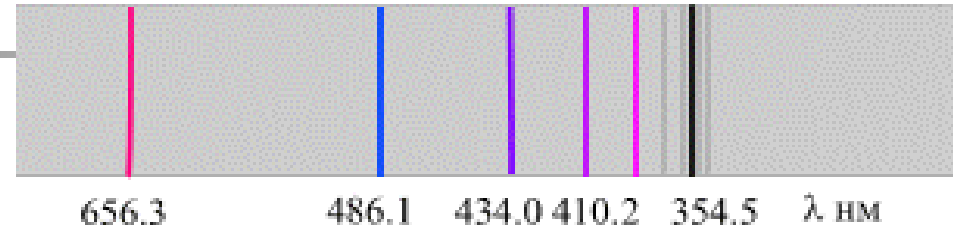


СТРОЕНИЕ АТОМА

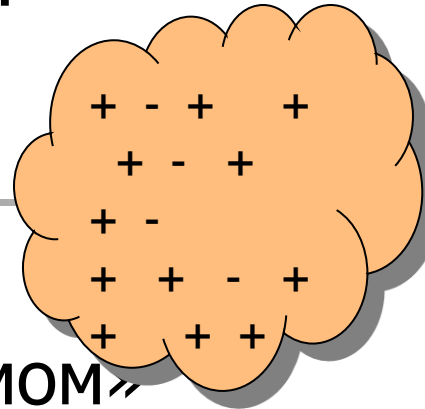
Основные открытия на рубеже XIX – XX веков



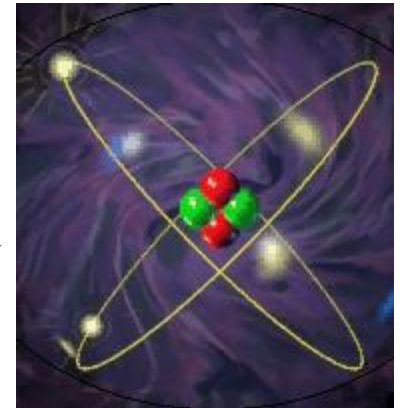
- Атомные спектры (1859 г., Кирхгофф)
- Фотоэффект (1888 г., Столетов)
- Катодные лучи (1859 г., Перрен)
- Рентгеновское излучение (1895 г., В.К.Рентген)
- Радиоактивность урана (1896 г. Беккерель)
- Открытие электрона (1897 г., Томсон)
- Открытие ядра атома (1911 г., Резерфорд)

Модели строения атома

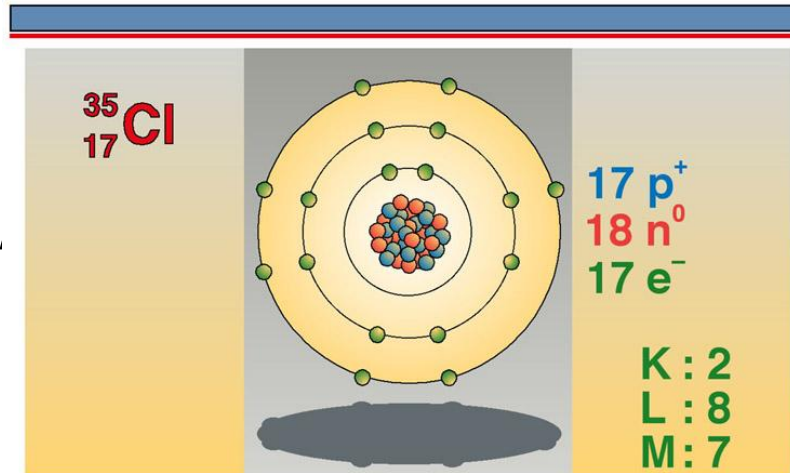
- 1904 г. Томсон, «Пудинг с изюмом»



- 1911 г. Резерфорд, «Планетарная модель»



- 1913 г. Бор, «Квантовая модель»





Ядро и электронная оболочка

Каждый атом состоит из
ядра и электронной
оболочки

Электронная оболочка
атома – совокупность
электронов e^- (заряд -1).

$$m(e^-) = 9.1095 \cdot 10^{-31} \text{ кг}$$

$$q(e^-) = 1.6022 \cdot 10^{-19} \text{ Кл}$$

Ядро атома состоит из
нуклонов:

протонов p (заряд +1)
и нейтронов n (заряд 0)

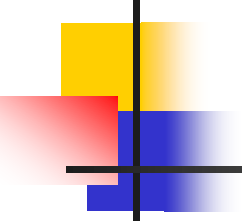
$$m(p) = 1,6726 \cdot 10^{-27} \text{ кг}$$

$$q(e^-) = 1.6022 \cdot 10^{-19} \text{ Кл}$$

Количество e^- в атоме равно количеству протонов (p) и
равно порядковому номеру элемента (N_{\circ}).

