

Лекция № 2

Электронные конфигурации атомов.

Периодический Закон.

Периодическая система Д.И. Менделеева

Химическая связь

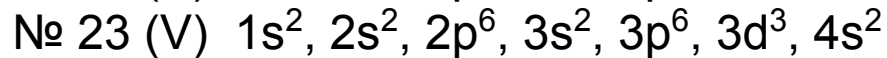
Распределение электронов по энергетическим уровням и подуровням изображают в виде **электронных формул** и энергетических ячеек так называемых **графических электронных формул**.



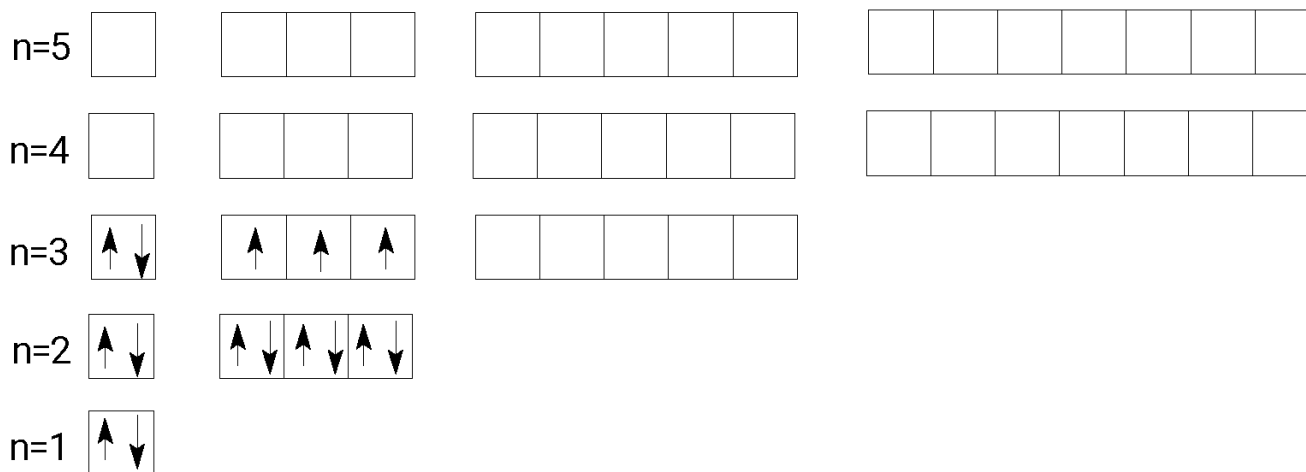
В графических электронных формулах

каждая орбиталь обозначается клеткой, стрелка – электрон, направление стрелки – направление спина, свободная клетка – свободная орбиталь.

Например, электронные формулы атомов элементов № 15 и № 23 имеют вид:



Для атома фосфора электронно-графическая схема:



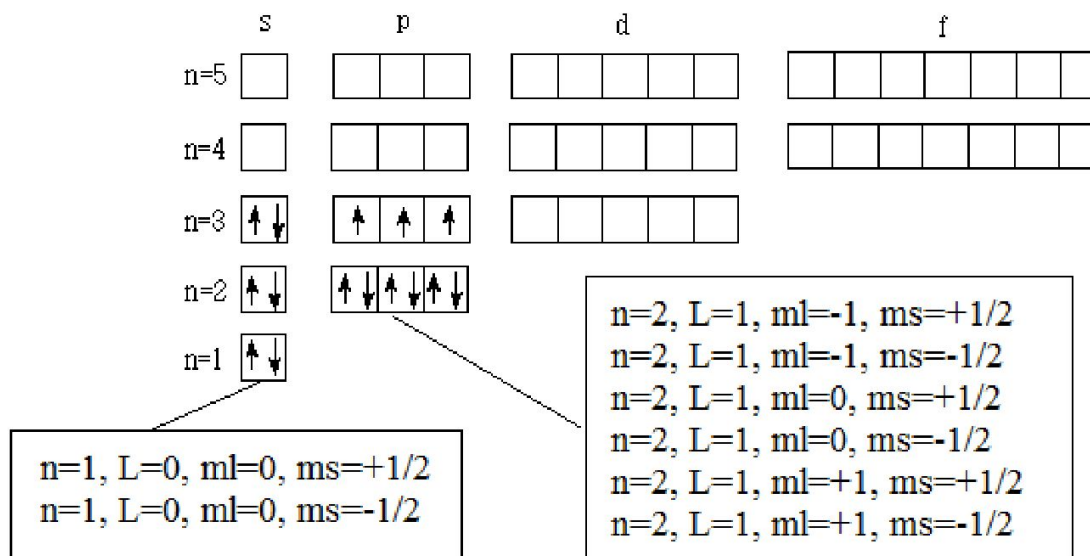
ПРАВИЛА ЗАПОЛНЕНИЯ УРОВНЕЙ И ПОДУРОВНЕЙ

1. Принцип Паули

В атоме не существует двух электронов с одинаковым набором квантовых чисел. Максимальное число электронов на энергетическом уровне определяется как $N = 2n^2$, а на подуровне – как $2(2L+1)$

Следствие:

на каждой орбитали может находиться не более 2-х электронов ($\downarrow\uparrow$).

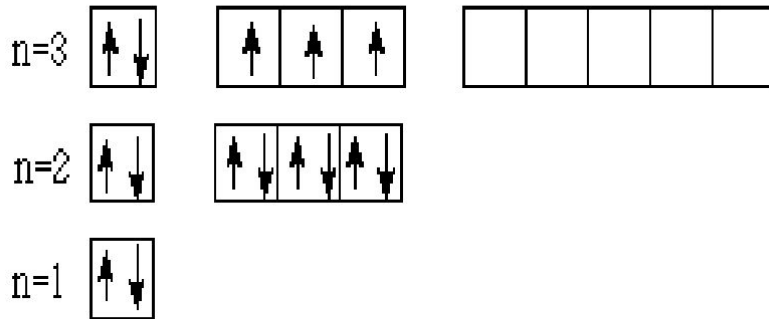


ПРАВИЛА ЗАПОЛНЕНИЯ УРОВНЕЙ И ПОДУРОВНЕЙ

2. Правило Хунда

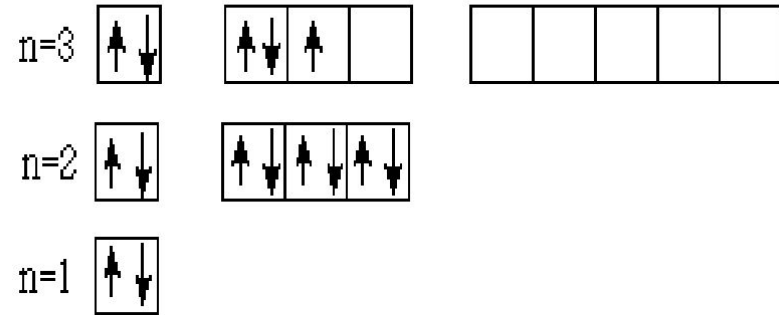
в пределах одного подуровня электроны располагаются по орбиталям таким образом, чтобы их суммарный спин был максимальным

