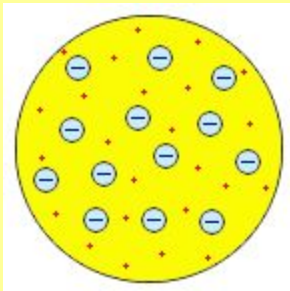


Будова атому

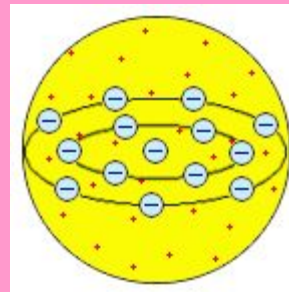
Історичні моделі будови атому

1) 1901 р. Жан Перрен висунув припущення про ядерно-планетарну будову атома

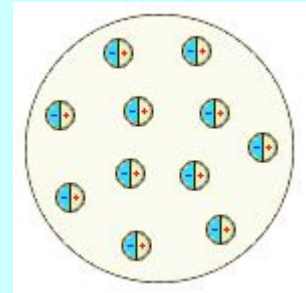
2) 1902 р. У. Томсон (лорд Кельвін) висунув припущення, що атом є згустком позитивно зарядженої матерії, всередині якої рівномірно розподілені електрони (кекс з ізіюмом).



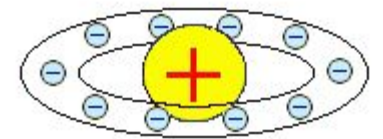
3) 1903 р. Дж. Дж. Томсон детально розвиває цю модель. Він вважає, що електрони всередині позитивно зарядженої кулі містяться у одній площині та утворюють концентричні кільця.



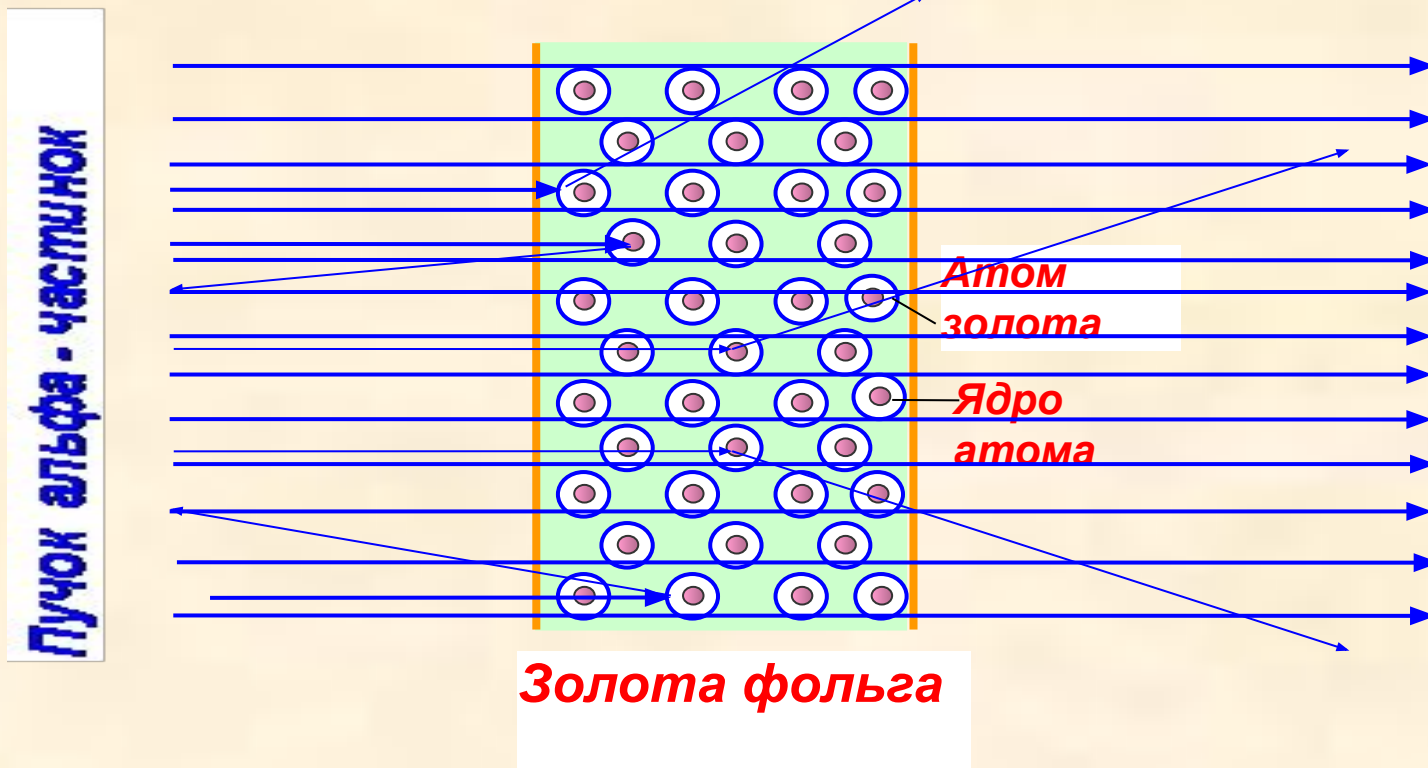
4) 1903 р. Філіп фон Ленард створив модель, у якій протилежні заряди у атомі не існують окремо



