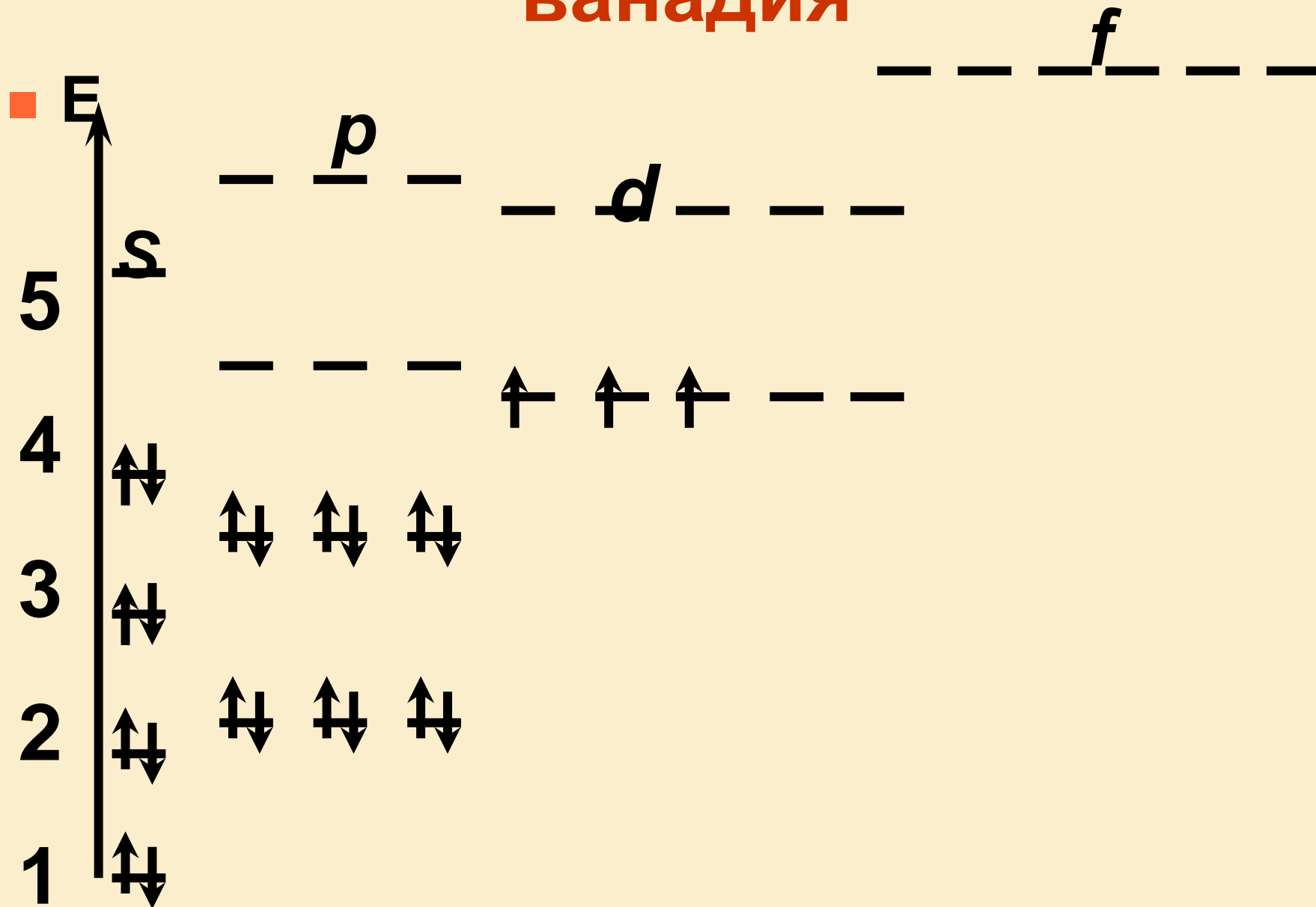
		0	1	2	3	4
Главное квантовое число n	1	1s				
	2	2s	2p			
	3	3s	3p	3d		
	4	4s	4p	4d	4f	g
	5	5s	5p	5d	5f	5g
	6	6s	6p	6d	6f	6g
	7	7s	7p			

Сумма $(n+l)$

Способы изображения электронных структур

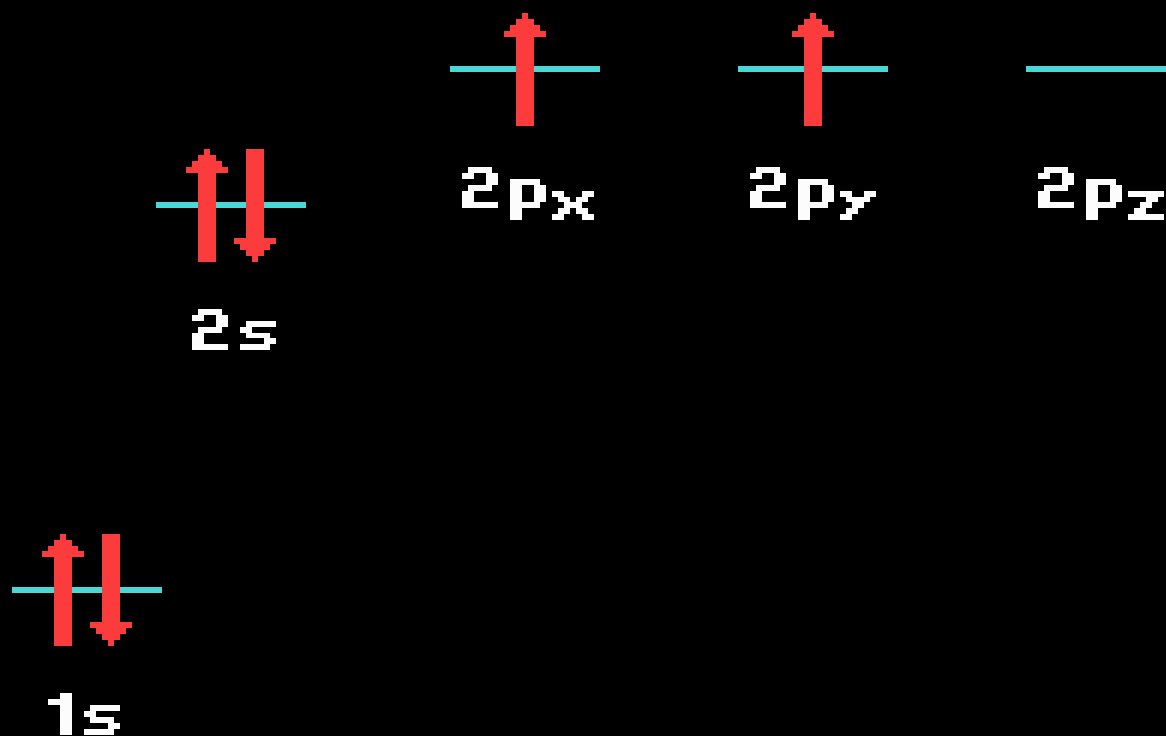
- **Электронная формула** - использует n и l ,
 n - цифра, l – буква (s, p, d, f)
- **Графическая структура** - использует n - цифра, l – буква (s, \square, d, f)
 m_l – ↑ квантовая ячейка ↓
 m_s - +1/2, -1/2
- **Энергетическая диаграмма** - ↑
использует n - цифра, l – буква

Энергетическая диаграмма ванадия



Энергетическая диаграмма

Состояния атома углерода



Миниатюрный тест

- - Сколько подуровней на 4 энергетическом уровне и какие.
 - - Напишите полную электронную формулу атома азота.
 - Напишите электронографическую формулу для валентных электронов атома фосфора
 - К какому семейству элементов относится элемент Sr?
-

Периодическая система элементов

Д.И. Менделеева (1869г.)