$$+1/2+1/2+1/2=1,5$$



правильно

$$+1/2-1/2+1/2=1,0$$



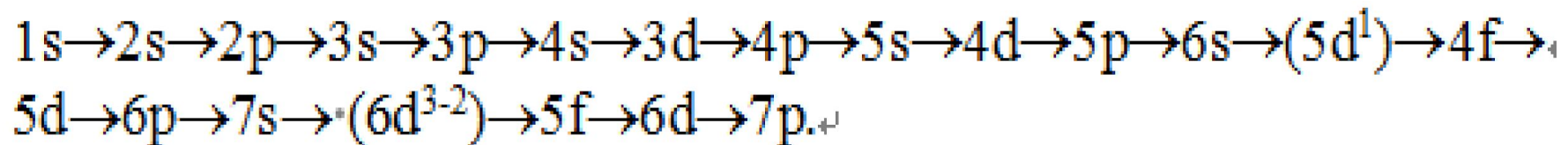
неправильно

ПРАВИЛА ЗАПОЛНЕНИЯ УРОВНЕЙ И ПОДУРОВНЕЙ

3. Принцип наименьшей энергии

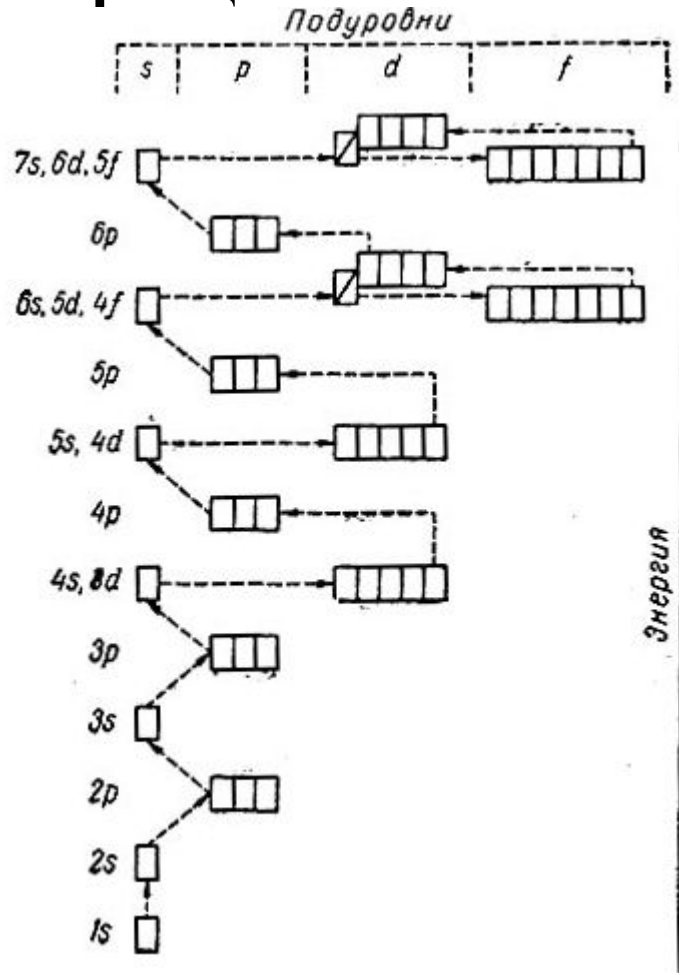
электроны заполняют орбитали в порядке возрастания энергии орбиталей.

Принцип реализован в правиле Клечковского. Клечковский показал, что из двух данных состояний меньшей энергии электрона отвечает состояние, которое характеризуется меньшей суммой $n+L$. Например, из двух состояний **3d** и **4s** – состояние **4s** отвечает меньшей энергии электрона в атоме, т. к. для **4s** ($4+0$) = **4** меньше чем для **3d** ($3+2=5$). В случае если для двух состояний одинакова, меньшей энергии отвечает состояние, характеризующееся меньшим значением **n**. В соответствии с этим заполнение электронами орбиталей происходит согласно ряду Клечковского:

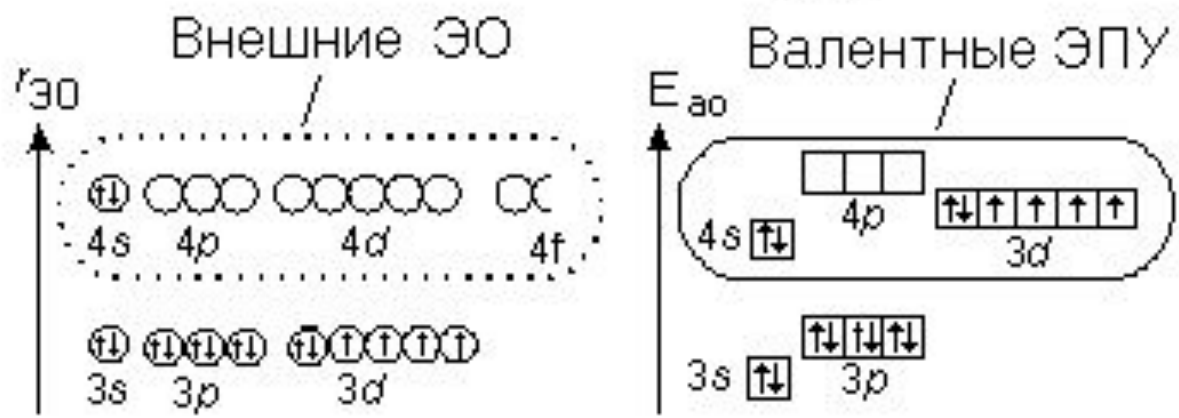
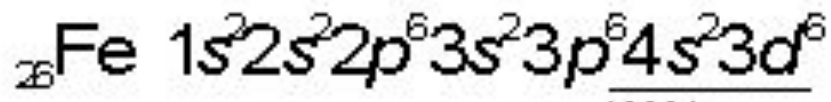
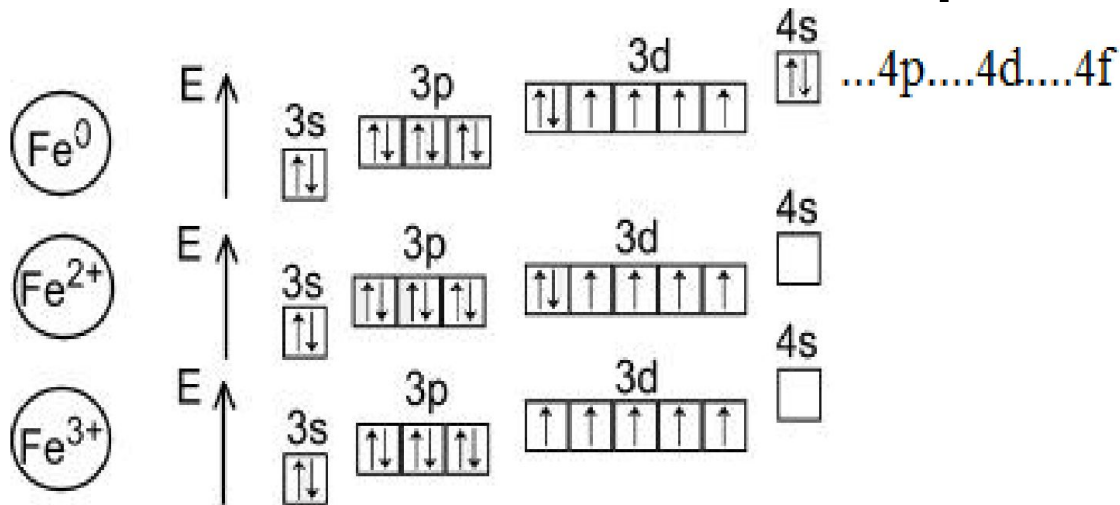


ПРАВИЛА ЗАПОЛНЕНИЯ УРОВНЕЙ И ПОДУРОВНЕЙ

3. Принцип наименьшей энергии



Валентные и внешние электроны



Периодичность в изменении основных атомных характеристик

«свойства химических элементов (т.е. свойства и форма образуемых ими соединений) находятся в периодической зависимости от заряда ядра атомов химических элементов»