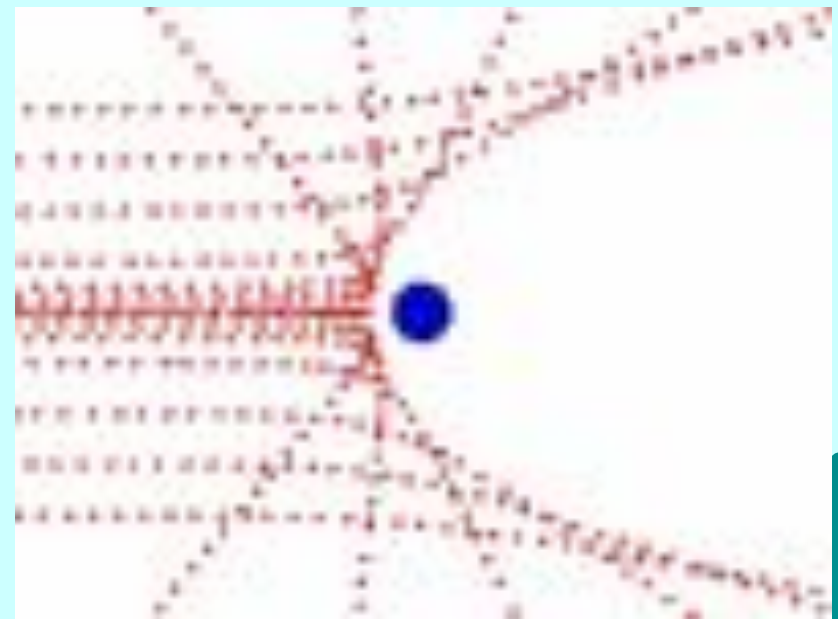
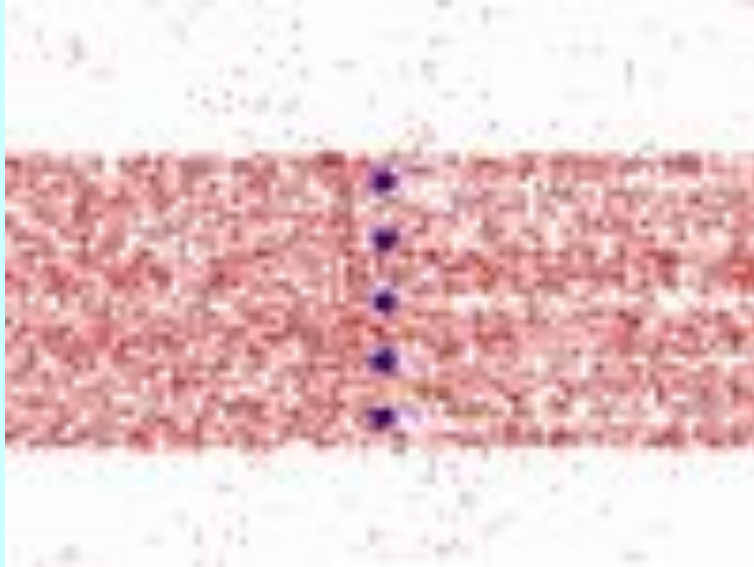
5) 1904р. Хантаро Нагаока запропонував модель, в якій атом подібний до планети Сатурн;



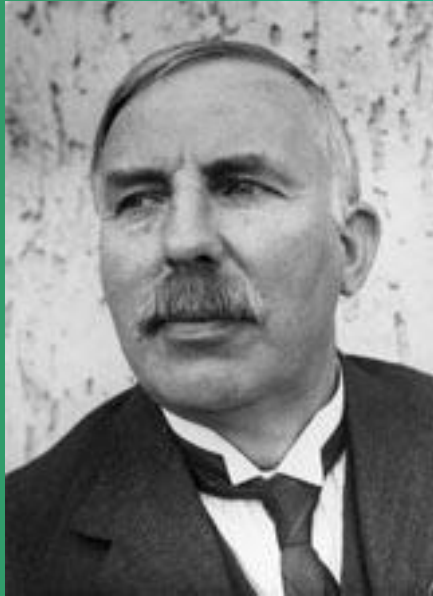
Дослід Резерфорда з дослідження будови атома



досліди Резерфорда



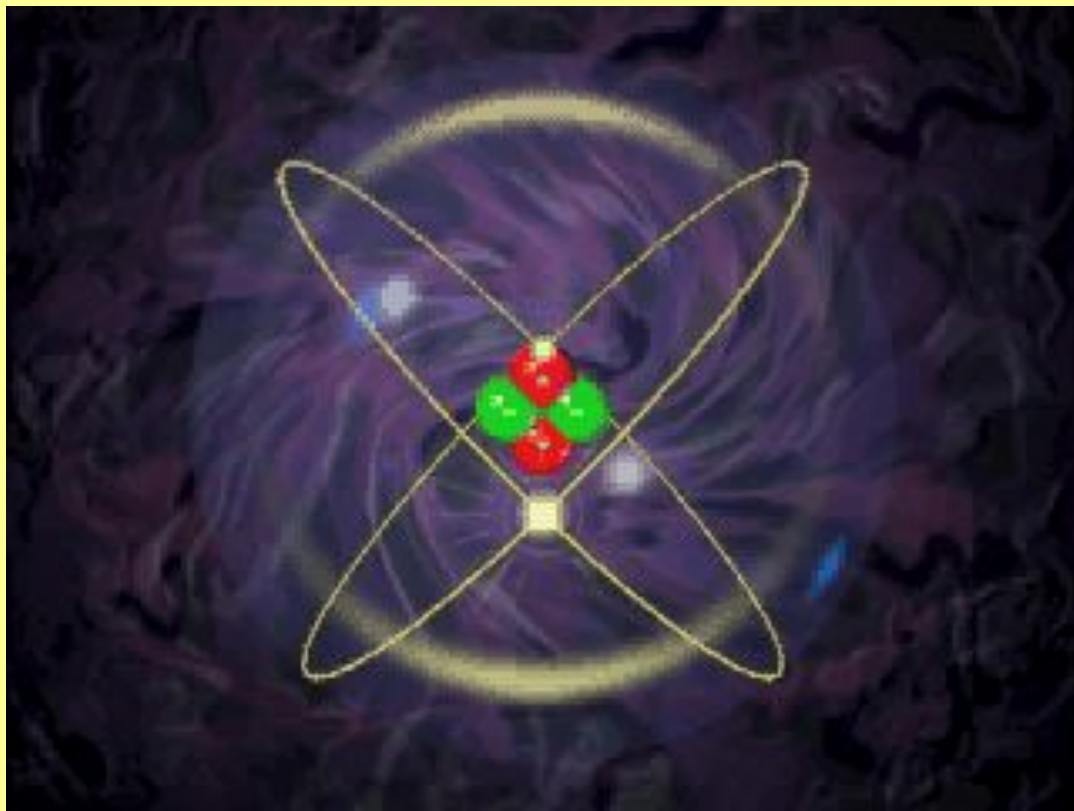
Ернест РЕЗЕРФОРД, Барон Резерфорд Нельсонський I 1871-1937