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

Неясные моменты

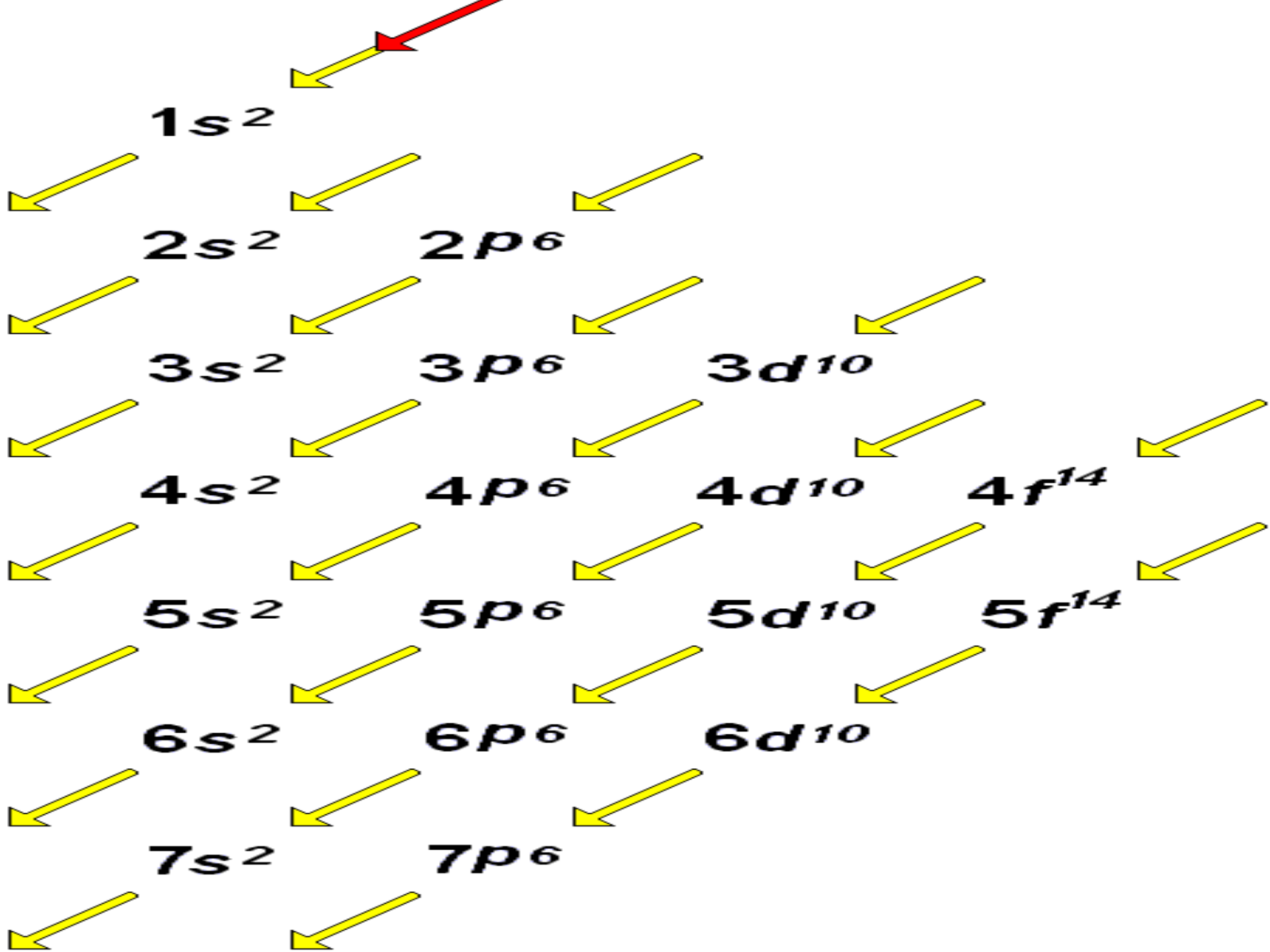
- В чем причина периодичности?
- Почему элементы одной группы имеют одинаковую валентность и образуют одинаковые соединения?
- Почему число элементов в периодах не одинаковое?
- Почему в ПС расположение элементов не всегда соответствует возрастанию атом. массы (Ar – K, Co – Ni, Te – I)?

Периодический закон

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

Причина периодичности

- Определенная последовательность формирования электронных оболочек (слоев), энергетических уровней и подуровней (принципы Паули, Хунда, Клечковского)
- Периодическое повторение формирования сходных электронных слоёв и их усложнение при увеличении гл. кв. 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 электроной
конфигурацией атомов, равным
числом внешних эл-нов,
одинаковой max валентностью и
похожими химическими
свойствами

ПЕРИОДИЧЕСКАЯ СИСТЕМА ЭЛЕМЕНТОВ Д.И. МЕНДЕЛЕЕВА

ПЕРИОДЫ	Г Р У П П Ы								Э Л Е М Е Н Т О В							
	I	II		III	IV	V	VI	VII		VIII						
1	H 1 1,008								(H)					2 4,003	He	
2	Li 3 6,94	Be 4 9,01	5 10,81	B	6 12,01	C	7 14,01	N	8 16,0	O	9 19,0	F		10 20,18	Ne	
3	Na 11 22,99	Mg 12 24,3	13 26,98	Al	14 28,09	Si	15 30,97	P	16 32,06	S	17 35,45	Cl		18 39,95	Ar	
4	K 19 39,10	Ca 20 40,1	Sc 21 44,96	Ti 22 47,9	V 23 50,9	Cr 24 52,0	Mn 25 54,94	Fe 26 55,85	Co 27 58,93	Ni 28 58,71						
	29 63,55	Cu 30 65,4	Zn 31 69,7	Ga 32 72,59	Ge 33 74,92	As 34 78,96	Se 35 79,9	Br						36 83,80	Kr	
5	Rb 37 85,47	Sr 38 87,6	Y 39 88,9	Zr 40 91,2	Nb 41 92,9	Mo 42 95,94	Tc 43 (99)	Ru 44 101,1	Rh 45 102,9	Pd 46 106,4						
	47 107,9	Ag 48 112,4	Cd 49 114,8	In 50 118,7	Sn 51 121,75	Sb 52 127,6	Te 53 126,9	I						54 131,3	Xe	
6	Cs 55 132,9	Ba 56 137,3	* La 57 138,9	Hf 72 178,5	Ta 73 180,9	W 74 183,8	Re 75 186,2	Os 76 190,2	Ir 77 192,2	Pt 78 195,1						
	79 196,9	Au 80 200,6	Hg 81 204,4	Tl 82 207,2	Pb 83 208,9	Bi 84 (210)	Po 85 (210)	At						86 (222)	Rn	
7	Fr 87 (223)	Ra 88 (226)	** Ac 89 (227)	Rf 104 (261)	Db 105 (262)	Sg 106 (263)	Bh 107 (264)	Hs 108 (265)	Mt 109 (266)							