ПЕРИОДИЧЕСКАЯ СИСТЕМА ХИМИЧЕСКИХ ЭЛЕМЕНТОВ Д. И. МЕНДЕЛЕЕВА

ПЕРИОДЫ	Г Р У П П Ы Э Л Е М Е Н Т О В																	
	A I	II A	III A	IV A	V A	VI A	VII A	VIII		IX		X		XI		XII		
1	(H)																	
2	Li Литий	Be Бериллий	B Бор	C Углерод	N Азот	O Кислород	F Фтор	Ne Неон	Ar Аргон		Kr Криптон		Xe Ксенон		Rn Радон			
3	Na Натрий	Mg Магний	Al Алюминий	Si Кремний	P Фосфор	S Сера	Cl Хлор	Ar Аргон	Kr Криптон		Xe Ксенон		Rn Радон					
4	K Калий	Ca Кальций	Sc Скандий	Ti Титан	V Ванадий	Cr Хром	Mn Марганец	Fe Железо	Co Кобальт	Ni Никель	Kr Криптон		Xe Ксенон		Rn Радон			
5	Rb Рубидий	Sr Стронций	Y Иттрий	Zr Цирконий	Nb Нобий	Mo Молибден	Tc Технеций	Ru Рутений	Rh Родий	Pd Палладий	Kr Криптон		Xe Ксенон		Rn Радон			
6	Cs Цезий	Ba Барий	La* Лантан	Hf Гафний	Ta Тантал	W Вольфрам	Re Рений	Os Осмий	Ir Иридий	Pt Платина	Kr Криптон		Xe Ксенон		Rn Радон			
7	Fr Франций	Ra Радий	Ac** Актиний	Rf Рифторбий	Db Дубний	Sg Сгангуй	Bh Борий	Hs Хассий	Mt Миттербий	Kr Криптон		Xe Ксенон		Rn Радон				
	R ₂ O		RO	R ₂ O ₃	RO ₂	R ₂ O ₅	RO ₃	R ₂ O ₇	RO ₄									
ЛАНТАНОИДЫ*	Ce Цезий	Pr Прометий	Nd Неодим	Pm Прометий	Sm Самарий	Eu Европий	Gd Гадолиний	Tb Тербий	Dy Диспрозий	Ho Гольмий	Er Ербий	Tm Термий	Yb Йттербий	Lu Лютеций				
АКТИНОИДЫ**	Th Торий	Pa Пакорий	U Уран	Np Нептуний	Pu Плутоний	Am Америций	Cm Кюрий	Bk Берклий	Cf Калيفорний	Es Эйнштейний	Fm Фермий	Md Менделеев	No Нобелий	Lr Лоренций				

Водород и гелий.

Водород H (1e): Начинается заполнение первого электронного слоя, оболочка – 1s.



У гелия He (2e) на эту оболочку приходит второй электрон, и она полностью заполнена:

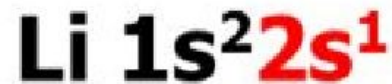


**ПЕРВЫЙ ЭЛЕКТРОННЫЙ СЛОЙ
ЗАПОЛНЕН.**

Литий, бериллий, бор

Переходим к **литу** (**3e**). У него начинается заполняться **второй слой**, у лития 2 электрона на первом слое и 1 электрон на втором.

Второй слой тоже начинается с **s-оболочки**:



У **бериллия** (**4e**) на этот **s-подуровень** приходит второй электрон.

Затем у **бора** (**5e**) начинается заполнение следующего подуровня второго слоя: **2p-подуровня**:



Углерод – неон.

У следующих за бором пяти атомов продолжается заполнение **2p-оболочки**, вплоть до **неона (10e)**:



**ВТОРОЙ ЭЛЕКТРОННЫЙ УРОВЕНЬ
ПОЛНОСТЬЮ ЗАВЕРШЕН.**

Третий период

Начинается третий период – сначала происходит заполнение **3s-оболочки** у натрия (**11e**) и магния (**12e**) (это s-элементы), а потом заполняется **3p-оболочка** у шести следующих p-элементов: от алюминия (**13e**) до аргона (**18 e**).

Na $1s^2 2s^2 2s^6 3s^1$

Mg $1s^2 2s^2 2s^6 3s^2$

Al $1s^2 2s^2 2s^6 3s^2 3p^1$

Si $1s^2 2s^2 2s^6 3s^2 3p^2$

P $1s^2 2s^2 2s^6 3s^2 3p^3$

S $1s^2 2s^2 2s^6 3s^2 3p^4$

Cl $1s^2 2s^2 2s^6 3s^2 3p^5$

Ar $1s^2 2s^2 2s^6 3s^2 3p^6$

У аргона - инертного газа на внешнем слое 8 электронов.

При этом третий электронный уровень ещё заполнен НЕ ДО КОНЦА: в нём есть ещё 3d-оболочка (подуровень).

Четвертый период.

Атом № 19 – калий является первым элементом 4 периода, у него идёт заполнение $4s$ - оболочки (подуровня).

Калий - это s -элемент.

3d-подуровень пока остаётся незаполненным:

$K 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 (3d^0) 4s^1$
(пустую орбиталь обычно не пишут)

Кальций и скандий.

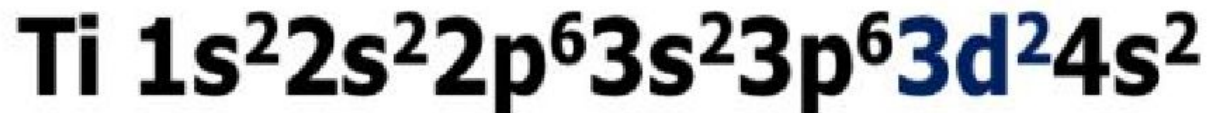
- 4s-оболочка заполняется и у **кальция - элемента № 20**. Он тоже **s-элемент**:



И вот **ТОЛЬКО** у следующих **10 элементов (от скандия до цинка)** происходит заполнение **3d-оболочки** (подуровня). Это **d-элементы**.



Титан и ванадий.



У титана 2 электрона на **3d-оболочке**, и 2e на 4s.

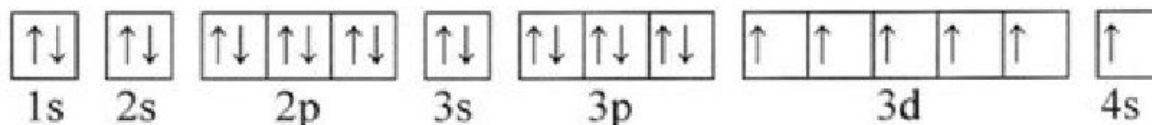


У ванадия на **3d-оболочке** 3 электрона, на 4s - 2 электрона.

Хром – провал электрона!

Казалось бы, у хрома должно получиться: **Cr 3d⁴4s²**

Однако у хрома происходит переход одного электрона с s-оболочки на d-оболочку:



Это явление называется ПРОВАЛ ЭЛЕКТРОНА, причина такого явления - более выгодная по энергии полузаполненная d-оболочка.

Соответственно, хром имеет 6 неспаренных электронов

Марганец -никель

У марганца (№25) снова происходит "возвращение" электрона на **4s-подуровень**:



У атомов с №26 (железо) до № 28 (никель) происходит дальнейшее заполнение **3d-оболочки**.

Медь – провал электрона!

У никеля на **d-оболочке** 8 электронов, на **4s** - 2 электрона. Казалось бы, что у меди должно получиться: **Cu ... 3d⁹4s²**

Однако у меди вновь происходит переход одного электрона с s-оболочки на d-оболочку:



Это снова **ПРОВАЛ ЭЛЕКТРОНА**, причина которого - более выгодная по энергии полностью заполненная d-оболочка.

Цинк

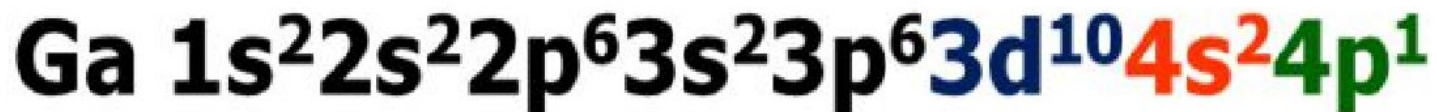
Цинк завершает d-элементы 4 периода:



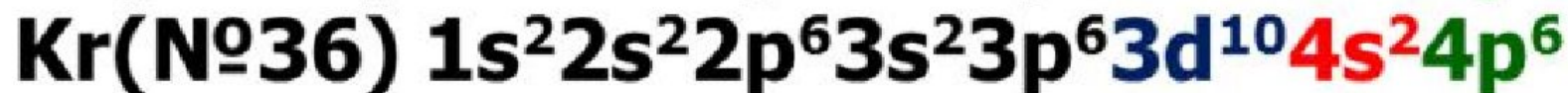
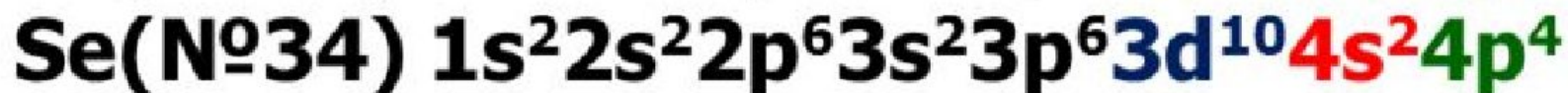
**ТРЕТИЙ ЭЛЕКТРОННЫЙ УРОВЕНЬ
ЗАВЕРШЕН – на нем теперь 18
электронов.**

Галлий

Со следующего элемента 4 периода – **галлия (№31)** вновь начинается заполнение **внешнего (четвертого) электронного слоя**, теперь уже **4p-оболочки**.