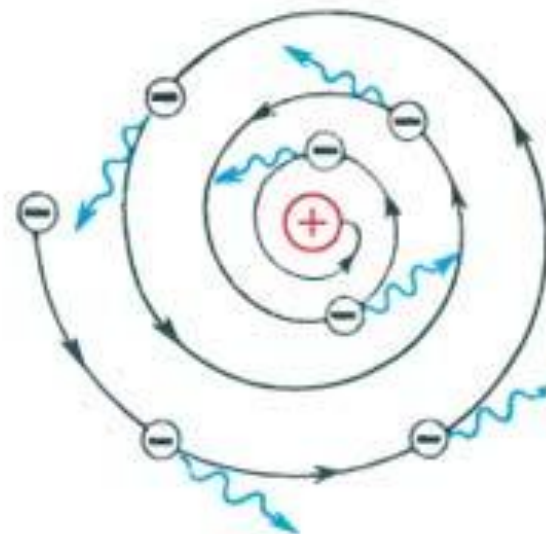
Новозеландський фізик. Народився в Нельсоні, у родині фермера-ремісника. Виграв стипендію для одержання освіти у Кембріджському університеті в Англії. Після його закінчення дістав призначення в канадський університет Мак-Гілл, де разом із Фредеріком Содді встановив основні закономірності явища радіоактивності, за що в 1908 році отримав Нобелівську премію з хімії. Незабаром учений перебрався в Манчестерський

університет, де під його керівництвом Ганс Гейгер винайшов свій знаменитий лічильник Гейгера. Саме там у 1911 році відкрив існування атомного ядра. В роки Першої світової війни займався розробкою сонарів. У 1919 році став професором фізики і директором Кавендишської лабораторії Кембріджського університету і у тому самому році відкрив розпад ядра в результаті бомбардування важкими частинками високих енергій. На цій посаді Резерфорд залишався до кінця життя. Одночасно був резидентом Королівського наукового суспільства. Похований у Вестмінстерському абатстві поруч з Ньютоном, Дарвіном і Фарадеєм.

Планетарна модель атома Резерфорда

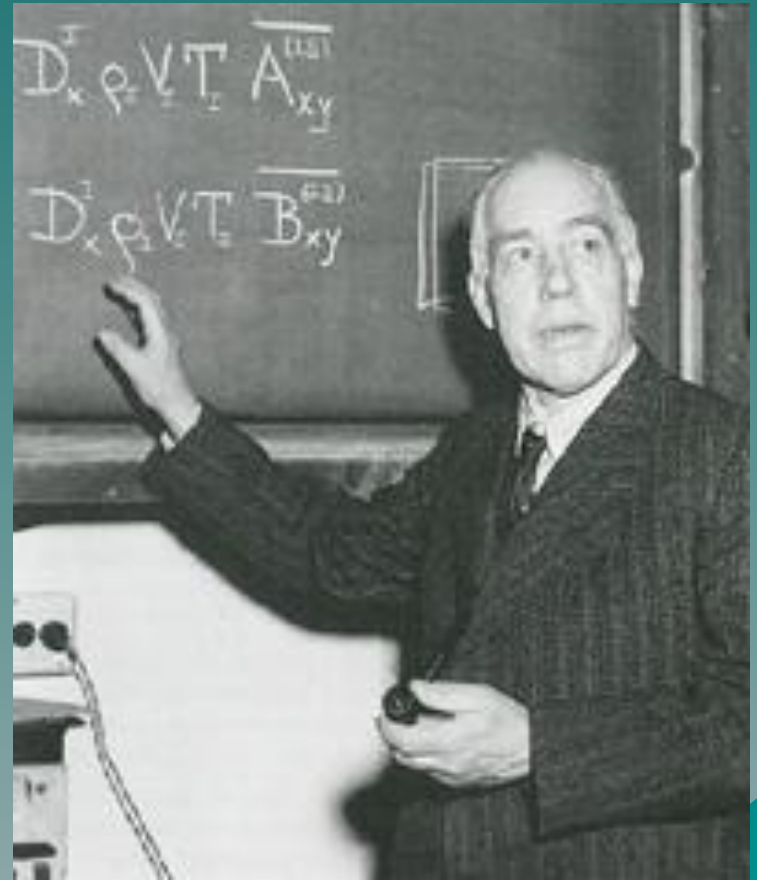


Нестабільність атома Резерфорда



Нільс Бор

Нільс Бор, один з основоположників сучасних уявлень про субатомний світ, творець першої квантово-механічної моделі будови атома. Фотографія зроблена в 1948 році в Принстонському університеті (США)



Квантові постулати Бора

Перший постулат Бора

(постулат стаціонарних станів):

існують стаціонарні стани атома, знаходячись у яких він не випромінює і не поглинає енергію.