* ЛАНТАНОИДЫ

** АКТИНОИДЫ

58	59	60	61	62	63	64	65	66	67	68	69	70	71
Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu
90	91	92	93	94	95	96	97	98	99	100	101	102	103
Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr

Периодичность свойств элементов

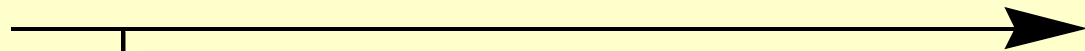
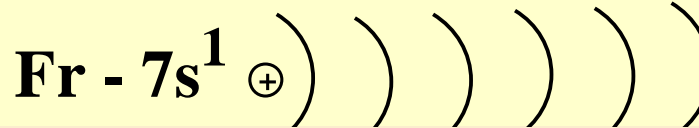
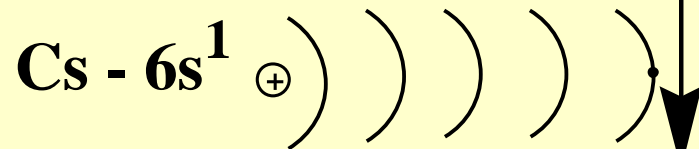
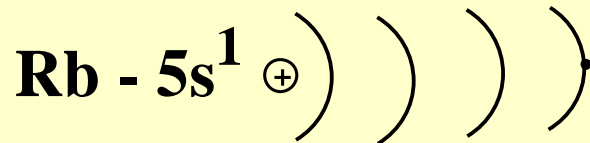
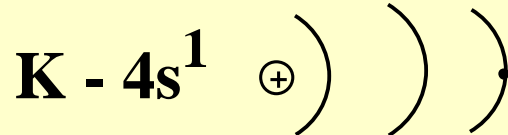
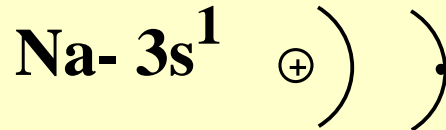
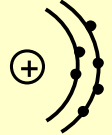
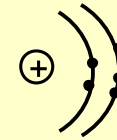
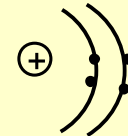
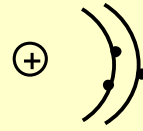
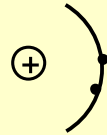
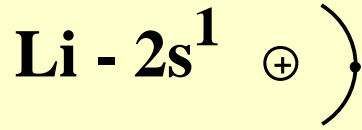
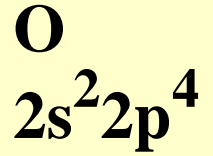
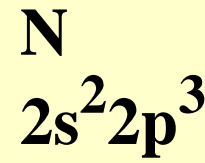
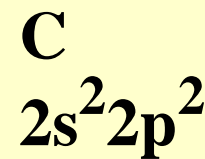
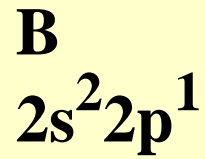
- атомные и ионные радиусы
- энергия ионизации
- сродство к электрону
- электроотрицательность
- валентность элементов

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 орбитали этого атома**



Радиус ум-ся

**р
а
с
т
е
т**



Радиусы катионов и анионов

- Превращение атома в катион - резкое уменьшение орбитального радиуса
- Превращение атома в анион почти не изменяет орбитального радиуса

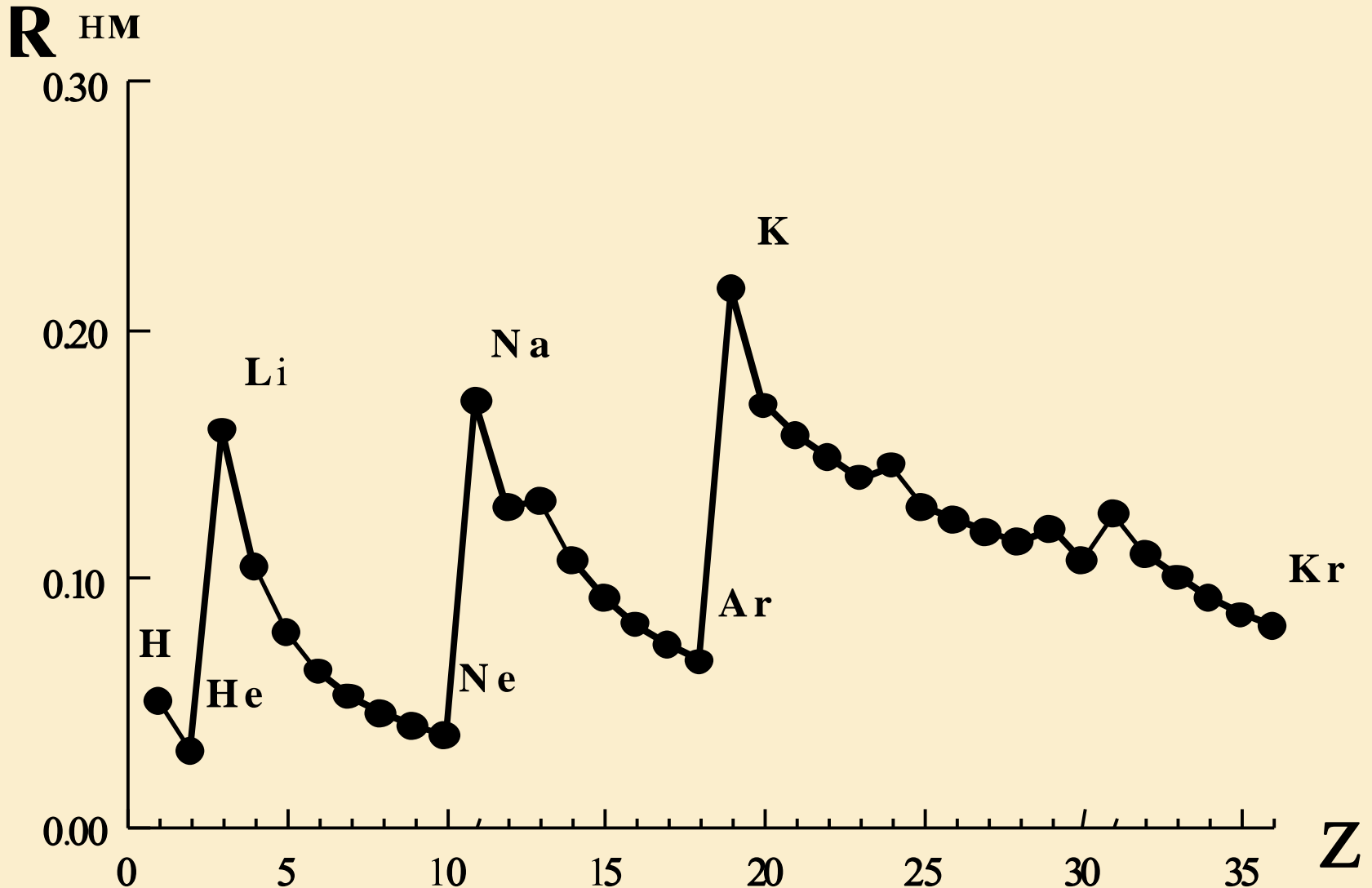
$$R_{\text{кат}} < R_{\text{ат}} < R_{\text{ан}}$$