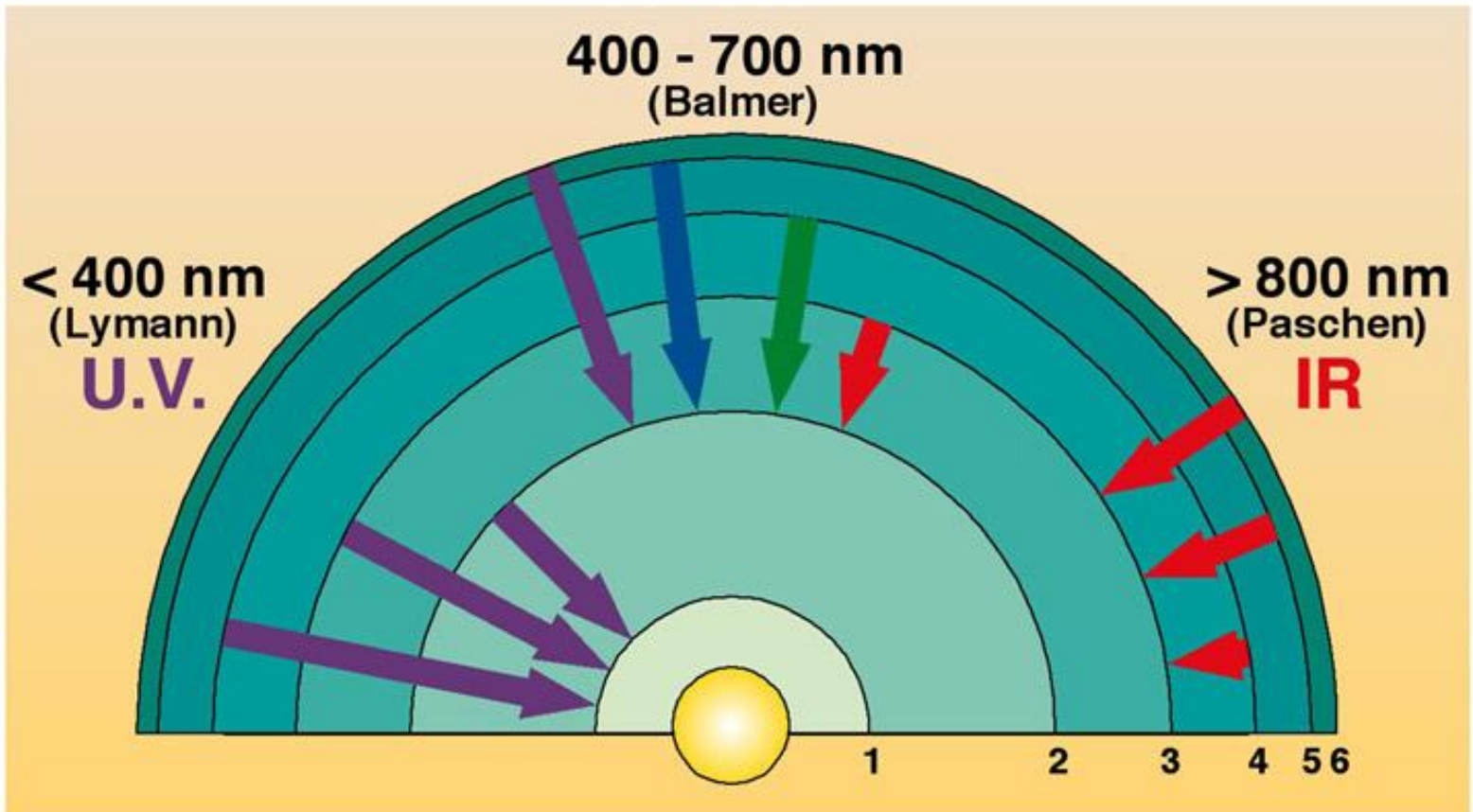
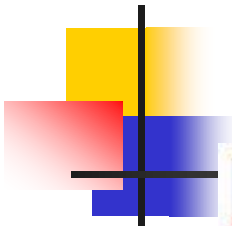
$$N_{\circ} = N_p = N_{e^-}$$

Современная теория строения атома – квантовая механика



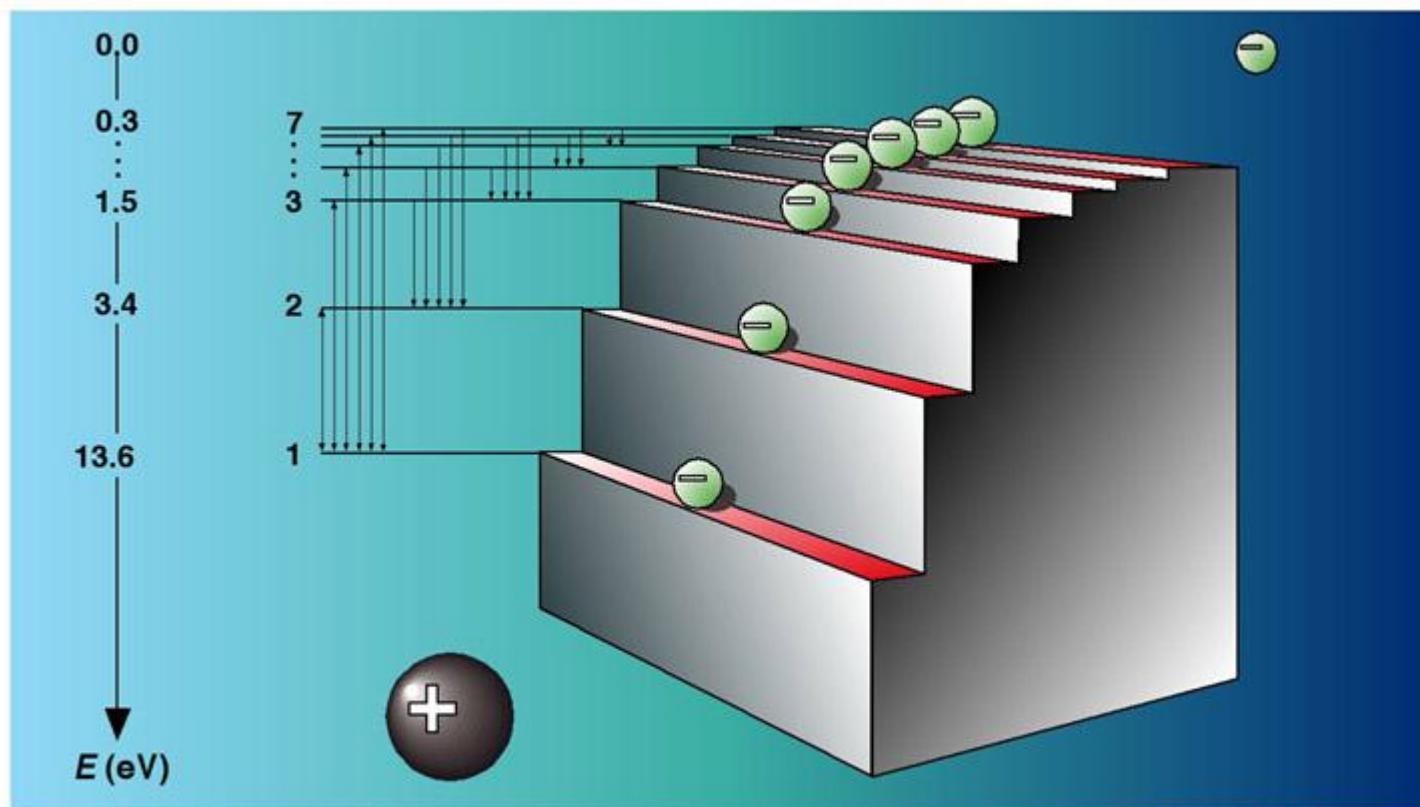
Квантовую механику от классической механики отличают три основополагающих идеи