Цим стаціонарним станам відповідають цілком визначені (стаціонарні) орбіти, по яким рухаються електрони.

Правило квантування орбіт Бора стверджує, що в стаціонарному стані атома електрон, рухаючись по коловій орбіті, повинен мати квантові значення моменту імпульсу, що задовольняють умові

$$L = mVr = \hbar n$$

де $(n=1, 2, 3, \dots)$ – **головне квантове число**, що нумерує орбіти електрона в теорії Бора. Стан з $n=1$ є **основним**, не збудженим станом атома. В основному стані атом може знаходитися нескінченно довго. Стани з $n>1$ - це збуджені стани атома. В таких станах атом може існувати обмежений час.

Квантові постулати Бора

Другий постулат Бора

(правило частот):

при переході атома з одного стаціонарного стану в інший випромінюється або поглинається один фотон (квант енергії).

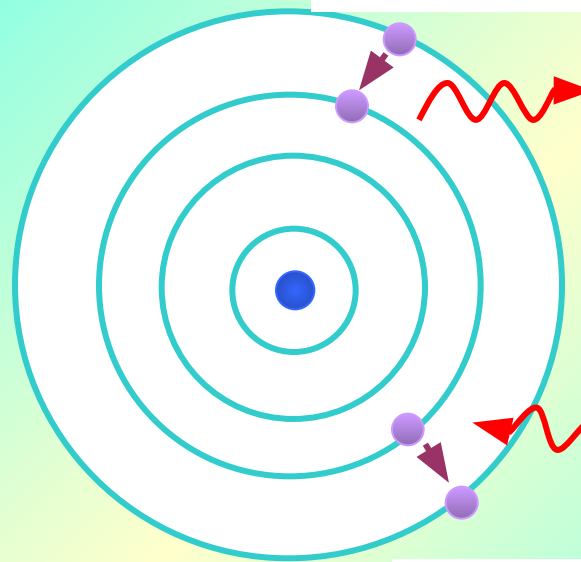
Випромінювання відбувається при переході атома зі стану з більшою енергією в стан з меншою енергією.

Поглинання фотонів супроводжується переходом атомів у стан з більшою енергією. Зміна енергії атома, пов'язана з випромінюванням або поглинанням фотона, пропорційна частоті випромінювання. Якщо - зміна енергії атома в результаті цих процесів, то

$$\Delta E = h\nu$$

АТОМ ВОДНЮ В ТЕОРІЇ БОРА

Електрон перескакує на більш низьку орбіту

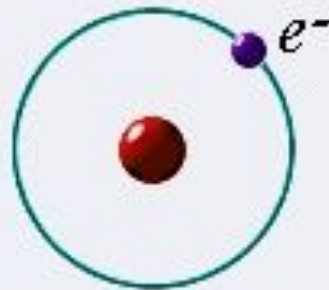


Випромінювання фотона

Поглинання фотона

Електрон перескакує на більш високу орбіту

Атом водню в теорії Бора



Виведення формули Бальмера з постулатів Бора

Електрон в атомі водню утримується силою Кулона:

$$**F = ke^2 / r^2**$$

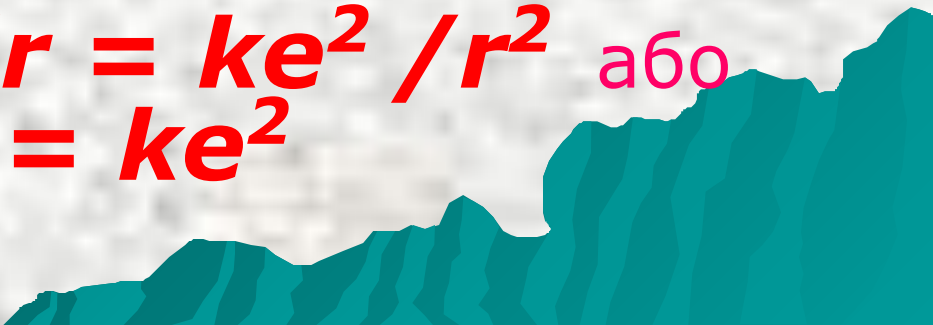
Ця сила надає електрону доцентрове прискорення:

$$**F = mV^2 / r**$$

З іншого боку, принцип квантування орбіт дає:

$$**mVr = n\hbar**$$

Тоді:

$$**mV^2 / r = ke^2 / r^2** \quad \text{або}$$
$$**mV^2 r = ke^2**$$


Виведення формули Бальмера з постулатів Бора

З цих рівнянь знайдемо швидкість електрона на стаціонарному рівні

$$V = ke^2 / n\hbar$$

r і радіус орбіти електрона

$$r = n^2\hbar^2 / mke^2$$

Згадаємо, що:

$$k = 1/4\pi\epsilon_0 \quad \text{і} \quad \hbar = h/2\pi$$

Енергія електрона в атомі водню дорівнює сумі кінетичної енергії і потенціальної енергії його взаємодії з ядром

$$W = W_k + W_p$$
$$W_k = mV^2/2; \quad W_p = -ke^2/r$$

Знак "-" відповідає притяганню між електроном і ядром. Тоді

$$W = mV^2/2 - ke^2/r.$$

Підставимо в це рівняння отримані раніше значення швидкості і радіуса.

Тоді для значення повної енергії електрона в атомі водню отримаємо

$$W = -mk^2e^4/2\pi^2\hbar^2n^2.$$

Енергія

$$W_i = mk^2e^4/2\pi^2\hbar^2$$

Називається енергією іонізації, тоді енергія атома на n -му енергетичному рівні

$$W = -W_i/n^2.$$

Згідно до другого постулату Бора:

$$\hbar\nu = -W_i \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right).$$

Таким чином, ми отримали
серіальну формулу, яка визначає
можливі спектральні лінії в
спектрі атома водню

$$\nu = R \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right),$$

де $R = W_i / \hbar$ - стала Рідберга.