р-элементы четвертого периода



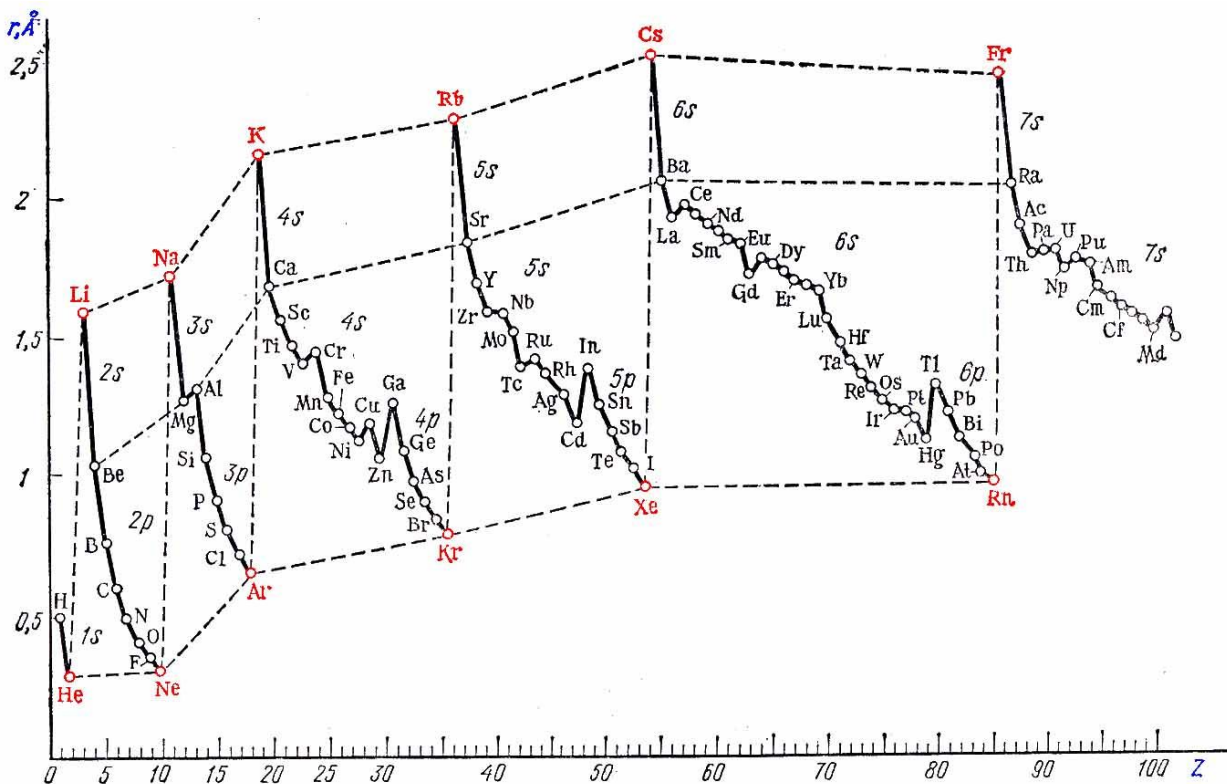
Таким образом, мы научились составлять электронные формулы атомов первых 4 периодов.

ПЕРИОД	Г Р У П П Ы Э Л Е М Е Н Т О В																																	
	IA	IIA	IIIB	С Е М Е Й С Т В А										IVB	VB	VIB	VIB	VIIIB	IB	IVB	IIIA	IVA	VA	VIA	VIA	VIA								
1																				1	2													
																				H	He													
2	3	4																	5	6	7	8	9	10										
	Li	Be																	B	C	N	O	F	Ne										
3	11	12																	13	14	15	16	17	18										
	Na	Mg																	Al	Si	P	S	Cl	Ar										
4	19	20	21																	22	23	24	25	26	27	28	29	30	31	32	33	34	35	36
	K	Ca	Sc																	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
5	37	38	39																	40	41	42	43	44	45	46	47	48	49	50	51	52	53	54
	Rb	Sr	Y																	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
6	55	56	57	58	59	60	61	62	63	64	65	66	67	68	69	70	71	72	73	74	75	76	77	78	79	80	81	82	83	84	85	86		
	Cs	Ba	La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn		
7	87	88	89	90	91	92	93	94	95	96	97	98	99	100	101	102	103	104	105	106	107	108	109	110	111	112	113	114	115	116	117	118		
	Fr	Ra	Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	(No)	(Lr)	Ku																
	s^1	s^2	d^1	f^2	f^3	f^4	f^5	f^6	f^7	f^7d^1	f^8	f^{10}	f^{11}	f^{12}	f^{13}	f^{14}	f^4d^1	d^2	d^3	d^4	d^5	d^6	d^7	d^8	d^9	d^{10}	p^1	p^2	p^3	p^4	p^5	p^6		
	s		d	f														d										p						

Размеры атомов и ионов

эффективный радиус атома, за который принимается половина расстояния между атомами, находящимися на минимальном расстоянии друг от друга. $r=L / 2$

Сu $L=2,56 \text{ \AA}$ -межядерное расстояние в кристаллах меди, тогда радиус атома Сu=1,28.



Зависимость орбитальных радиусов атомов от порядкового номера элемента.

Энергия ионизации

Как потеря, так и присоединение атомами электронов сопровождается энергетическим эффектом. Количество энергии, которое необходимо затратить для отрыва электрона от атома и удаления его из сферы влияния ядра, называется **энергией ионизации**

Энергия сродства к электрону

Атомы не только могут отдавать электроны, но и присоединять их. Энергия, выделяющаяся при присоединении электрона к свободному атому, называется **сродством атома к электрону** (E).

Электроотрицательность

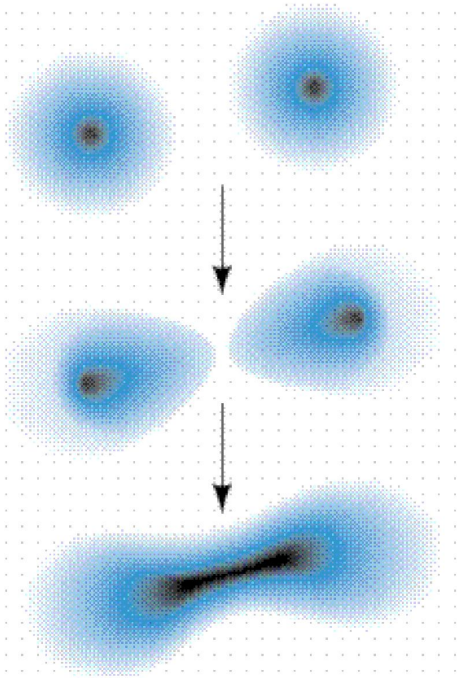
Для сравнительной оценки этой способности присоединения электрона введена характеристика, названная **электроотрицательностью** (ЭО)

Химическая связь

Сильные химические взаимодействия, т. е. ядерноэлектронные взаимодействия в молекуле (кристалле), которые обеспечивают устойчивость молекулы (кристалла) как единого целого, описываются словами: «**химическая связь**».