- **Квантование** энергии электронов в атоме
- **Двойственная** природа электрона
- **Вероятностный** характер законов микромира



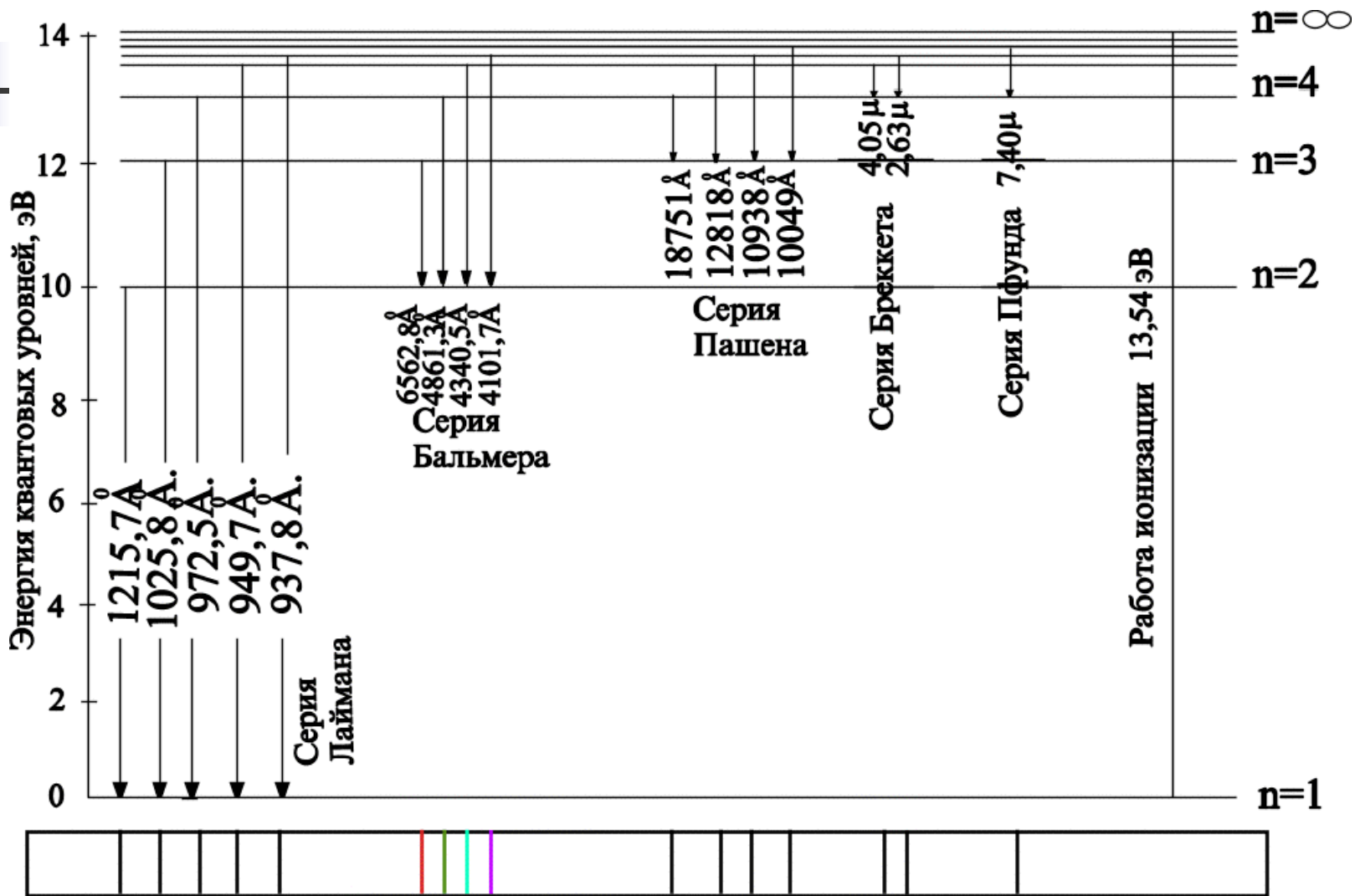
Квантование энергии электронов в атоме водорода

$$E = - 1312/n^2 \text{ кДж/моль}$$



M 10

Схема энергетических уровней и спектр атома водорода



Энергетические уровни и спектр атома водорода



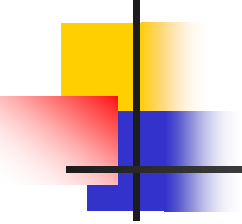
1924 г. Гипотеза Луи де Бройля:

Двойственная природа электрона
(корпускулярно-волновой дуализм)



Принцип неопределённости Гейзенберга:

Невозможно одновременно точно определить **координаты и импульс** движущегося в атоме электрона, можно говорить лишь о **вероятности нахождения электрона** в различных точках околоядерного пространства



Вероятность нахождения e^- в данной точке пространства определяется величиной Ψ^2 , где Ψ – это волновая функция (математическое уравнение, определяющее поведение e^- -волны)

Определить волновую функцию (Ψ) и вероятность нахождения e^- в данной точке (Ψ^2) можно исходя **ИЗ ВОЛНОВОГО уравнения Шрёдингера**



Уравнение Шрёдингера

1926 г. Эрвин Шрёдингер

- уравнение, описывающее состояние e^- в атоме

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

\hbar – постоянная Планка

m – масса электрона

x, y, z – координаты

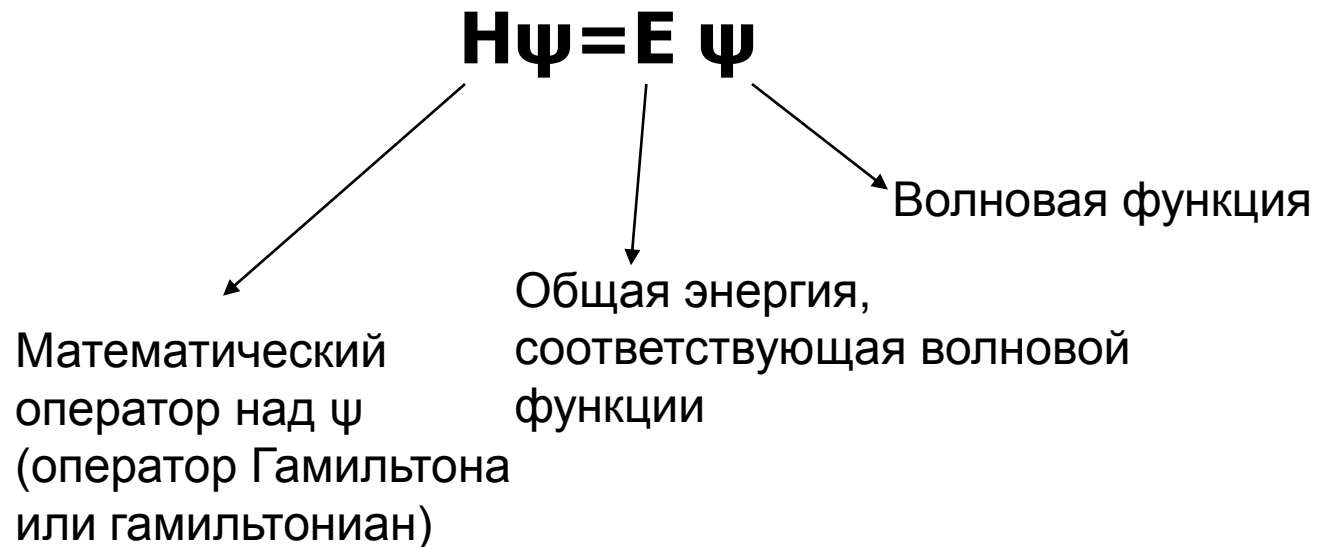
U – потенциальная энергия

E – полная энергия

ψ – волновая функция электрона



Одна из форм уравнения Шрёдингера:



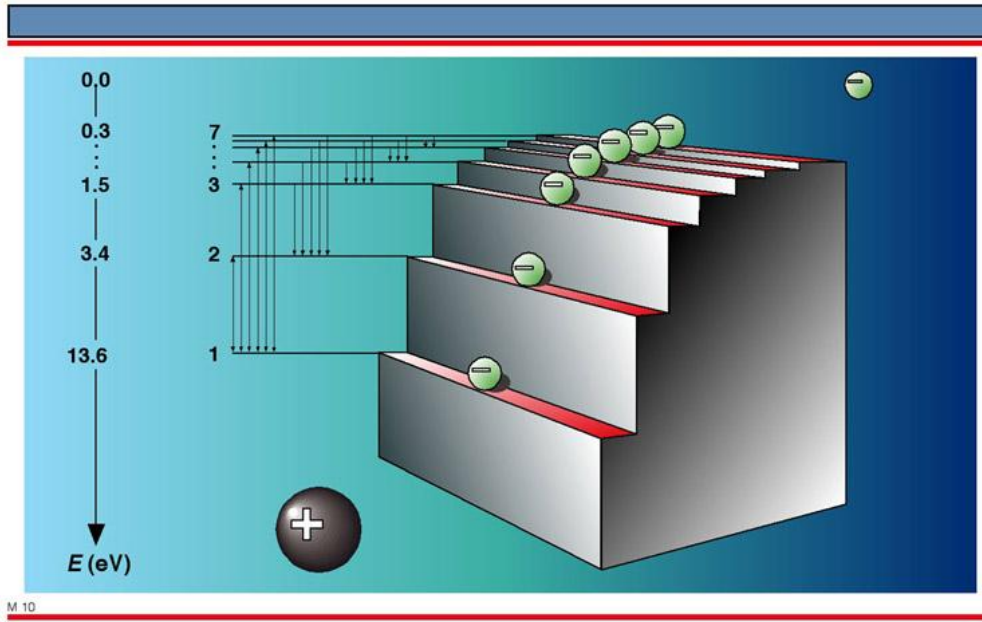
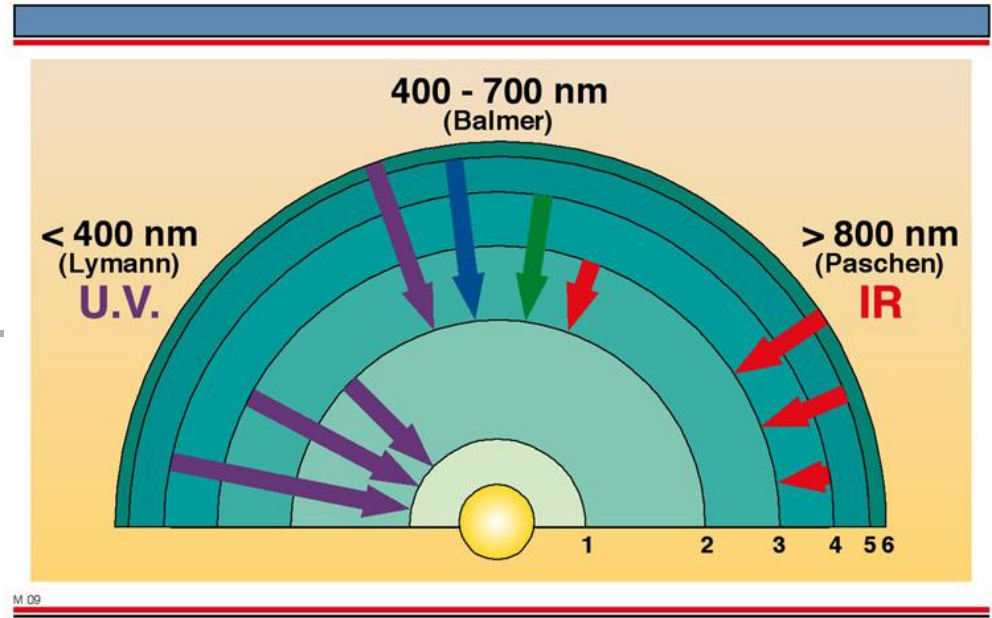