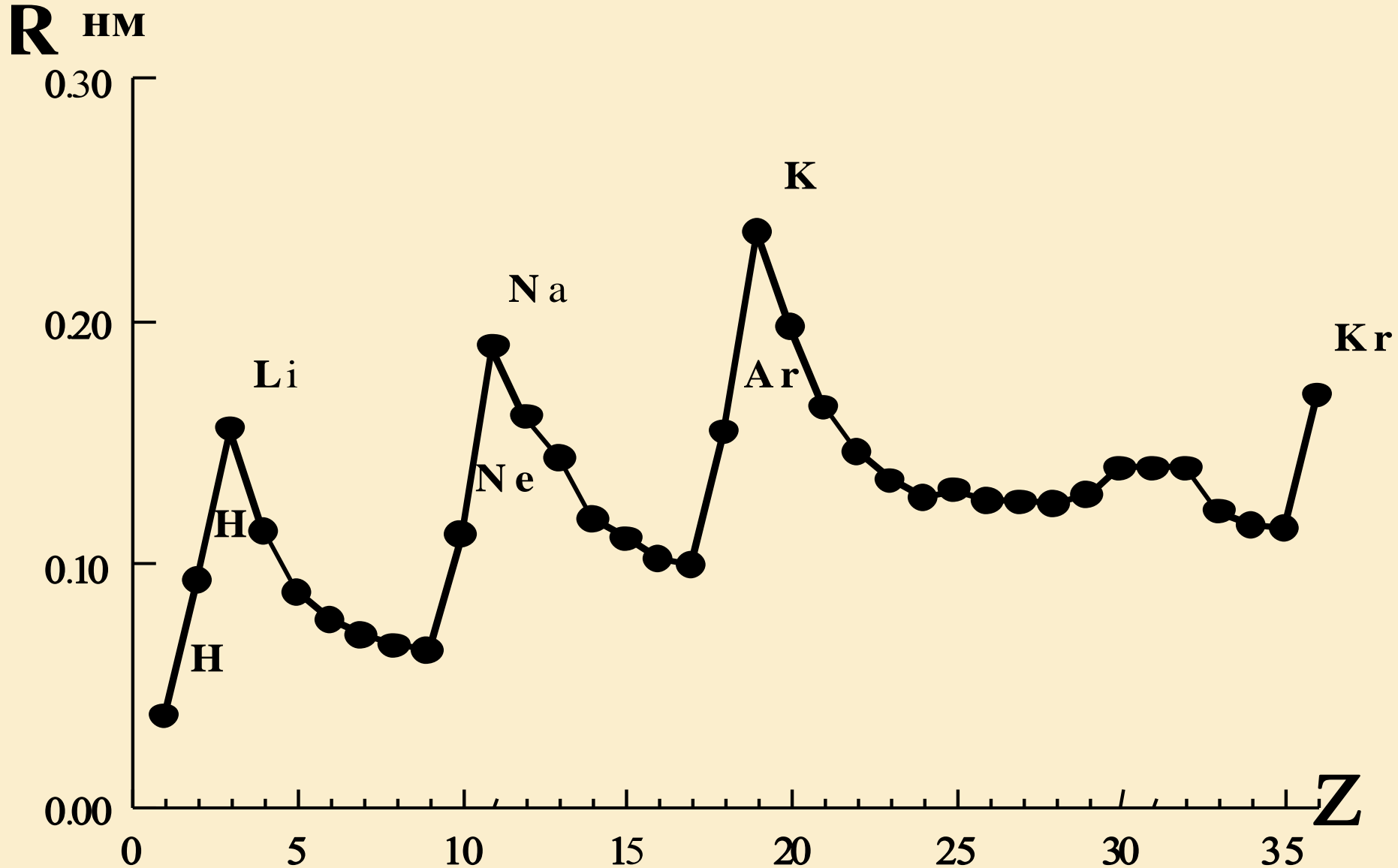
$$0,027 \quad 0,099 \quad 0,181 \text{ нм}$$

■ Эффективные радиусы атомов и ионов определяют по межъядерным расстояниям в молекулах и кристаллах, предполагая, что атомы – несжимаемые шары

Зависимость орбитального радиуса атомов от атомного номера элементов



Зависимость эффективного радиуса атомов от атомного номера элементов



- **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

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

J [эВ/атом];

$E_{\text{ион}} = 96,5 \cdot J$

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 тогда, когда заканчивается отрыв внешних электронов и следующий электрон находится на предвнешнем энергетическом уровне