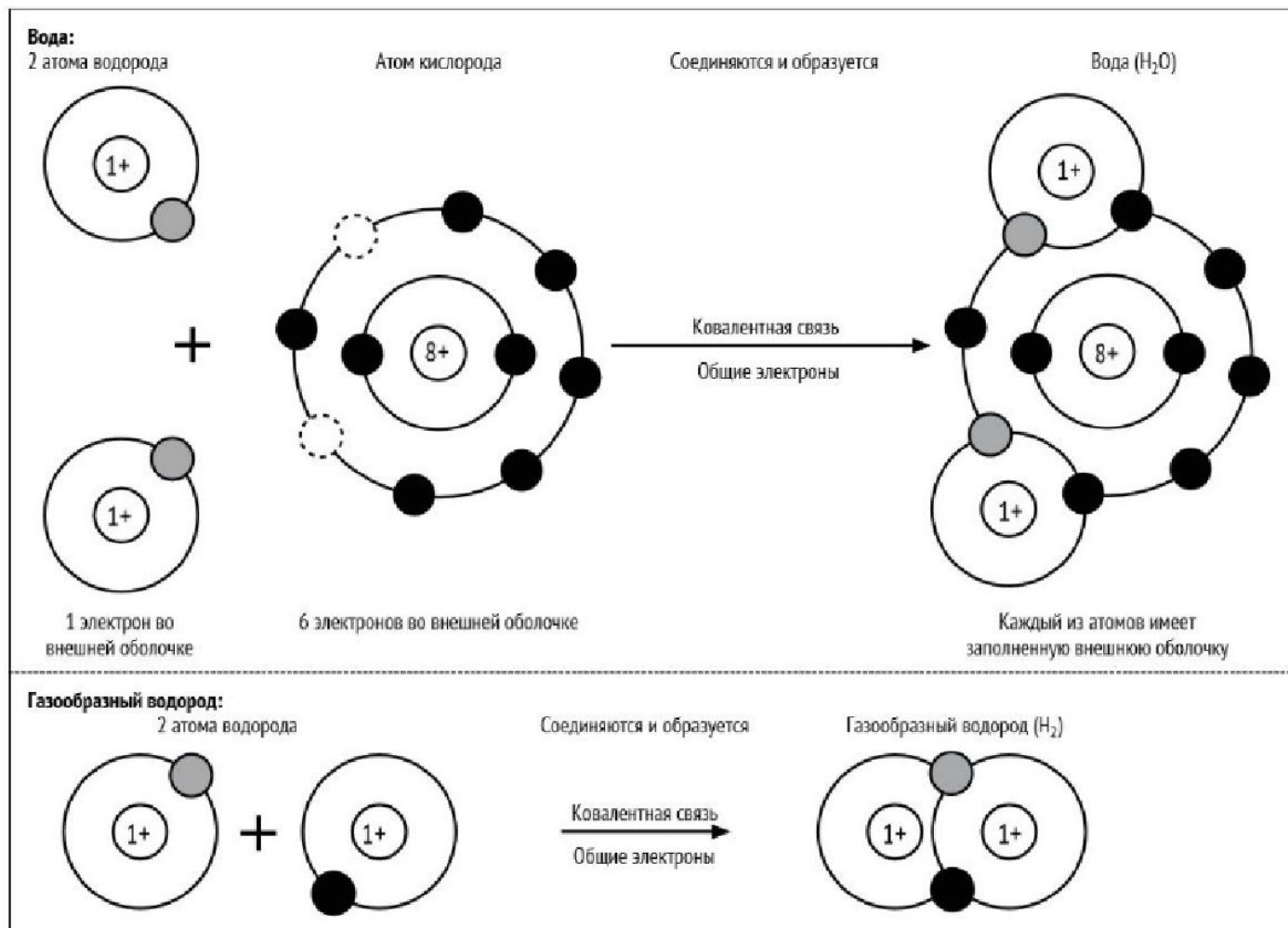
Результат взаимодействия - многоатомные частицы.

Молекула - мельчайшая частица вещества, сохраняющая его химические свойства, способная к химическим превращениям. Молекула - устойчивая электронейтральная система, состоящая из нескольких атомов.

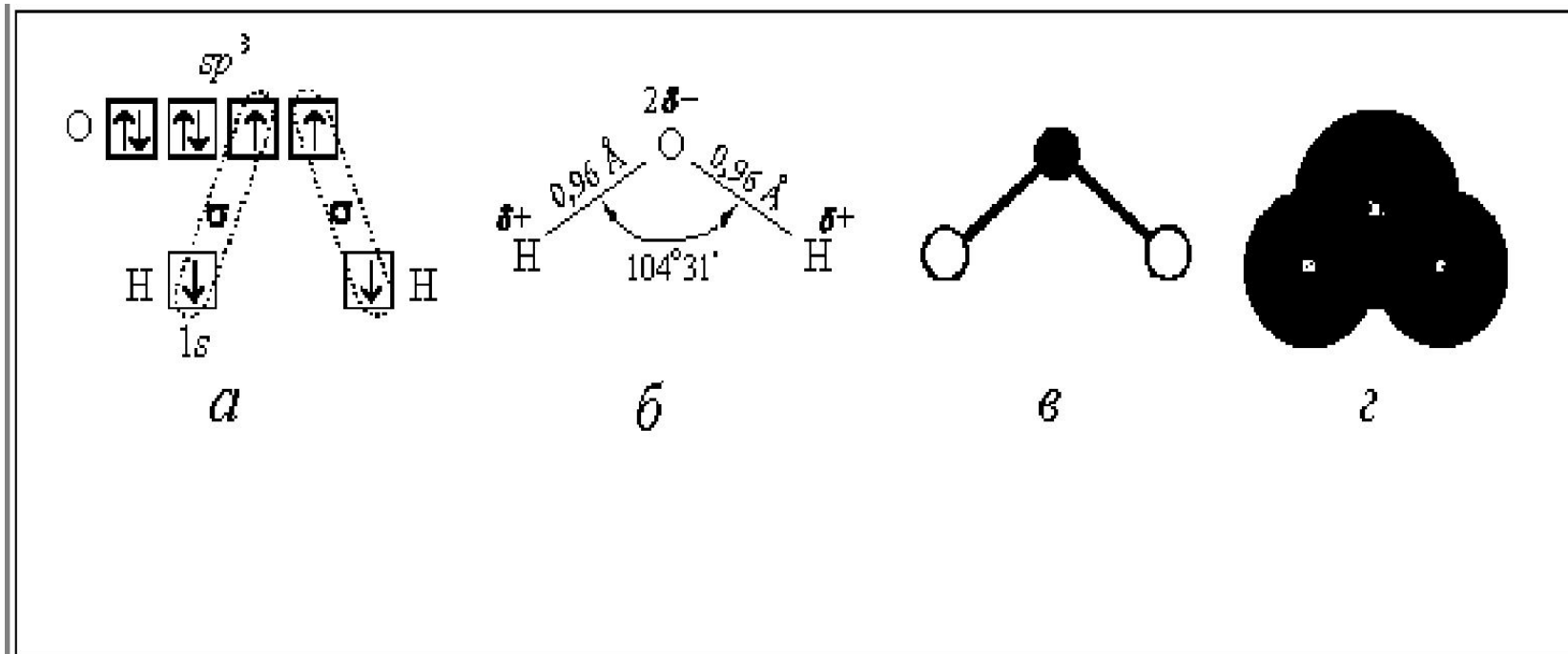


В настоящее время различают ковалентную, ионную и металлическую связь.