Усі лінії спектра випромінювання атомів, які випромінюються при переході електронів з будь-якої орбіти на певну, називають **серією**.

Ці серії в спектрі атома водню отримали свої назви.

Для:

$m = 1$ - **серія Лаймана**, ($n = 2, 3, 4, \dots$) вона належить до ультрафіолетової частини спектра;

$m = 2$ - **серія Бальмера**, ($n = 3, 4, 5, \dots$) видима серія. Ця серія вивчається в даній роботі;

$m = 3$ - **серія Пашена**, ($n = 4, 5, 6, \dots$) - в близькій інфрачервоній області,

$m = 4$ - **серія Брэкета**, ($n = 5, 6, 7, \dots$) - в близькій ІЧ області.

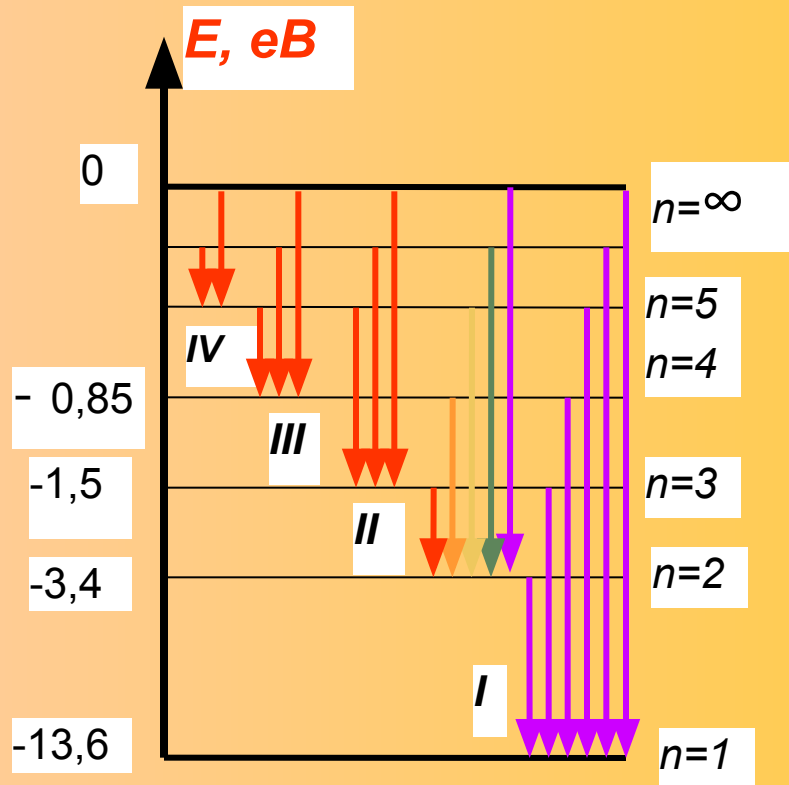
$m = 5$ - **серія Пфунда**, ($n = 6, 7, 8, \dots$) - в далекій ІЧ області.

Наведені серіальні закономірності є яскравим проявом квантових властивостей атомних систем.

Як приклад наведемо **формулу Бальмера** для серії Бальмера

$$\nu = R \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right),$$

Енергетичний спектр атома водню



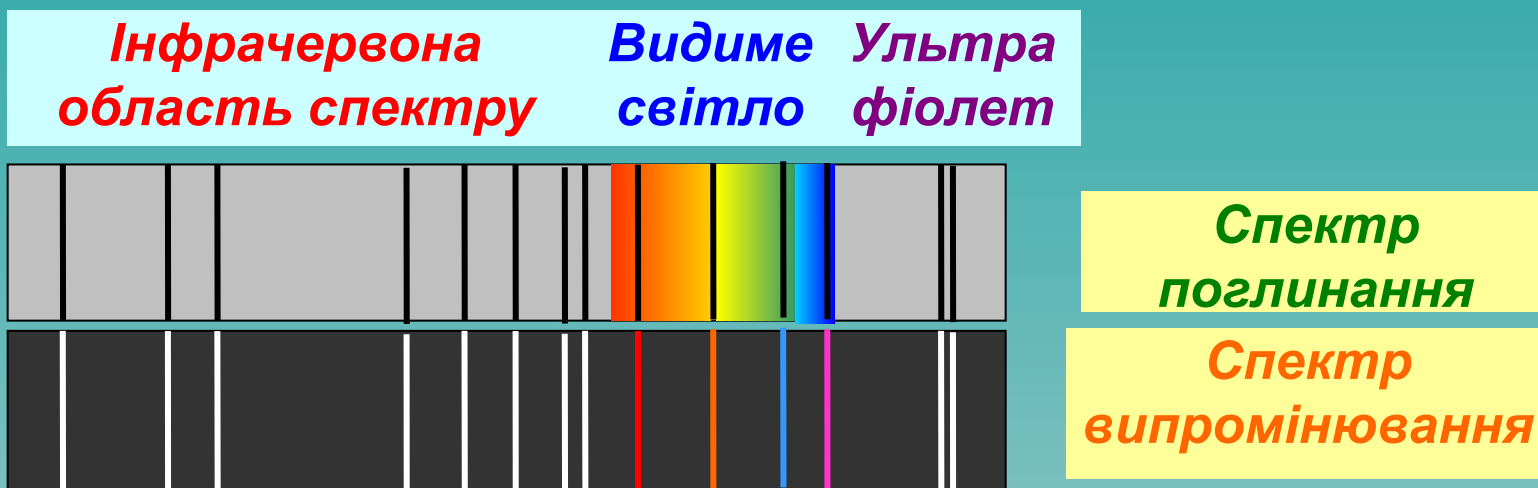
Спектр атому водню

- I** – серія Лаймана;
- II** – серія Бальмера;
- III** – серія Пашена;
- IV** – серія Брэкета;
- V** – серія Пфунда.