Периодичность изменения J

Элемент	J₁	J₂	J₃	J₄
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

$J, \text{эВ/ атом}$

30.00

He

Ne

Ar

Kr

20.00

H

Na

K

10.00

Li

0.00

0

5

10

15

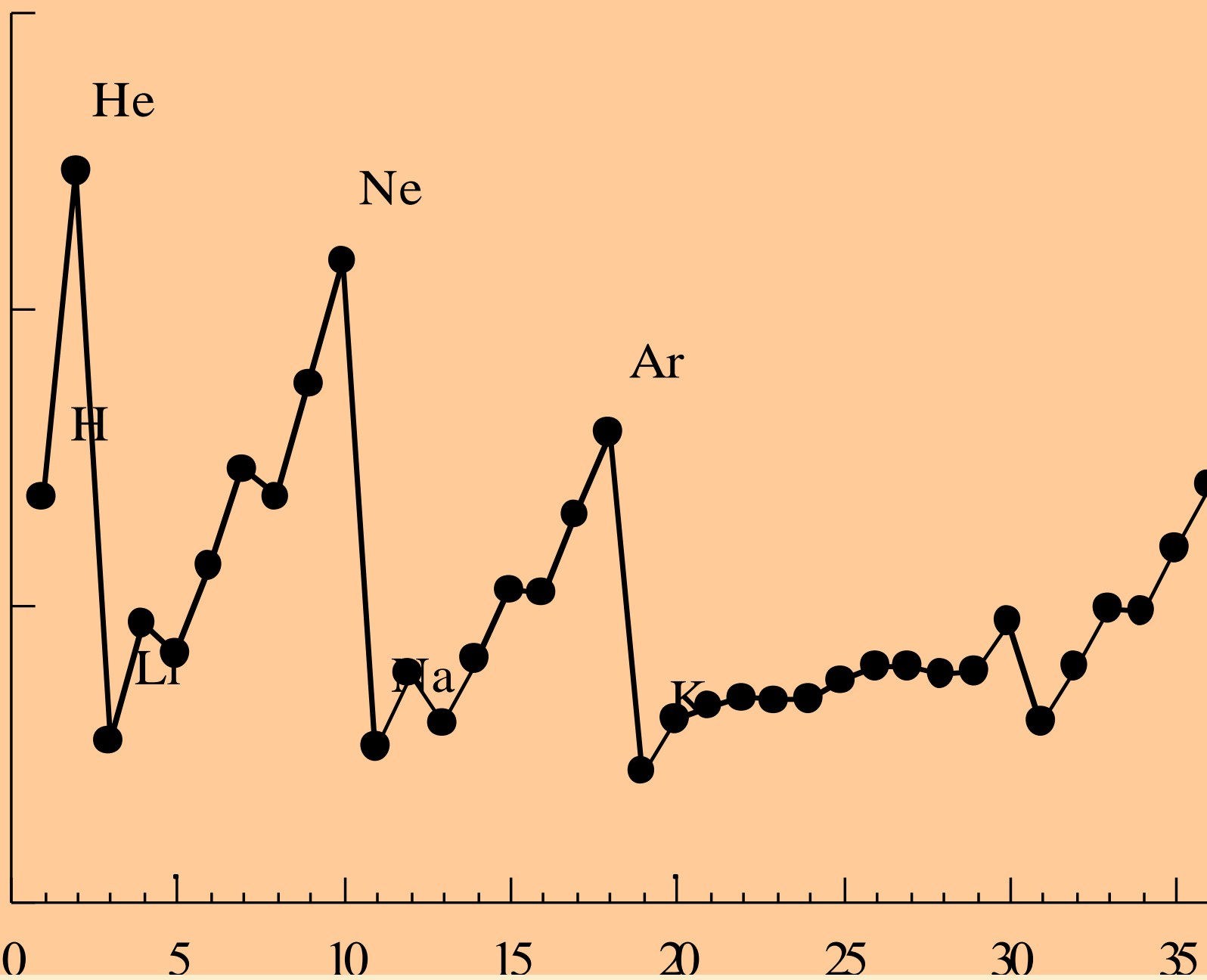
20

25

30

35

Z



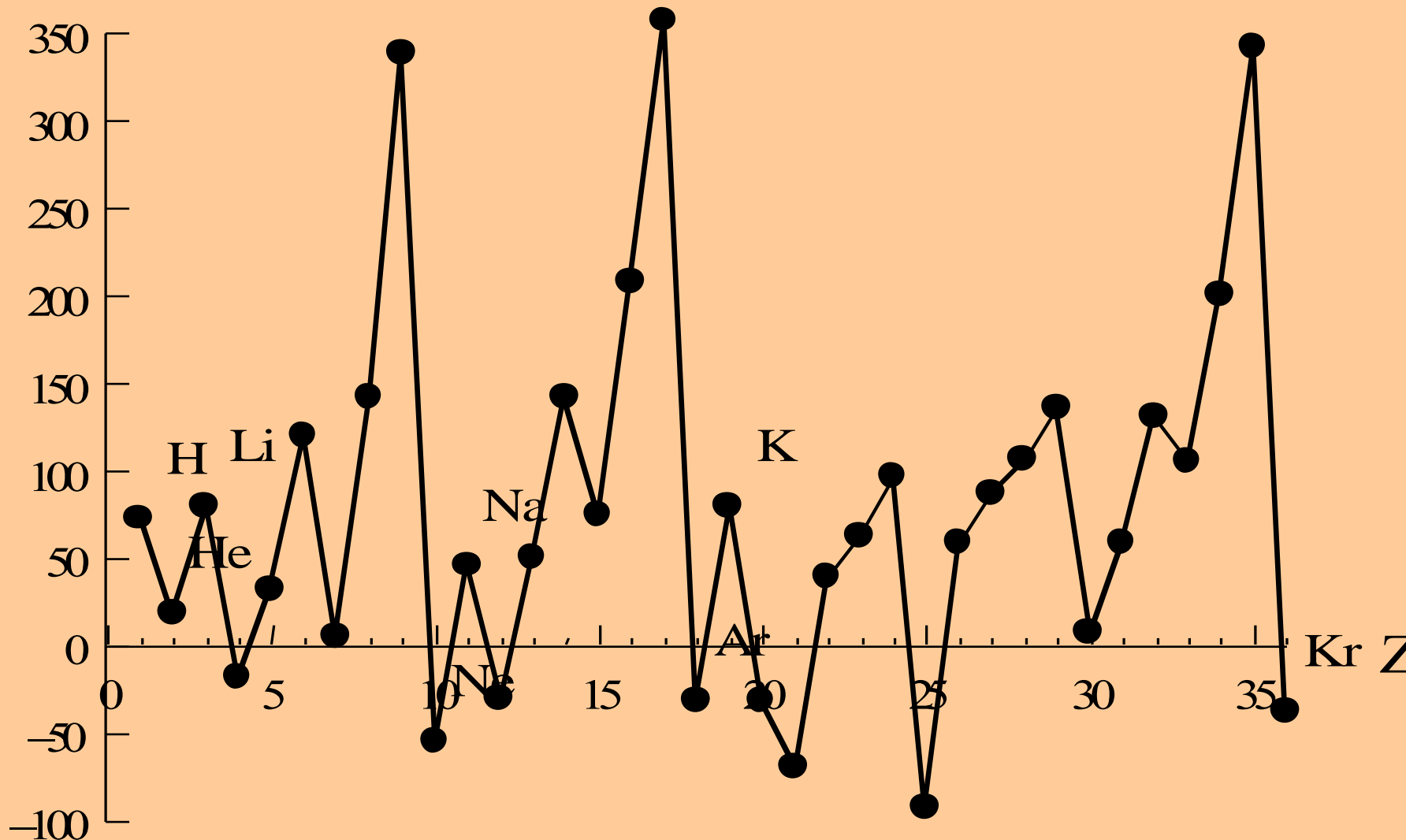
Сродство к электрону

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

E [кДж/моль]

Периодичность изменения F для элементов первых 3-х периодов

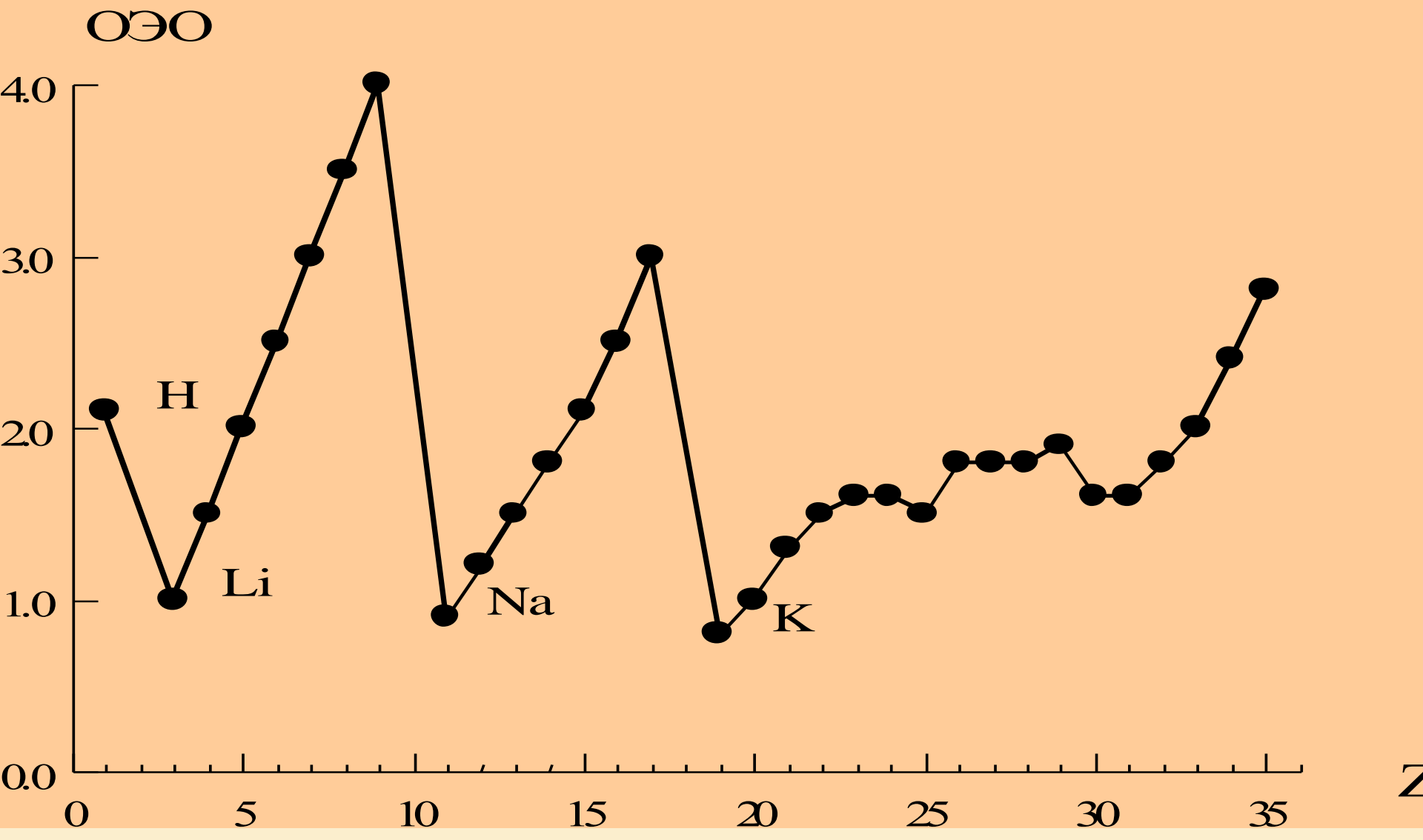
F , (кДж/моль)