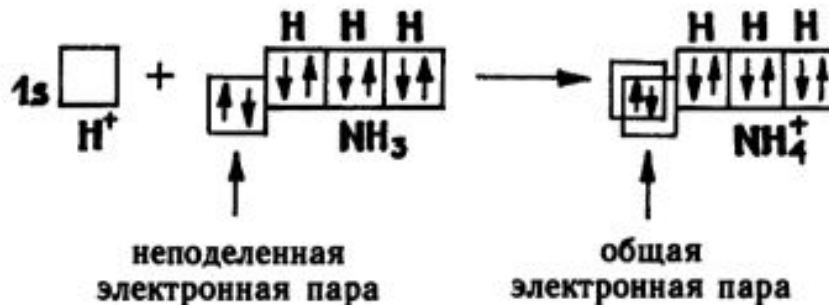
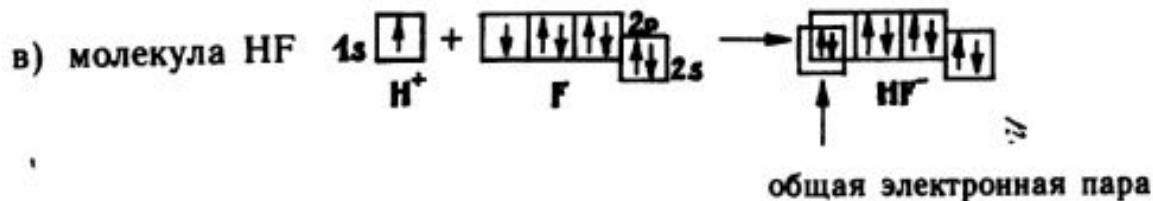
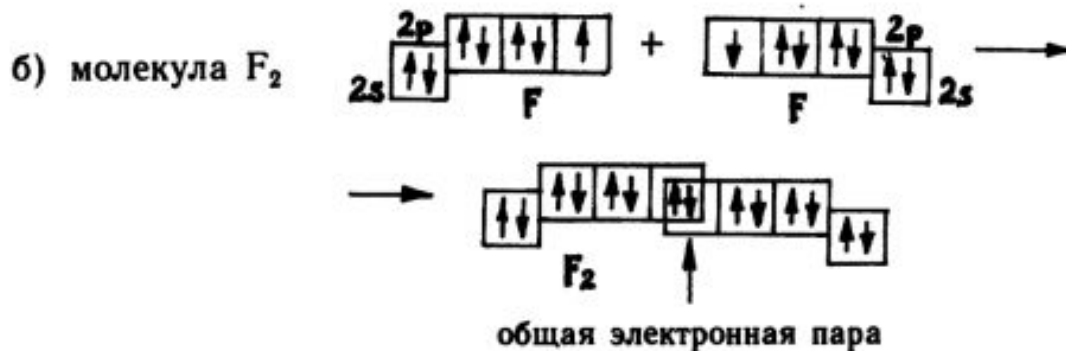
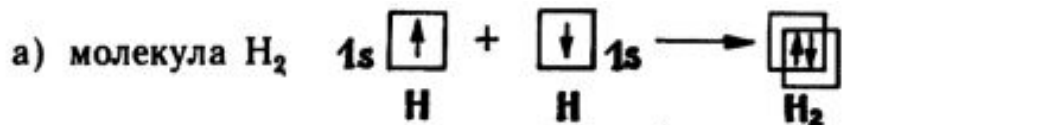
К о в а л е н т н а я с в я з ь -связь, образованная электронами, принадлежащими обоим атомам, образующим частицу.



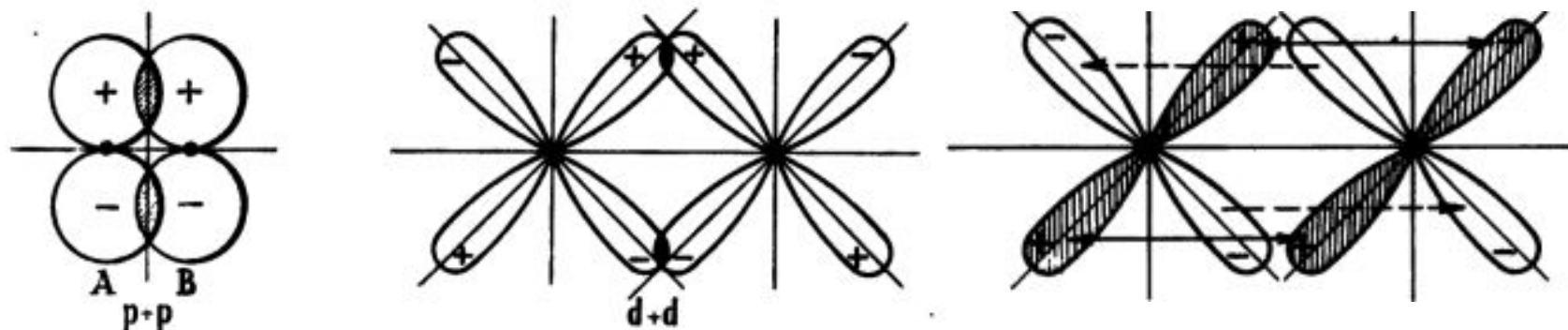
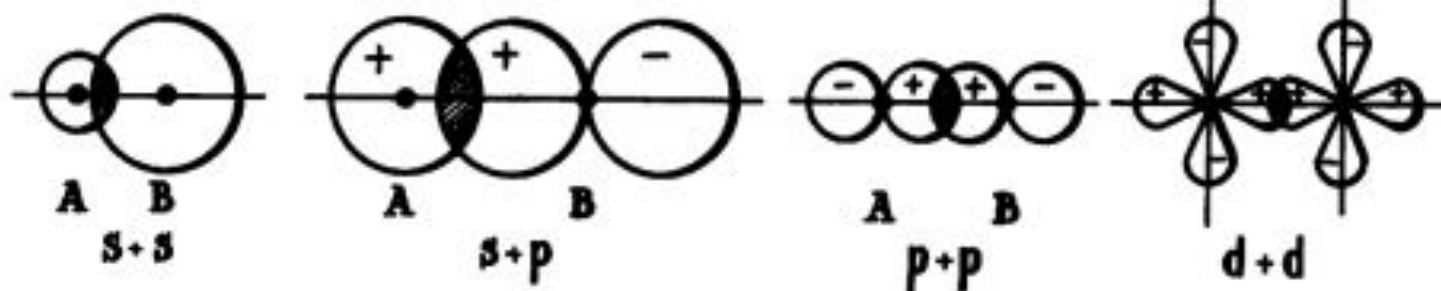
Ковалентная связь характеризуется следующими основными параметрами: энергия связи (E), длина связи, валентный угол



Основные механизмы образования ковалентной связи - обменный и донорно-акцепторный

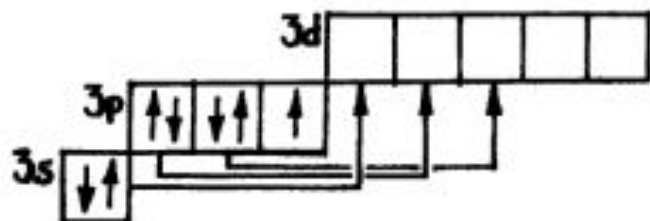


Типы ковалентных связей. Различают несколько типов ковалентной связи: σ -, π -, δ -связи

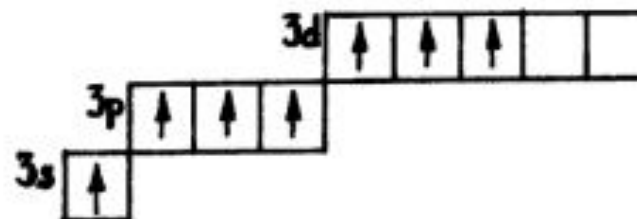


Характеристики ковалентной связи

Насыщаемость определяется конечной величиной числа неспаренных электронов.

