

Строение атомов и молекул
химического вещества с
позиции квантовой теории

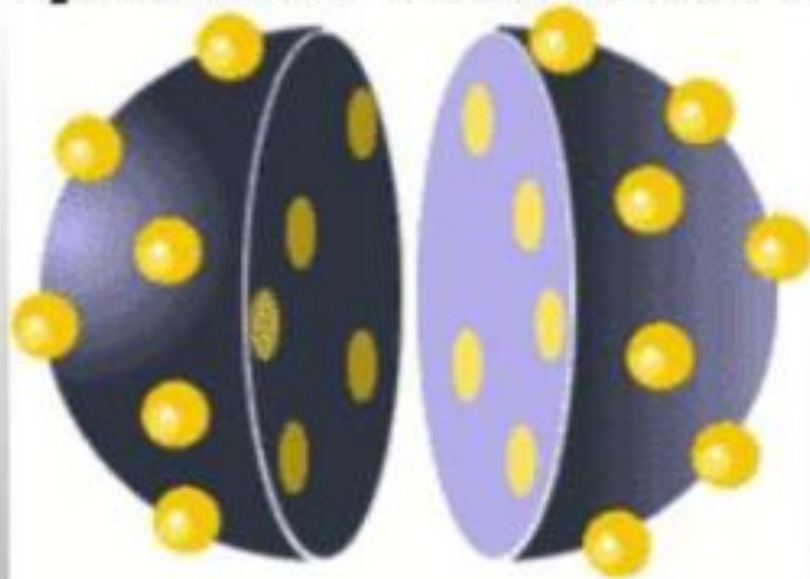
Слово «атом» впервые упоминалось в трудах философов Древней Греции, и в переводе оно означает «неделимый». Не имея современных приборов, философ Демокрит, используя логику и наблюдательность, пришел к выводу, что любое вещество не может дробиться бесконечно, и в итоге должна остаться какая-то неделимая мельчайшая частица вещества – атом вещества.

После открытия электрона в 1897 г. Джозефом Джоном Томсоном [4] им же была предложена первая атомная модель "пудинга с изюмом" – в положительную сферу вкраплены электроны (1903 г.).

В 1904 г. японский физик Хантаро Нагаока [5] предложил модель "сатурноподобного" атома, в котором электроны вращаются по кольцевой орбите вокруг положительного ядра.

Ученик Томсона Эрнест Резерфорд в результате знаменитых экспериментов по рассеянию золотой фольгой α -частиц "разделил" атом на маленькое положительное ядро и окружающие его электроны [6]. Однако, согласно законам классической механики и электродинамики, вращение электрона вокруг ядра должно сопровождаться электромагнитным излучением с непрерывным спектром. Это противоречило известным с 1880 г. линейчатым спектрам газов и паров элементов.

Первая гипотеза строения атома предложена английским учёным Томсоном(1904)-
статическая или
электронно-ионная теория



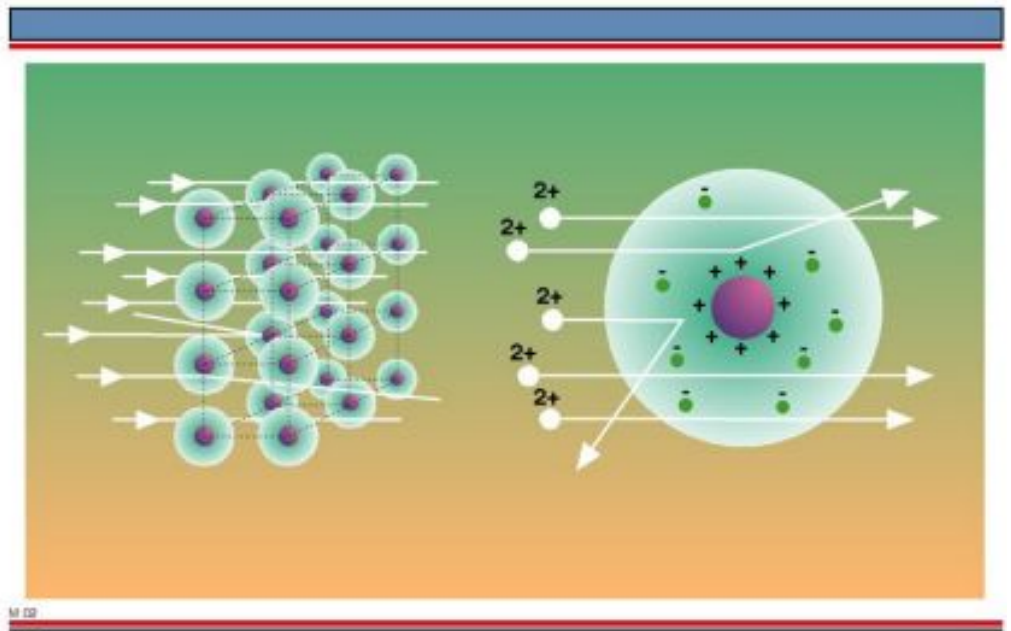
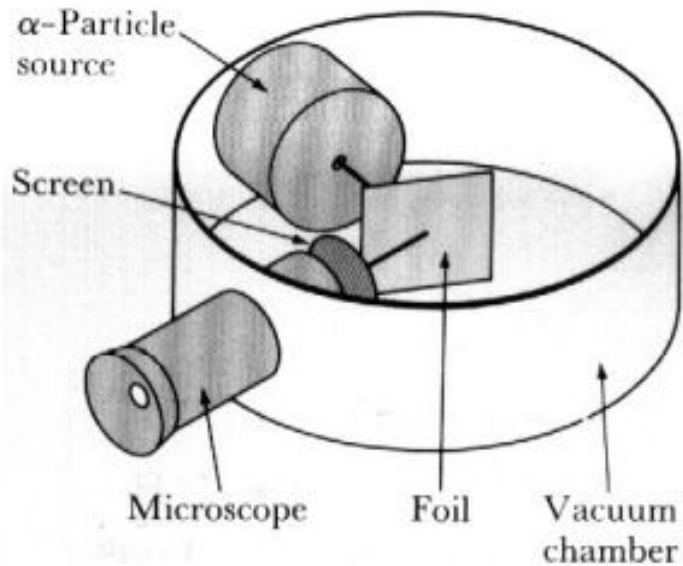
Пудинговая модель