СПЕКТРАЛЬНИЙ АНАЛІЗ

Спектр (лат. (лат. spectrum від лат. Spectare дивитися) - сукупність значень та їх розподіл за певним параметром, значення якого може набувати спостережувана величина. Оскільки першими було отримано **оптичні спектри**, то найчастіше термін **спектр** використовується згідно з „історичним” значенням - **розподіл потоку випромінювання або частинок за довжинами хвиль або енергії.** Розрізняють наступні оптичні спектри **Суцільні, лінійчасті, смугасті.**

ЛІНІЙЧАСТИЙ СПЕКТР АТОМА ВОДНЮ



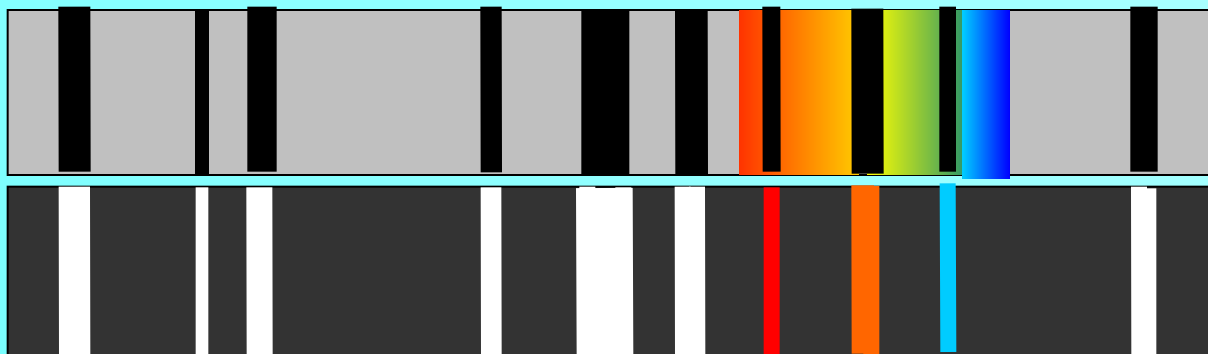
Лінійчасті спектри дають речовини в атомарному стані

СМУГАСТИЙ СПЕКТР

Інфрачервона область спектру

Видиме світло

Ультра фіолет



Спектр поглинання

Спектр випромінювання

Смугості спектри дають речовини в молекулярному стані

СУЦІЛЬНИЙ СПЕКТР

*Інфрачервона
частина спектру*

*Видиме
світло*

Ультрафіолет



*Спектр
поглинання*

*Спектр
випромінювання*

Суцільні спектри дають речовини в твердому стані або в стані високотемпературної плазми (зірки, Сонце – зірка)



Уїльям Воластон у 1802 р. спостерігав темні лінії у сонячному спектрі, але знехтував спостереженнями. У 1814 р. ці лінії незалежно виявив та докладно описав Фраунгофер, який вперше застосував для отримання спектра дифракційну решітку.

АТОМ ВОДНЮ В КВАНТОВІЙ МЕХАНІЦІ

Потенціальна енергія електрона в цьому атомі дорівнює:

$$U = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r}$$

де r - відстань електрона від ядра. Тоді рівняння Шредінгера має вигляд:

$$\Delta\psi + \frac{2m_e}{\hbar^2} \left(E + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r} \right) \psi = 0$$

Поле, в якому рухається електрон є центрально - симетричним. Тому доцільно взяти оператор Лапласа в сферичній системі координат.



Ервін Шредінгер - австрійський фізик, один з творців квантової механіки. Найважливішою заслугою Шредінгера є створення їм хвильової механіки (кінець 1925 — початок 1926): виходячи з гіпотези Л. де Бройля про хвилі матерії, він показав, що стаціонарні стани атомних систем можуть розглядатися як власні коливання хвильового поля, яке відповідає даній системі;

Шредінгер знайшов основне рівняння нерелятивістської квантової механіки (рівняння Шредінгера) та застосував його для вирішення окремих задач. Встановив зв'язок хвильової механіки з «матричною механікою» В. Гейзенберга. Розвинений Шредінгером математичний формалізм й уведена ним хвильова функція у з'явилися найбільш адекватним математичним апаратом квантової механіки і її застосувань. Нобелівська премія (1933). Іноземний член АН СРСР (1934).

Вирішення рівняння Шредінгера дозволяє отримати важливі результати. Виявляється, що стан атому можна визначити за допомогою набору квантових чисел:

- 1,** $n=1,2,3\dots$ - головне квантове число нумерує енергетичні стани атому за збільшенням енергії, причому стан з $n=1$ називається **основним станом**. В основному стані атом може знаходитися необмежений час, це стан з мінімальною потенціальною енергією. Стани з $n>1$ - **збуджені стани**, в таких станах атом може знаходитись обмежений час (за звичай), потім атом має перейти на нижчий рівень.
- ◆ **Рівняння Шредінгера** має вирішення а) за будь-яких додатних значень енергії (електрон пролітає поблизу ядра і віддаляється у нескінченність); б) за дискретних від'ємних значень енергії (електрон пов'язаний з атомом):

$$E_n = - \left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \frac{m_e e^4}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2}$$