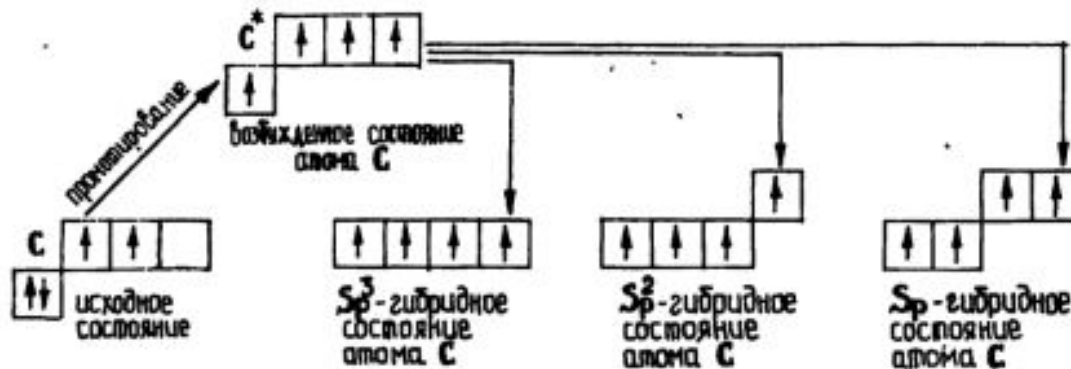


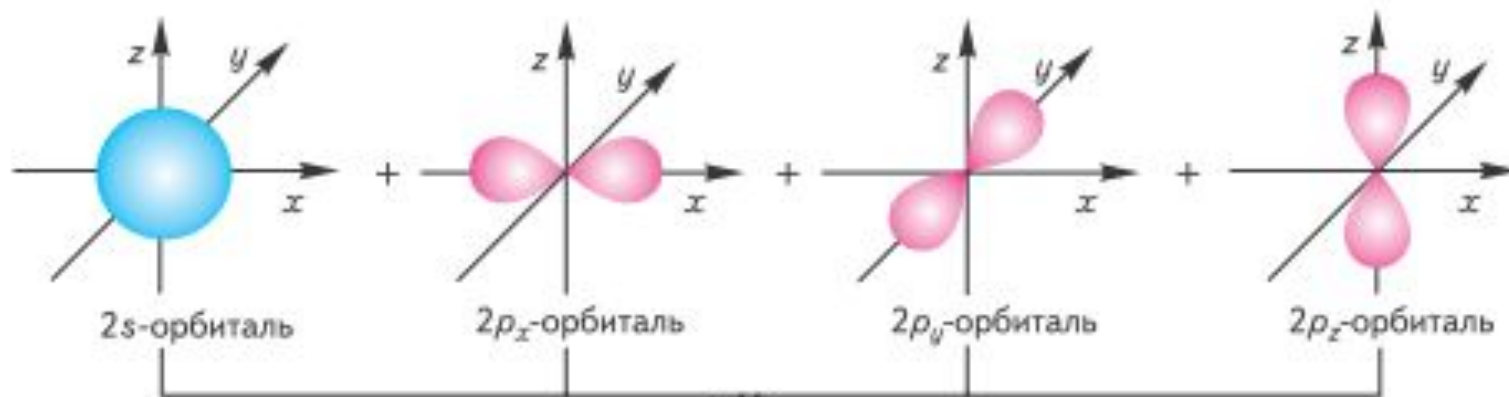
основное состояние атома хлора



возбужденное состояние атома хлора

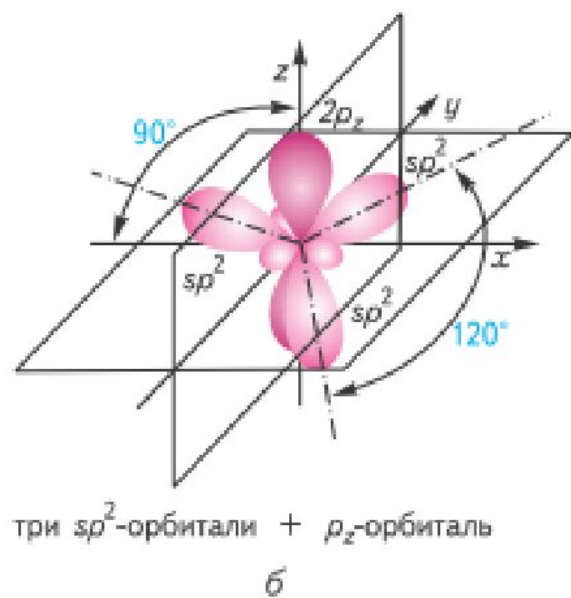
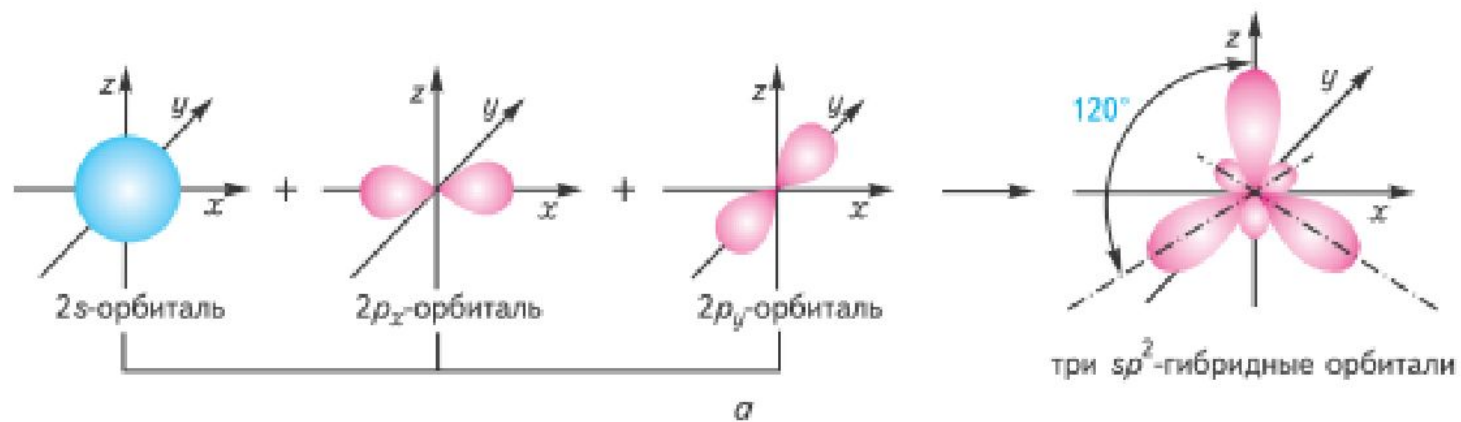
Ковалентная связь характеризуется **направленностью** в пространстве. Геометрия молекул связана с понятием гибридизации атомных орбиталей.