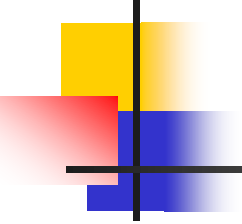
Квантовые числа

Следствием решения уравнения Шрёдингера являются квантовые числа, характеризующие состояние e^- в атоме.

n - главное квантовое число определяет энергию e^- в атоме, принимает значения 1, 2, 3 ...

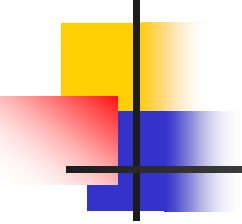
Совокупность e^- в атоме с одинаковым значением n называется энергетическим уровнем (K, L, M, N)





l - орбитальное квантовое число,
характеризует форму атомной орбитали (АО)
 l принимает значения от 0 до $(n - 1)$.

Совокупность e^- в атоме с одинаковым значением l (при равном n) называется **энергетическим подуровнем**



$\ell =$ 0 1 2 3
 s p d f

При $n = 1$ $\ell = 0$ s

При $n = 2$ $\ell = 0, 1$ s, p

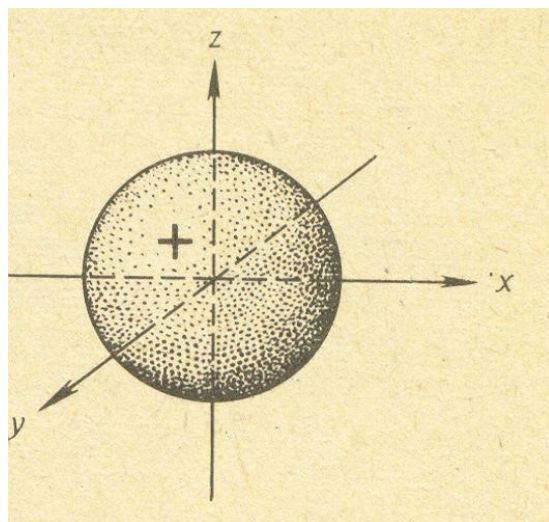
При $n = 3$ $\ell = 0, 1, 2$ s, p, d

Каждый энергетический уровень, кроме первого, расщеплён на подуровни

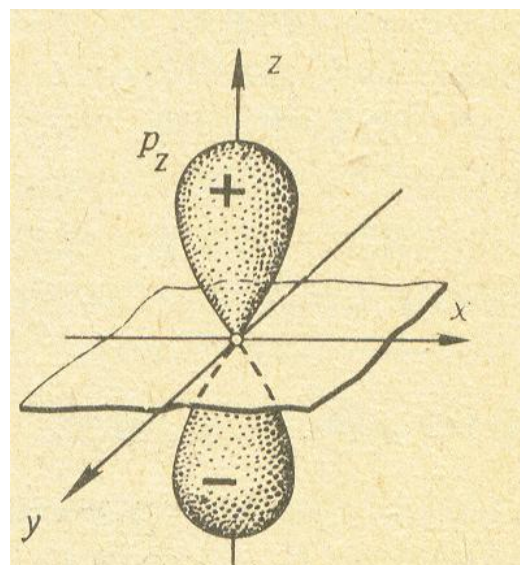
В зависимости от значения ℓ различается форма атомных орбиталей (АО)

Граничная поверхность АО:

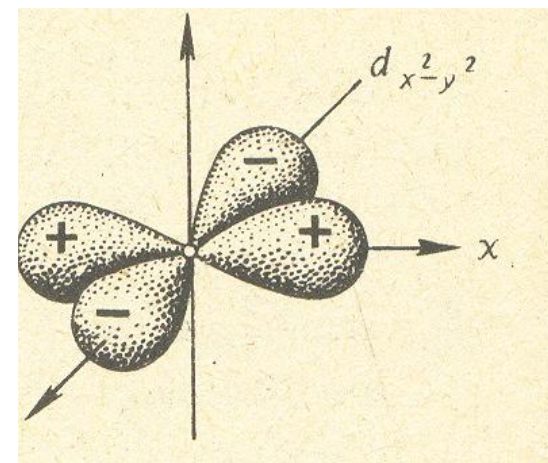
s-AO:

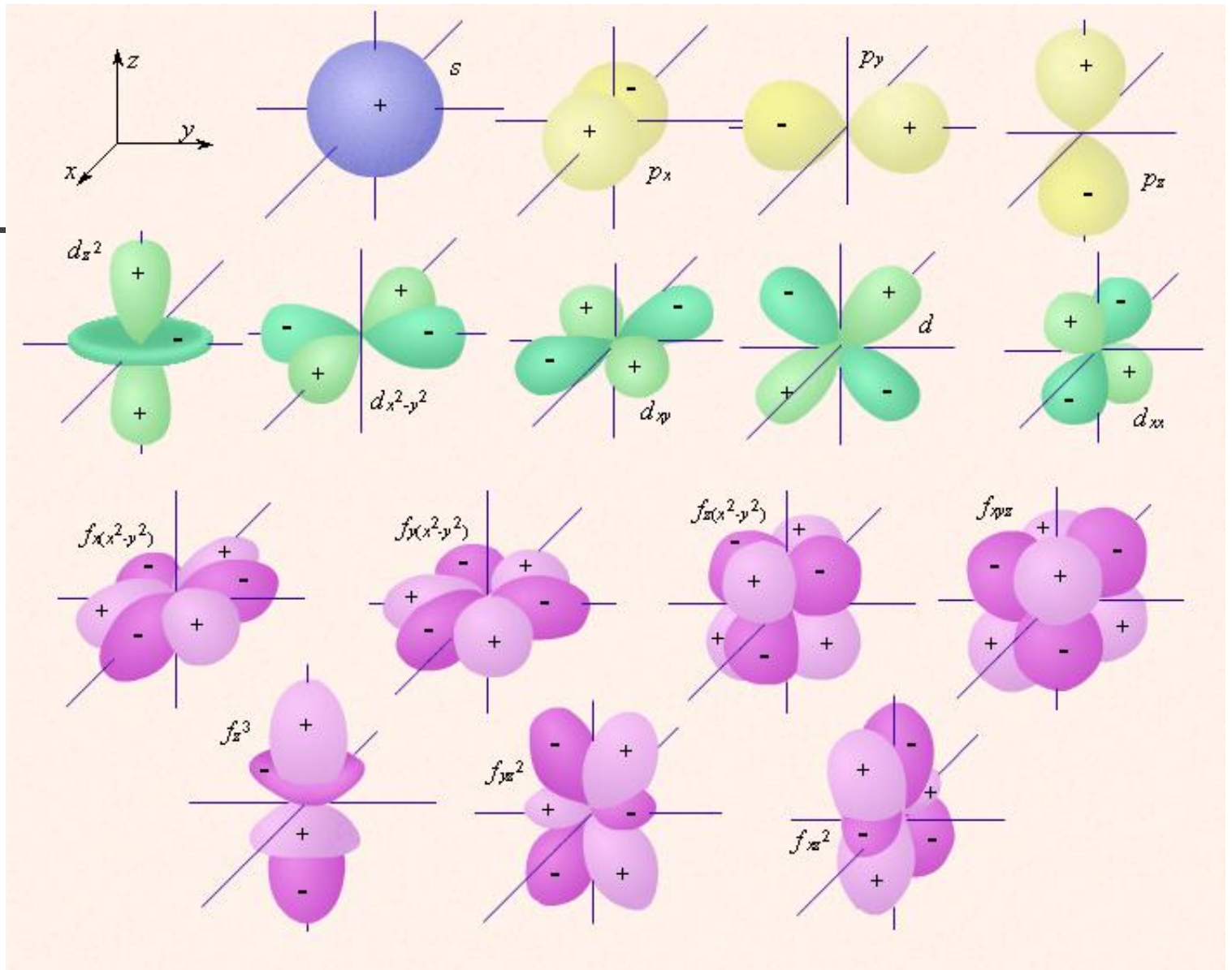
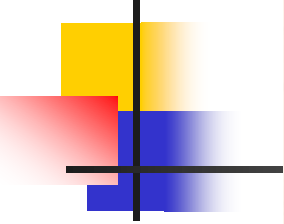


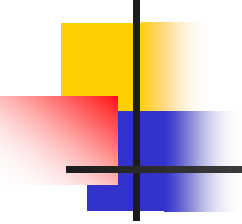
p-AO:



d-AO:







m_ℓ - магнитное квантовое число,
характеризует пространственную
ориентацию АО.

m_ℓ принимает значения $+ \ell \dots 0 \dots - \ell$
и указывает на число АО на энергетическом
подуровне.