2. Азимутальне квантове число l визначає можливі значення для моменту імпульса електрона в атомі. l набуває значень

$$l = 0; 1; 2; \dots (n - 1)$$

Момент імпульсу електрона квантується

$$L_l = \sqrt{l(l + 1)} \hbar$$

3. Магнітне квантове число m визначає можливі квантові значення магнітного моменту. При заданому азимутальному квантовому числі, магнітне може набувати значень:

$$m = -l, -l + 1, -l + 2, \dots - 1, 0, +1, \dots l - 1, l$$

Орбітальний момент імпульсу електрону та пропорційний йому магнітний момент орієнтовані перпендикулярно до площини орбіти електрона і напрямлені в протилежні боки:

$$P_m = -\gamma_l L_l = \frac{eL_l}{(2m_e)}$$

$$\gamma_l = \frac{e}{(2m_e)}$$

зростає лінійно з відстанню

Виявляється, що площина орбіти електрона не може бути орієнтована довільно відносно зовнішнього магнітного поля, тобто існує просторове квантування:

Момент імпульсу електрону може мати тільки такі орієнтації, при яких проекція вектора моменту імпульсу електрона на напрямок зовнішнього магнітного поля з набуває квантованих значень кратних \hbar

$$L_{lz} = m\hbar$$

4. Спін. У 1921р. Штерном і Герлахом були проведені досліді по вимірюванню магнітних моментів атомів різних хімічних елементів. Для цього взяли елементи першої групи таблиці Менделєєва, у яких всі, крім одного, орбітальні механічні (і магнітні) моменти взаємно компенсуються. Вони виявили, що проекція магнітного моменту атома на напрямок поля є кратним магнетону Бора:

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e} = 9,274 \cdot 10^{-24} \frac{\text{Дж}}{\text{Тл}}$$

Для пояснення цього результату необхідно припустити, що електрон, крім орбітального моменту імпульсу і відповідного йому магнітного моменту має **власний механічний момент імпульсу**, який називається **спіном** електрона і відповідний йому власний магнітний момент.

Спін електрона та інших елементарних частинок є особливою властивістю цих частинок: подібно тому, що частинки мають масу, заряд, вони ще мають і спін.

Із загальних висновків квантової механіки випливає, що власний момент імпульсу електрона квантується:

$$L_s \sqrt{s(s+1)}$$

де s - спінове квантове число (спін). Спінове квантове число не є цілим, для електрона воно дорівнює:

$$s = \pm \frac{1}{2}$$

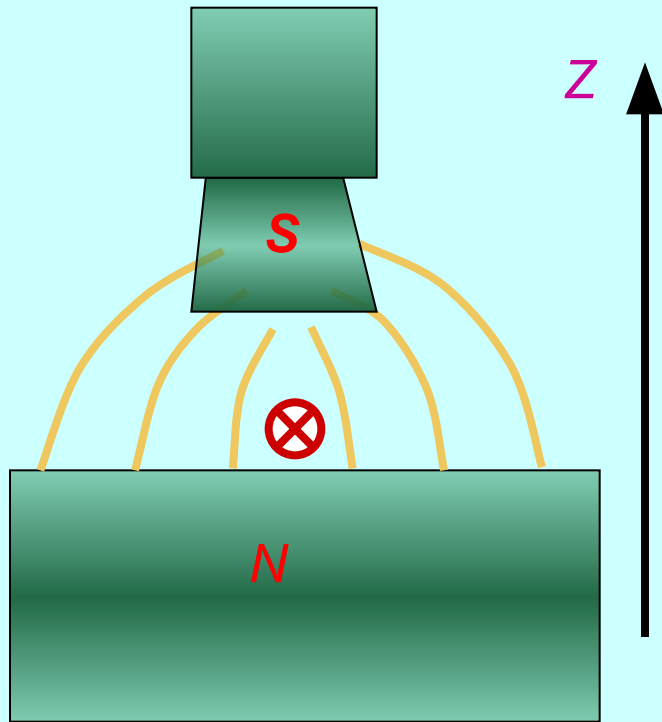
Припущення про існування спіну було висунуто у 1925р. Гаудсмітом та Уленбеком. Вони надали спіну електрона наочне тлумачення, яке полягає у тому, що спін розглядається як момент імпульсу електрону, пов'язаний з обертанням електрону – зарядженої кульки - навколо своєї вісі. Правда, коли строго підрахувати кутову швидкість такого обертання, виявиться, що швидкість точок на поверхні сфери, радіусом буде у 200 разів більша за швидкість світла у вакуумі!



**Отто Штерн
(1888 – 1969)
Німецько-
американський
фізик.**

В 1920 доцент, потім професор університету у Франкфурті-на-Майні, з 1922 професор університету в Ростоці. В 1923—33 професор и директор Фізико-хімічної лабораторії університету в Гамбурзі. В 1933 емігрував у США, професор Технологічного інституту Карнегі в Пітсбурзі (1933—45). Основні праці з ядерної фізики, квантової фізики, термодинаміки. В 1920 вперше безпосередньо виміряв швидкості молекул (дослід Штерна). Вказав на можливість (1921) експериментальної перевірки просторового квантування магнітного моменту атома і здійснив її спільно з німецьким фізиком В. Герлахом (Дослід Штерна – Герлаха). Спільно з німецьким фізиком Р. Фрішем вперше (1933) визначив магнітний момент протона в молекулі H_2 . Штерн і його співробітники розвинули метод молекулярних і атомних пучків. Нобелівська премія (1943).

Дослід Штерна – Герлаха



Прилад Штерна - Герлаха

- ◆ Магнітне поле створюється між двома магнітними полюсами, один з яких плоский, а інший – дуже гострий. Внаслідок напруженість магнітного поля зростає біля гострого полюса та зменшується біля плоского. Частинки проходять між магнітними полюсами перпендикулярно до площини рисунка, в місці, відзначеному “хрестиком”.

Для самостійного вивчення

АТОМ ВОДНЮ В КВАНТОВІЙ МЕХАНІЦІ

Стан електрону, який має різні значення орбітального квантового числа, в атомній фізиці позначають наступним способом

$(l = 0)$ s - стан;

$(l = 1)$ p - стан;

$(l = 2)$ d - стан;

$(l = 3)$ f - стан, та т.д.