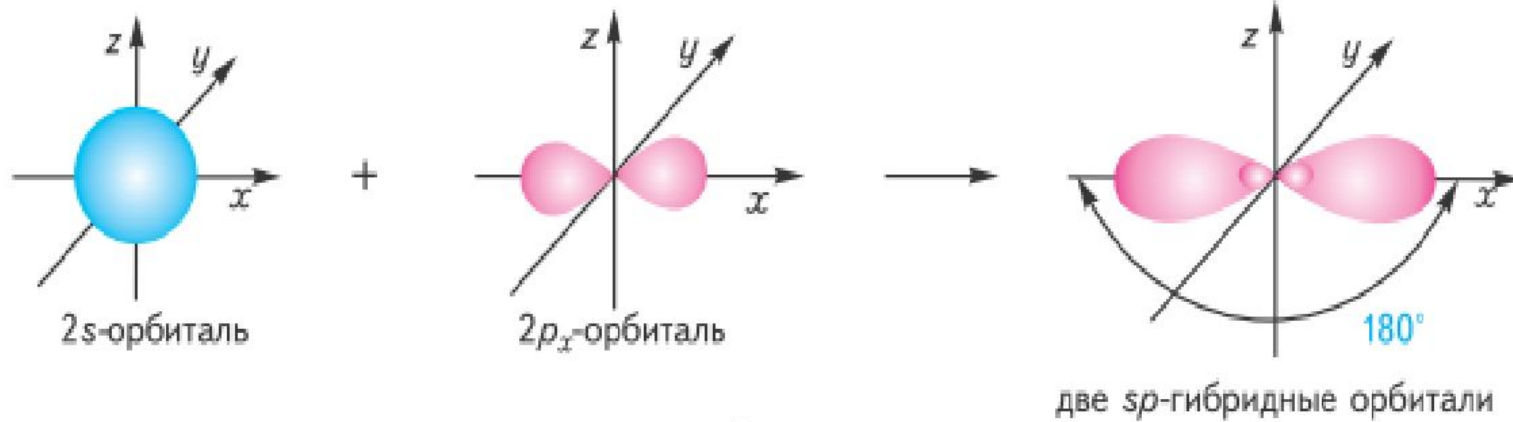




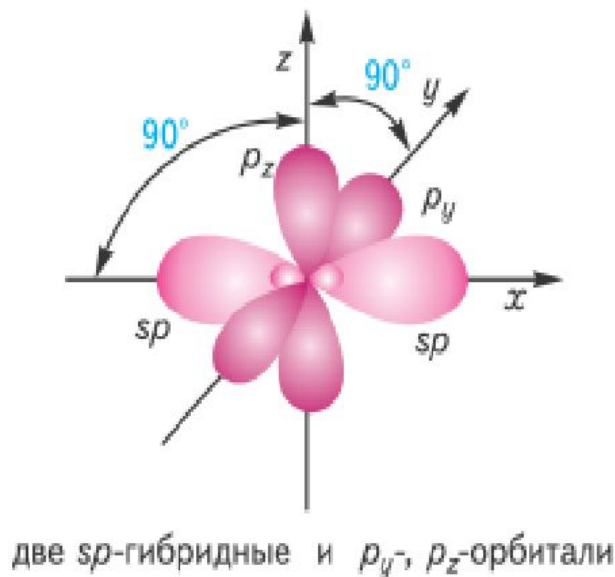
σ





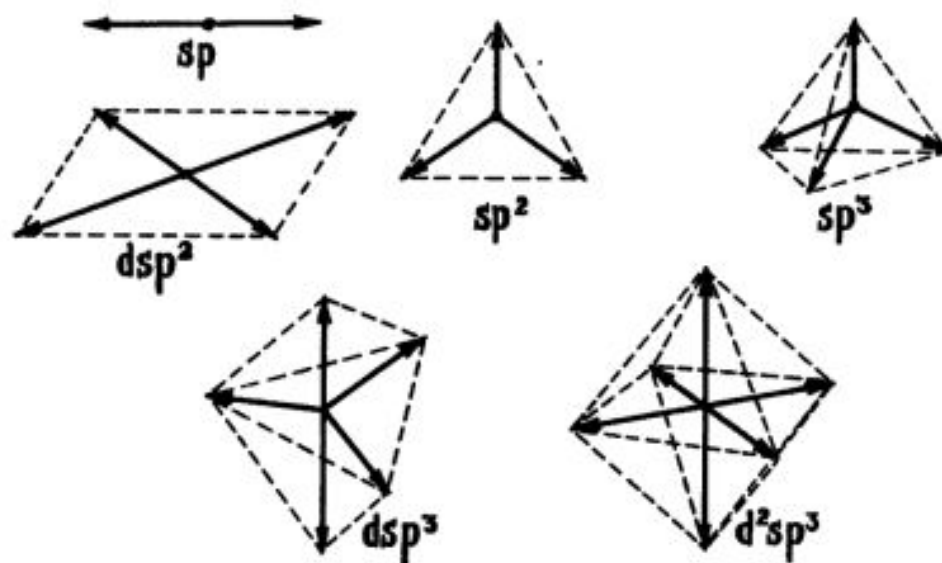


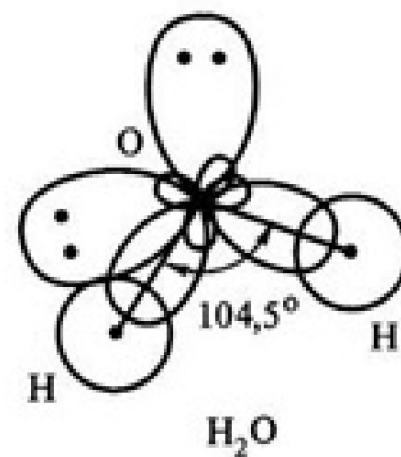
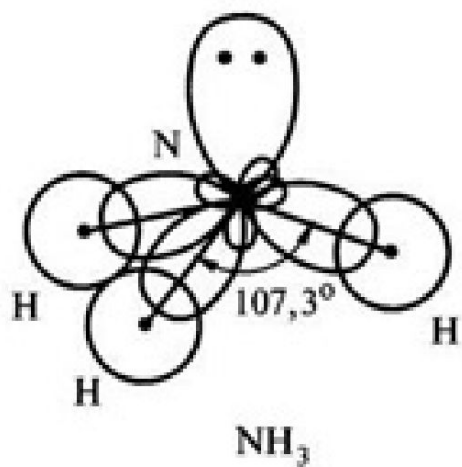
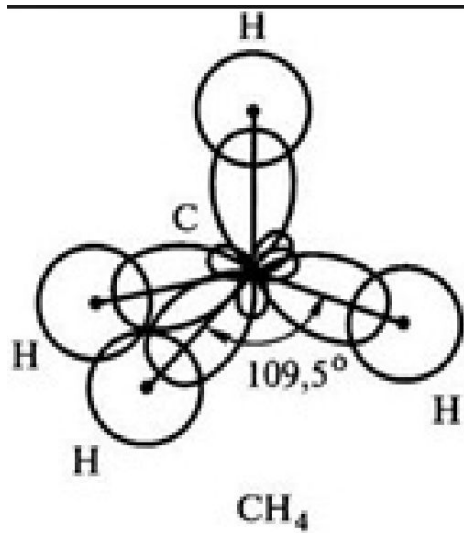
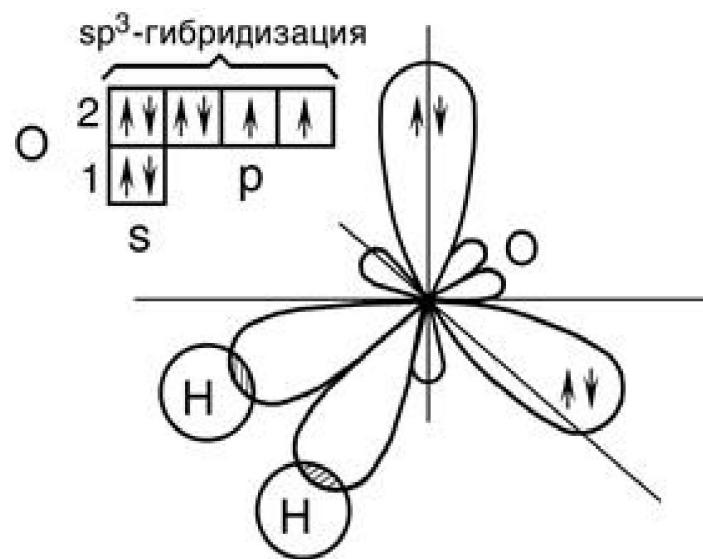
a



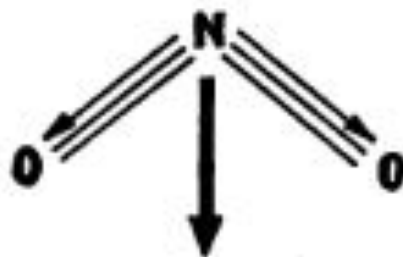
Зависимость между типом гибридных орбиталей и их взаимной ориентацией

Тип гибридизации	Орбитали, участвующие в гибридизации	Число гибридных орбиталей	Углы между гибридными орбиталями	Геометрическая форма молекулы
sp	$s, p (p_x, p_y, p_z)$	2	180°	Линейная
sp^2	s, p_x, p_y	3	120°	Равносторонний треугольник
sp^3	s, p_x, p_y, p_z	4	$109^\circ 28'$	Тетраэдр
dsp^2	$s, p_x, p_y, d_{x^2-y^2}$	4	90°	Плоский квадрат
dsp^3	$s, p_x, p_y, p_z, dz_{z^2}$	5	$90^\circ, 120^\circ$	Тригональная бипирамида
d^2sp^3	$s, p_x, p_y, p_z, dz_{z^2}, d_{x^2-y^2}$	6	90°	Октаэдр





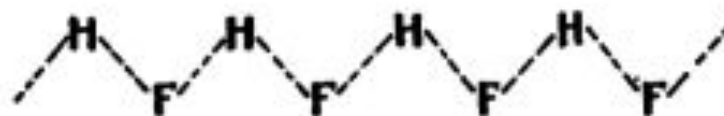
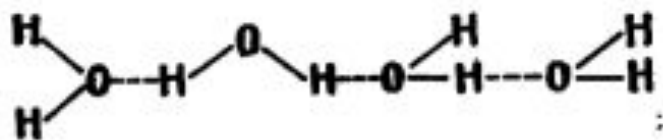
Если молекула образована различными атомами, то связь в такой молекуле будет полярной. Это означает, что центры тяжести положительного и отрицательного зарядов в молекуле не совпадают.



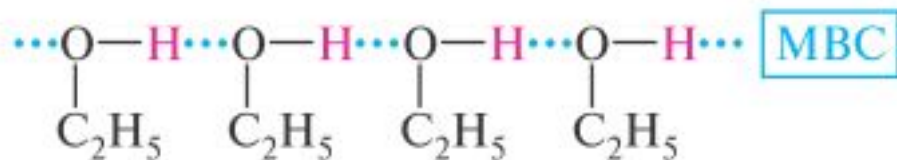
результатирующий момент

Нековалентные взаимодействия. Природа водородной связи

Водородная связь образуется в результате электростатического взаимодействия между активными атомами водорода в молекуле и атомами с неподеленной электронной парой ($-\ddot{\text{O}}-$, $-\ddot{\text{N}}-$, $-\ddot{\text{F}}:$, реже $-\ddot{\text{S}}-$, $-\ddot{\text{Cl}}:$) в этой же или в другой молекуле.



димер уксусной кислоты



ассоциат этилового спирта

Металлическая связь