На одном подуровне может находиться:

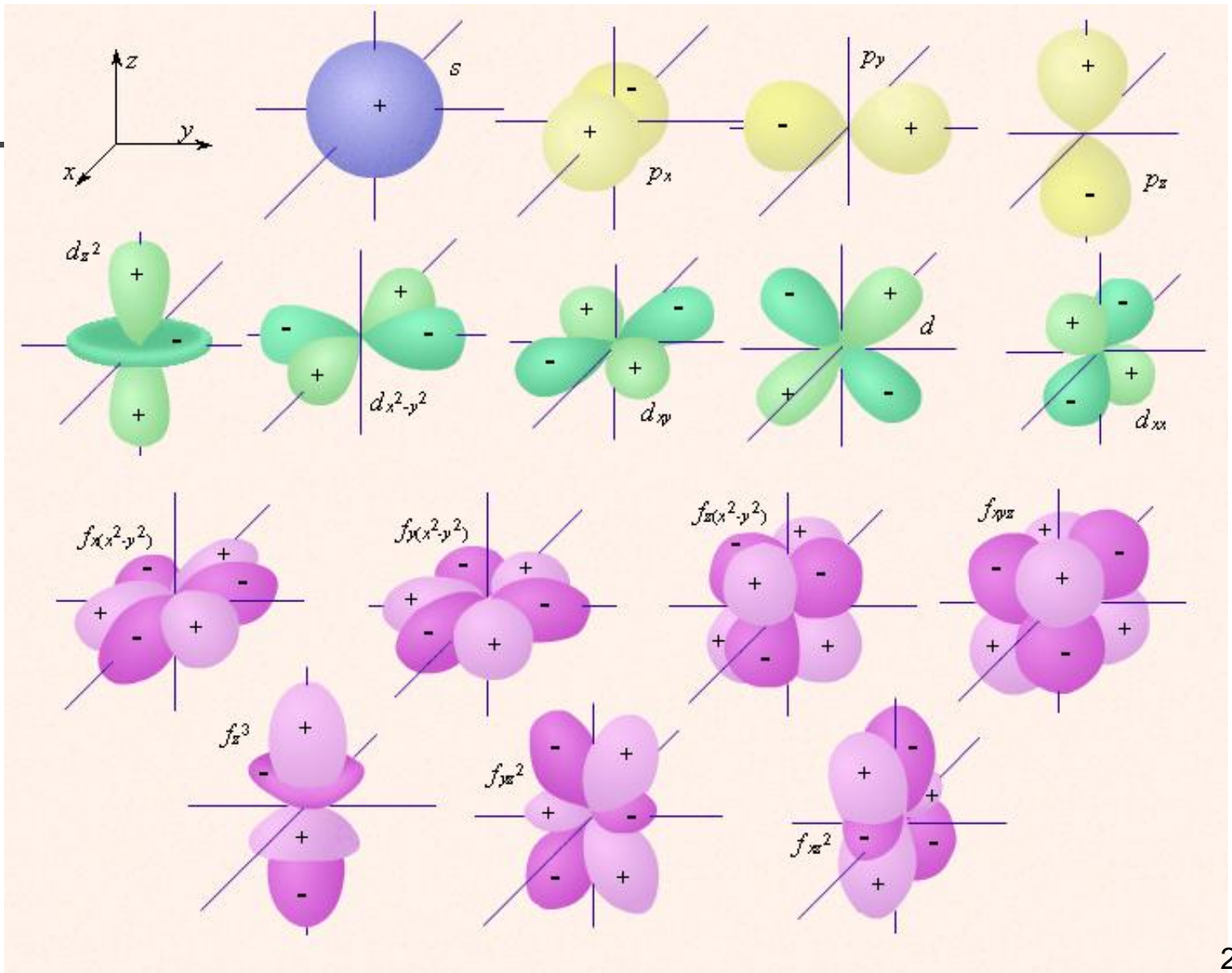
$$(2\ell + 1) \text{ АО}$$

Все АО одного подуровня вырождены, то есть
имеют одинаковую энергию



		Значения m_ℓ	Число АО (вырожденность)
$\ell = 0$	s	$m_\ell = 0$	1
$\ell = 1$	p	$m_\ell = +1, 0, -1$	3
$\ell = 2$	d	$m_\ell = +2, +1, 0, -1, -2$	5
$\ell = 3$	f	$m_\ell = +3, +2, +1, 0, -1, -2, -3$	7

Ориентация АО в пространстве

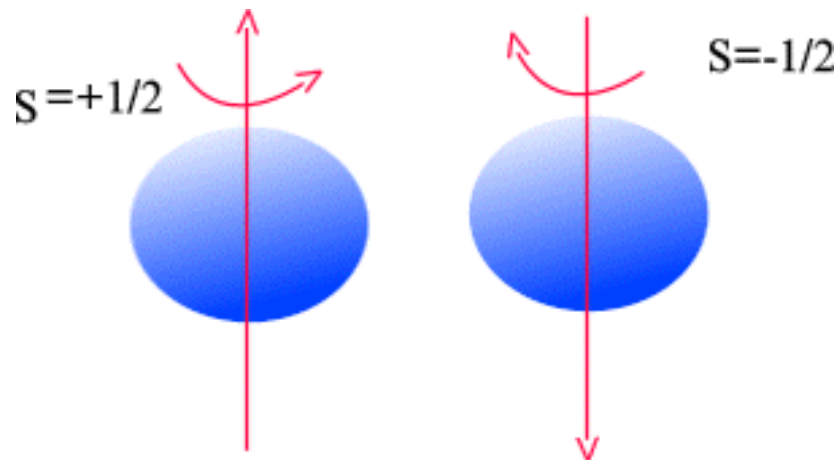




m_s - спиновое квантовое число

m_s характеризует собственный момент движения электрона.

m_s принимает два значения $+1/2$ и $-1/2$.





Многоэлектронные атомы

Порядок заполнения энергетических уровней и подуровней электронами:

1s 2s 2p 3s 3p 4s 3d 4p 5s 4d 5p 6s 4f 5d 6p 7s 5f 6d 7p
и т.д.