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

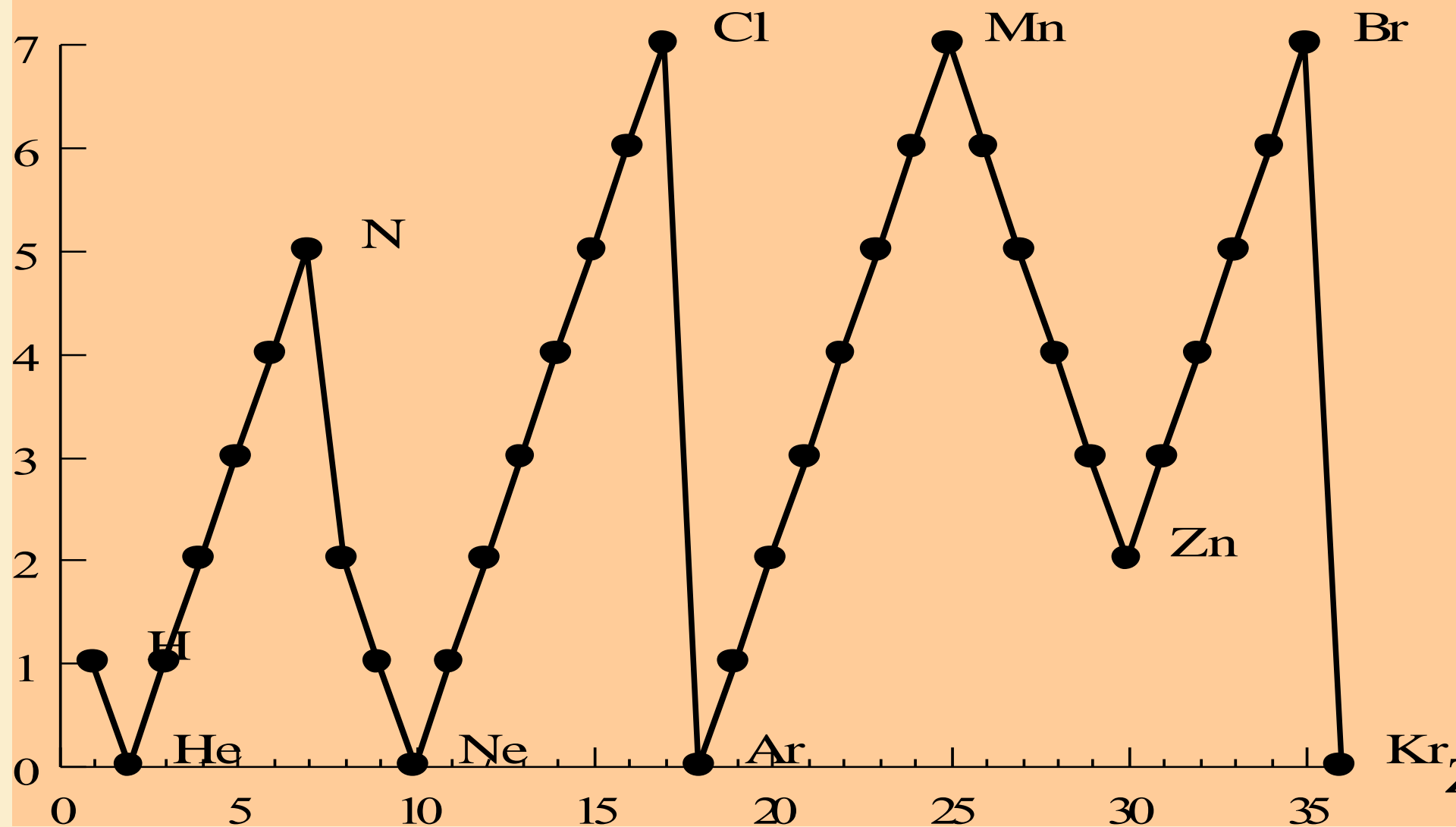


Валентность

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

Зависимость валентности от атомного номера элемента

Валентность



Периодические свойства соединений

- **основно-кислотные свойства оксидов и гидроксидов:**
- **в периодах** ум-ся основные свойства, но ув-ся кислотные свойства этих соединений
- **в группах** основные свойства ув-ся, а кислотные ум-ся

Периодичность кислотно-основных свойств

Группа	S-эл-ты	H	p-эл-ты
Основы	Основ.	d-эл-ты	Кислотные
свойства	ОКСИДЫ	КИСЛ.-ОСН. СВ-ВА	ОКСИДЫ ДЛЯ
ув-ся		ЗАВИСЯТ ОТ С.О.	НЕМЕТАЛЛ

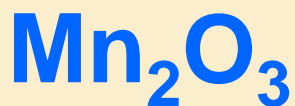
f- эл-ты - преимущественно основные

Кислотно-основные свойства

■ с. о. ↑ КИСЛОТНЫЕ СВОЙСТВА ↑



осн.



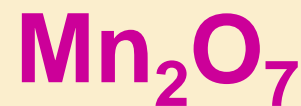
слабо осн.



амфот.



кисл.