ОСНОВНИЙ СТАН АТОМУ ВОДНЮ

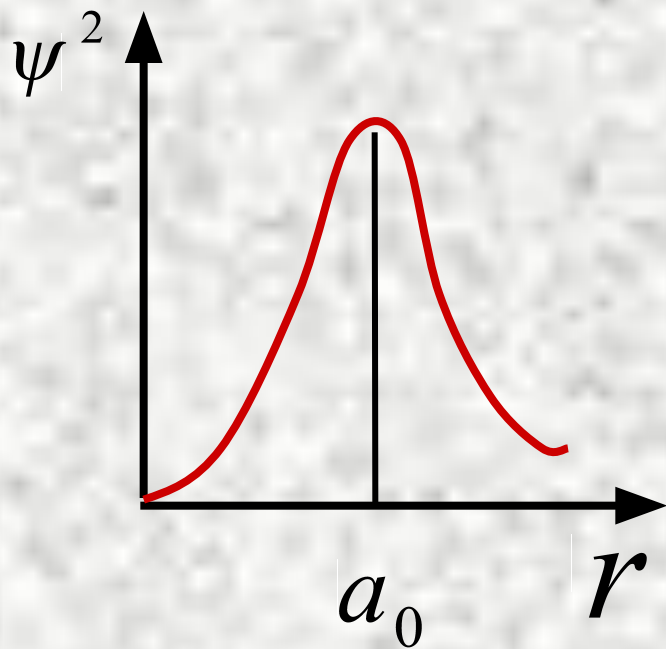
- ◆ Розглянемо більш детально s - стан електрону в атомі водню при $n=1$. Такий стан називається **основним**. Хвильова функція електрону в цьому стані є функцією тільки r . Це означає, що вірогідність виявити електрон в певній точці атому залежить тільки від r . Вирішення рівняння Шредінгера для воднево подібного атому приводить до енергії атому в основному стані:

$$E_1 = -\frac{m_e e^4}{(8h^2 \epsilon_0^2)}$$

як і в теорії Бора. Виявляється, що борівські орбіти електрону є геометричним місцем точок, в яких з найбільшою вірогідністю можна виявити електрон.

ОСНОВНИЙ СТАН АТОМУ ВОДНЮ

На рисунку зображена залежність вірогідності виявити електрон в стані з $n=1$ на різних відстанях від атому. Вона відмінна від нуля в точках



$$r \neq a_0$$

Вольфганг Ернст Паулі



1900 – 1958

Австрійсько – швейцарський фізик – теоретик. Його наукові роботи відносяться до численних розділів сучасної теоретичної фізики. Брав участь у розвитку квантової механіки, квантової електродинаміки, теорії відносності і т.п. В 1924–25 роках сформулював один з найважливіших принципів сучасної теоретичної фізики – принцип Паулі, за що отримав **Нобелівську премію** з фізики (1945 р.). У 1931 р. висунув гіпотезу про існування нейтрино.

ПРИНЦИП ПАУЛІ

(принцип виключення)

- ◆ У 1925 р. Паулі встановив квантово-механічний закон – **принцип Паулі** (принцип виключення):
- ◆ **В будь-якому атомі не може бути двох електронів, які б знаходилися в однакових стаціонарних станах, що визначаються набором чотирьох квантових чисел: головного n , орбітального l , магнітного m , спінового s .**
- ◆ Максимальне число електронів, які знаходяться в станах, що визначаються набором трьох квантових чисел n, l, m , тобто відрізняються тільки орієнтацією спінів електронів дорівнює 2, оскільки спін електрону має тільки дві можливі орієнтації

$$Z(n, l, m) = 2$$

ПРИНЦИП ПАУЛІ

(принцип виключення)

- ◆ Тепер визначимо максимальне число електронів, що знаходяться у станах, які відповідають двом квантовим числам n і l . Вектор моменту імпульсу може мати $(2l+1)$ різних орієнтацій, то

$$Z(n, l) = 2(2l + 1)$$

Знайдемо максимальне число електронів, які знаходяться в станах з певним значенням головного квантового числа .

Оскільки l при заданому n змінюється від 0 до $n-1$ то максимальне число електронів можна визначити за формулою:

$$Z(n) = \sum_{l=0}^{l=n-1} 2(2l + 1) = [2(n - 1) + 2]n = 2n^2$$

ПРИНЦИП ПАУЛІ

n	Шар	<i>Кількість електронів у станах</i>					Максимальна кількість електронів
		s <i>($l=0$)</i>	p <i>($l=1$)</i>	d <i>($l=2$)</i>	f <i>($l=3$)</i>	g <i>($l=4$)</i>	
1	K	2	-	-	-	-	2
2	L	2	6	-	-	-	8
3	M	2	6	10	-	-	18
4	N	2	6	10	14	-	32
5	O	2	6	10	14	18	50

Періодична система хімічних елементів Д.І. Менделєєва

P	Групи елементів							
	I	II	III	IV	V	VI	VII	VIII
1	1H водень							2He <u>гелій</u>
2	3Li літій	4Be берилій	5B бор	6C вуглець	7N азот	8O кисень	9F фтор	10Ne неон

Теорія періодичної системи

базується на наступних положеннях:

- 1 порядковий номер хімічного елементу дорівнює загальному числу електронів в атомі даного елементу;
- 2 стан електронів в атомі визначається набором їх квантових чисел . Розподіл електронів за енергетичними станами має задовольняти принципу мінімуму потенціальної енергії: із збільшенням числа електронів, кожний наступний електрон має зайняти можливий стан з мінімальною енергією;
- 3 заповнення електронами енергетичних станів в атомі має відбуватися відповідно до принципу Паулі.