Основные принципы и правила заполнения электронами атомных орбиталей

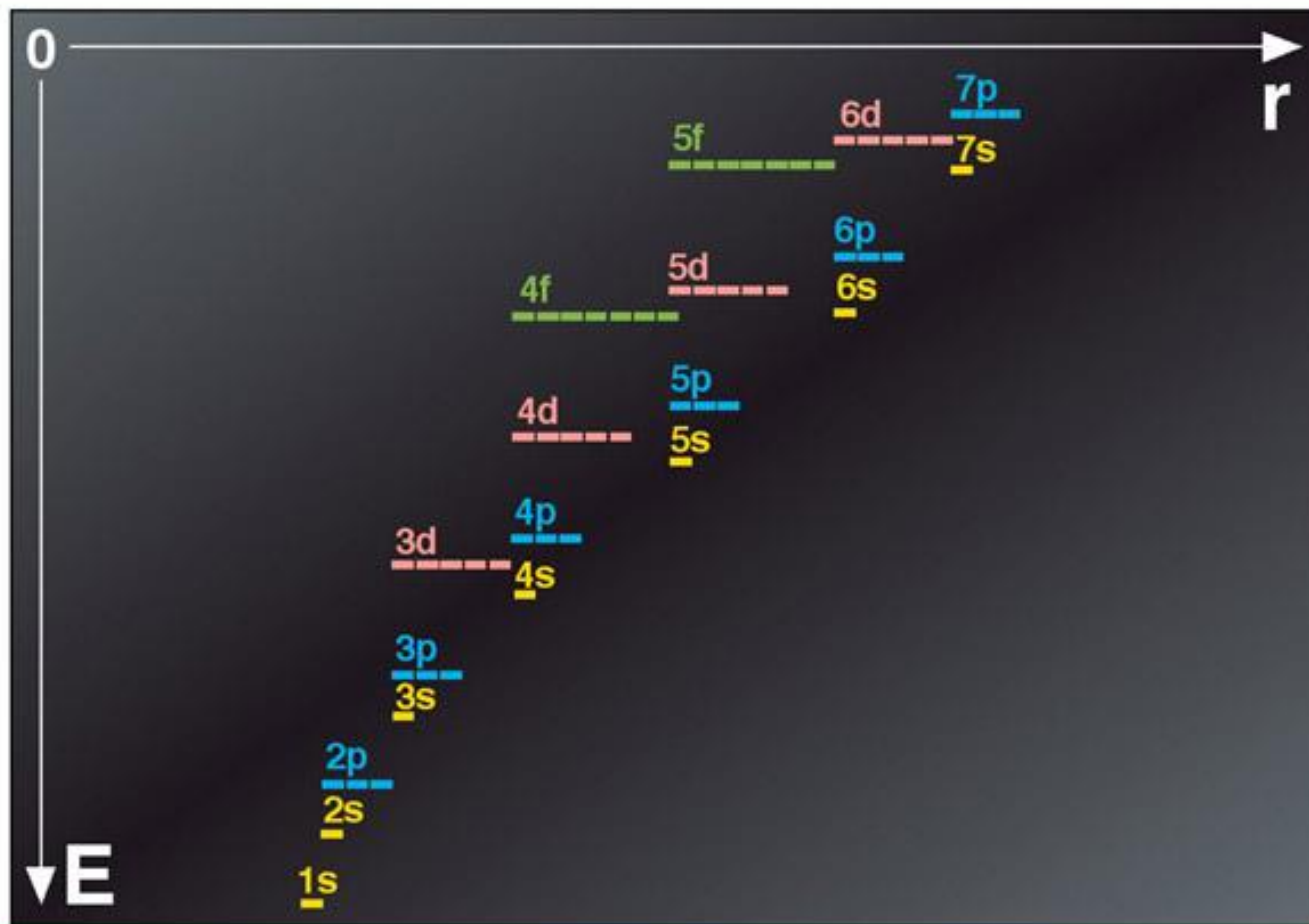
Принцип наименьшей энергии:

Электрон в атоме в первую очередь стремится занять энергетический уровень и подуровень с наименьшей энергией

Правила Клечковского:

- 1 правило:** Электрон в атоме в первую очередь занимает подуровень с наименьшим значением $(n + \ell)$.
- 2 правило:** При равенстве суммы $(n + \ell)$ двух подуровней, электрон занимает подуровень с наименьшим значением ℓ

Графическое представление правил Клеchkовского





Принцип запрета Паули:

В атоме не может быть двух электронов с одинаковым набором четырёх квантовых чисел

Максимальная ёмкость:

атомной орбитали – **2 электрона**

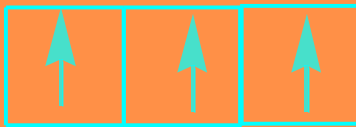
подуровня – **$2(2\ell + 1)$ электронов**

уровня – **$2n^2$ электронов**



Правило Гунда:

При прочих равных условиях суммарный спин системы должен быть максимальным



$$\Sigma m_s = +1/2 + 1/2 + 1/2 = 3/2$$



$$\Sigma m_s = +1/2 + 1/2 - 1/2 = 1/2$$



$$\Sigma m_s = +1/2 - 1/2 + 1/2 = 1/2$$

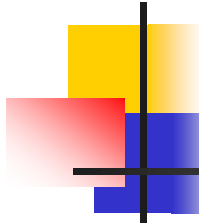
Валентные электроны

Семейство элементов	Электронная формула валентных электронов
s – элементы	ns^{1-2}
p – элементы	$ns^2 np^{1-6}$
d - элементы	$ns^2 (n-1)d^{1-10}$

s-элемент Ba ... $6s^2$

p-элемент As ... $4s^2 4p^3$

d-элемент Nb ... $5s^2 4d^3$



1s																	He	
2s	Li	Be											B	C	N	O	F	Ne
3s	Na	Mg	III B	IV B	V B	VI B	VII B	VIII B			IX B	X B	Al	Si	P	S	Cl	Ar
4s	K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
5s	Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
6s	Cs	Ba	La-Lu	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
7s	Fr	Ra	Ac-Lr															
4f	1A	2A	La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Th	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu	
5f			Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Mm	No	Lr	

St 829