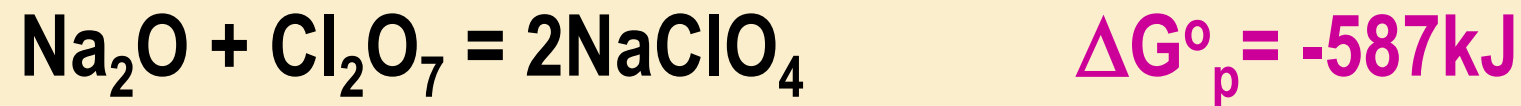
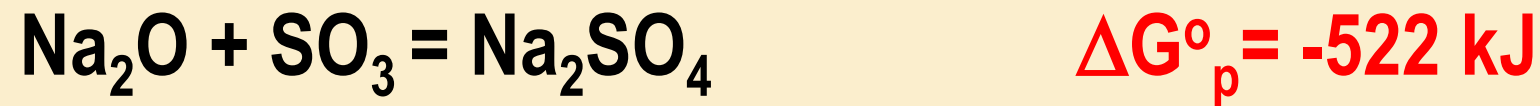
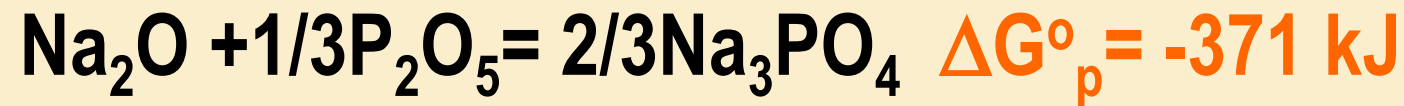
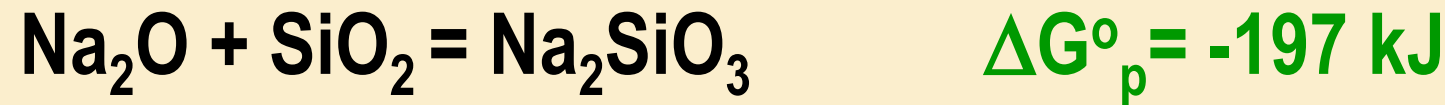
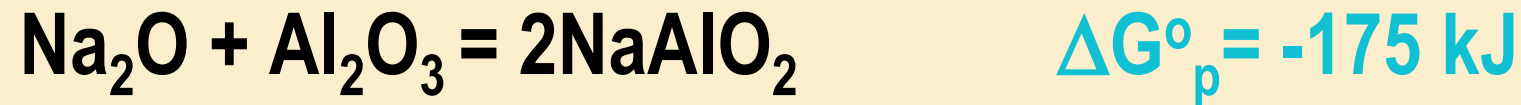


кисл.

■ 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.

H₂O до H₂

d-элементы

**Металлы,
слаб. вос-ли**

(пр., Fe вос-ся

водян.паром)

p-элементы

**Эл.отрицательность
и окисл. спос-ть
увеличивается**

→

**Галогены -
окислители**

- 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

Миниатюрный тест

1-Приведены символы изотопов магния и их распространенность в природе

1) Mg (79 %) 2) Mg (10 %) 3) Mg (11 %)

а) укажите изотоп, содержащий 12 нейтронов.

в) атомную массу магния.

2-Укажите, какие из приведенных частиц

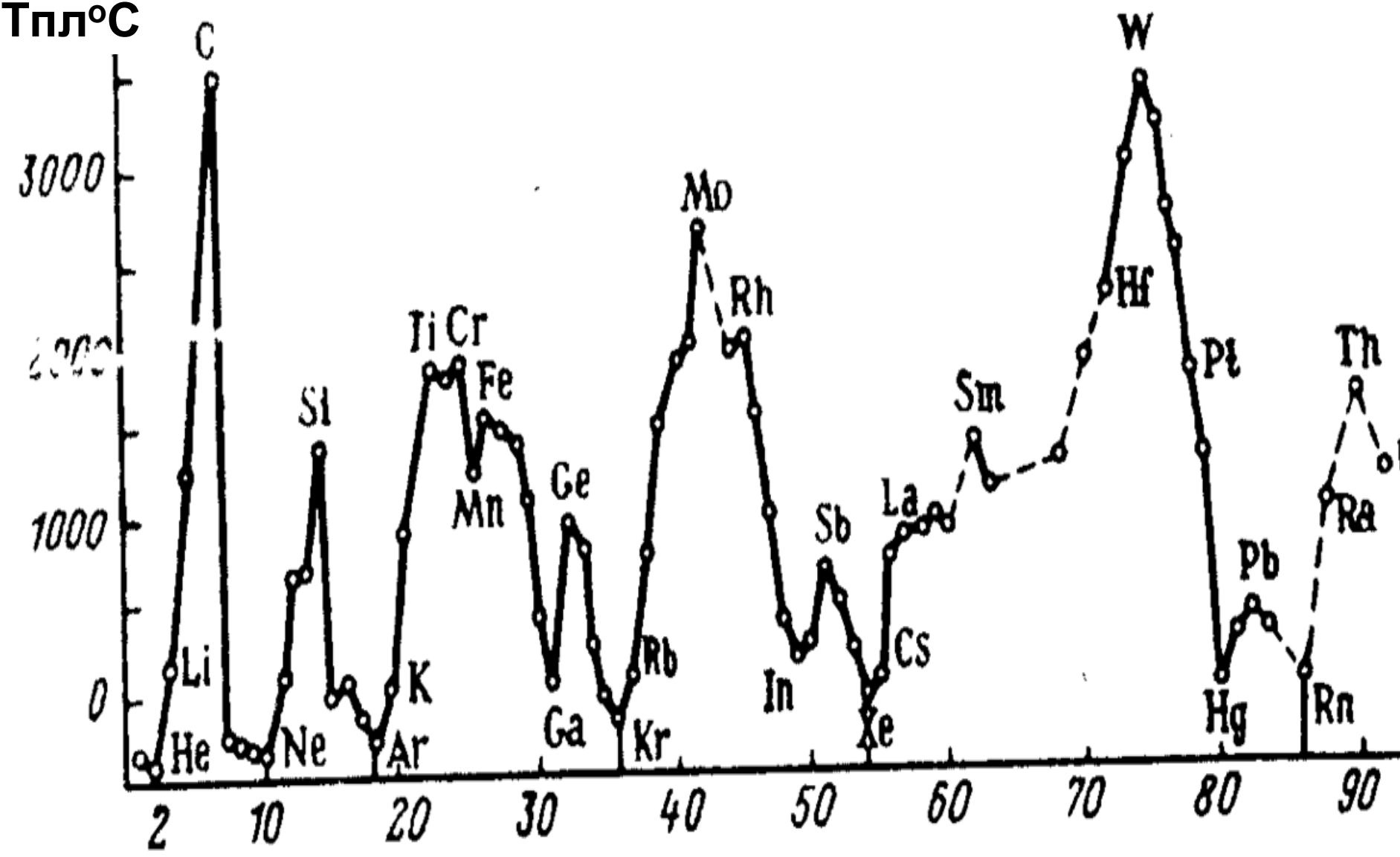
1) F⁻ 2) Ne 3) Na 4) Mg²⁺

а) имеют одинаковое число электронов;

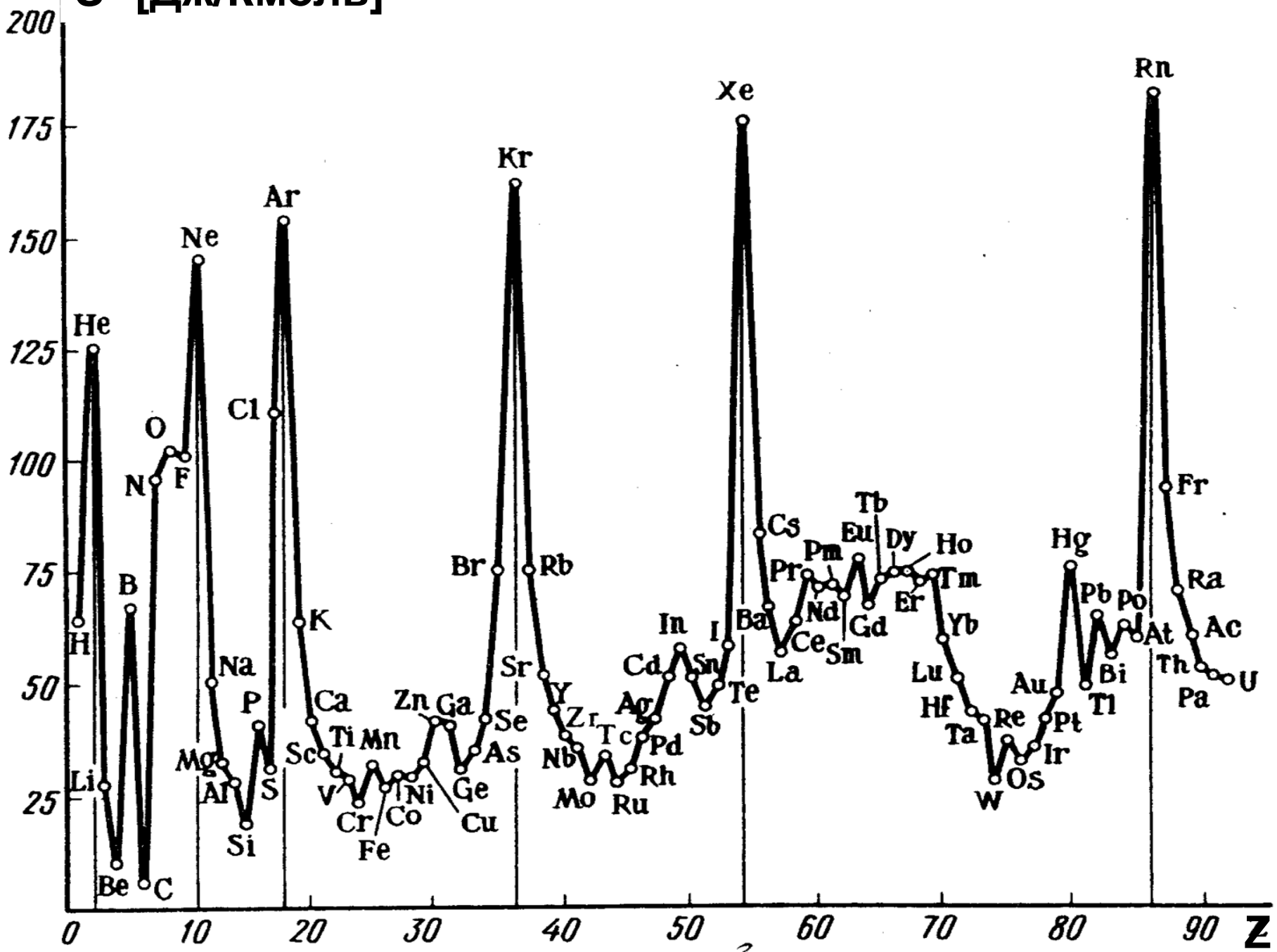
в) незавершенные энергетические уровни

3-Для атома с электронной формулой $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^5$ укажите высшую степень окисления в соединениях (знак и число)

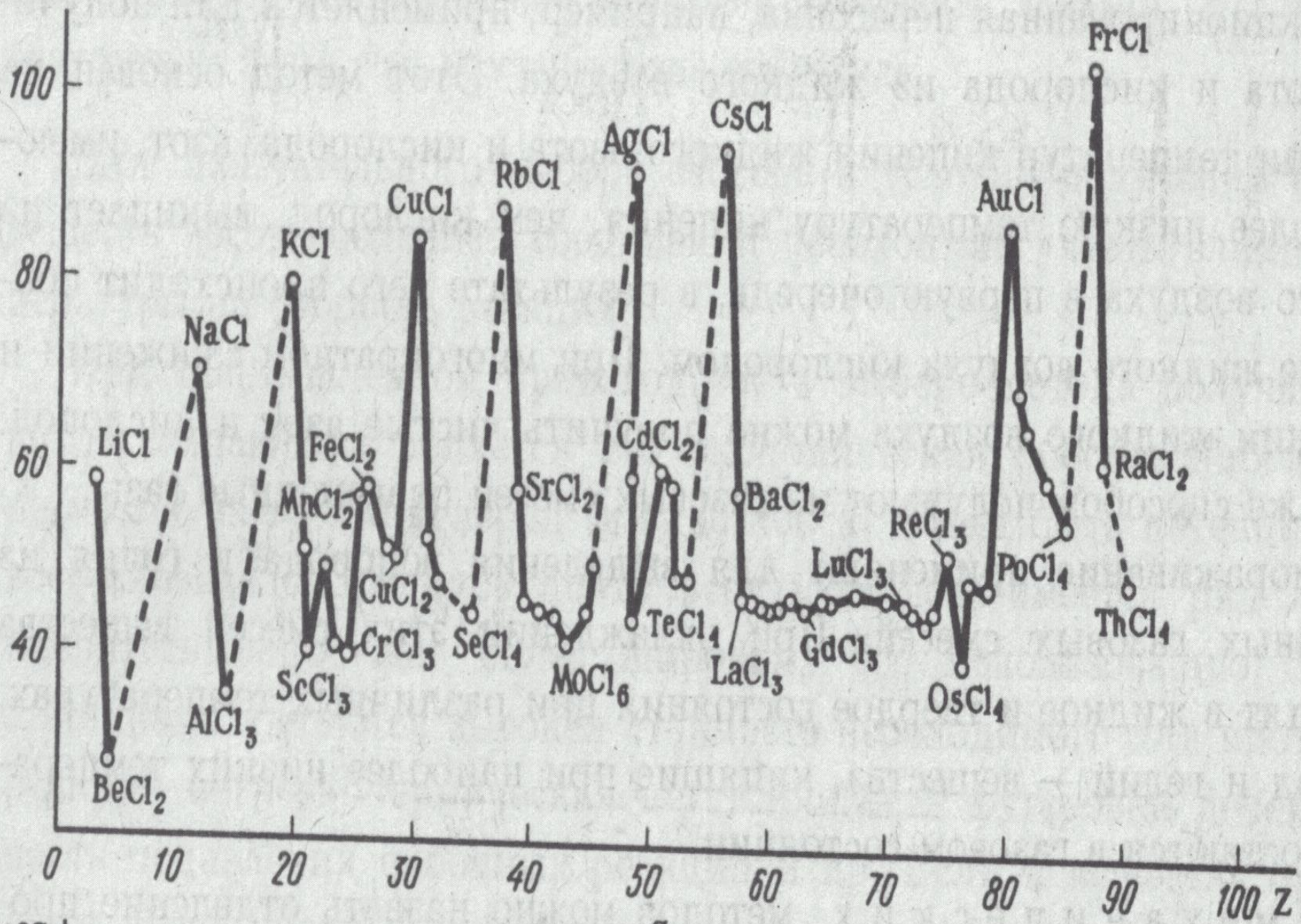
Тпл°С



S° [Дж/Кмоль]



S_{298}° , Дж/(К·моль Cl)



t, °C

α

100 Z