Для проверки гипотезы Томсона Резерфорд (1911) провёл серию опытов по рассеиванию альфа -частиц тонкими металлическими пластинами.



Эксперимент Резерфорда (1908-1911)

Э.Резерфорд (1871-1937), Ханс Вильгельм Гейгер (1882-1945)
и Эрнест Марсден (1889-1970)



Противоречие разрешил ученик Резерфорда Нильс Бор [7] в 1913 г., разработав квантовую модель атома на основе квантовой теории излучения и поглощения света, созданной Максом Планком и Альбертом Эйнштейном. При этом удалось объяснить и рассчитать теоретически линейчатые спектры испускания атомов водорода, а также серии линий в рентгеновских спектрах элементов.

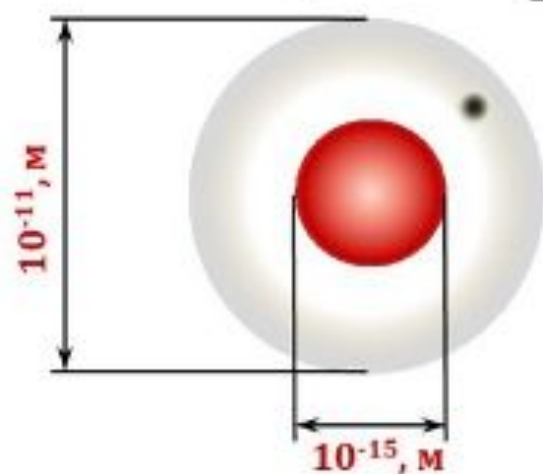
Бор выдвинул предположение, что атом водорода (система протон-электрон) может находиться только в определенных стационарных энергетических состояниях (электрон – на определенных орбитах), причем одно из них соответствует минимуму энергии и является основным (невозбужденным). Испускание или поглощение атомом энергии может происходить, согласно теории Бора, только при переходах электрона из одного энергетического состояния в другое (с одной орбиты на другую). Для R в формуле Бальмера Бор нашел следующее выражение:

$$R = [(2\pi^2 m e^4) / (ch^3)]$$

где m и e – масса и заряд электрона, c – скорость света в вакууме, h – постоянная Планка. При этом Бор предсказал существование серии линий испускания в ультрафиолетовой области ($k = 1$),

Строение атома

Атом – сложная электромагнитная система, включающая элементарные частицы - нуклоны (протоны, нейтроны) и электроны



Частица	Символ	Масса, а.е.м	Масса, г	Заряд, e
Протон	1^1p	1.0073	$1.67 \cdot 10^{-24}$	+1
Нейтрон	1^0n	1.0087	$1.67 \cdot 10^{-24}$	0
Электрон	e^-	0.00055	$9.1 \cdot 10^{-28}$	-1
Позитрон	e^+	0.00055	$9.1 \cdot 10^{-28}$	+1

Ядро (протоны и нейтроны) – определяют массу атома, заряд ядра и радиоактивные свойства

Электроны – определяют химические свойства

Изотопы – разновидности атомов одного и того же химического элемента, различающиеся массовыми числами, но имеющие одинаковый заряд ядра

Устойчивость атомного ядра: «число нейтронов/число протонов»

Легкие элементы: ~ 1

Тяжелые элементы: ~ 1.6

Три идеи квантовой механики

- ◆ принцип дискретности или **квантования**
- ◆ **корпускулярно-волновой дуализм**
- ◆ **вероятностный характер** движения объектов микромира

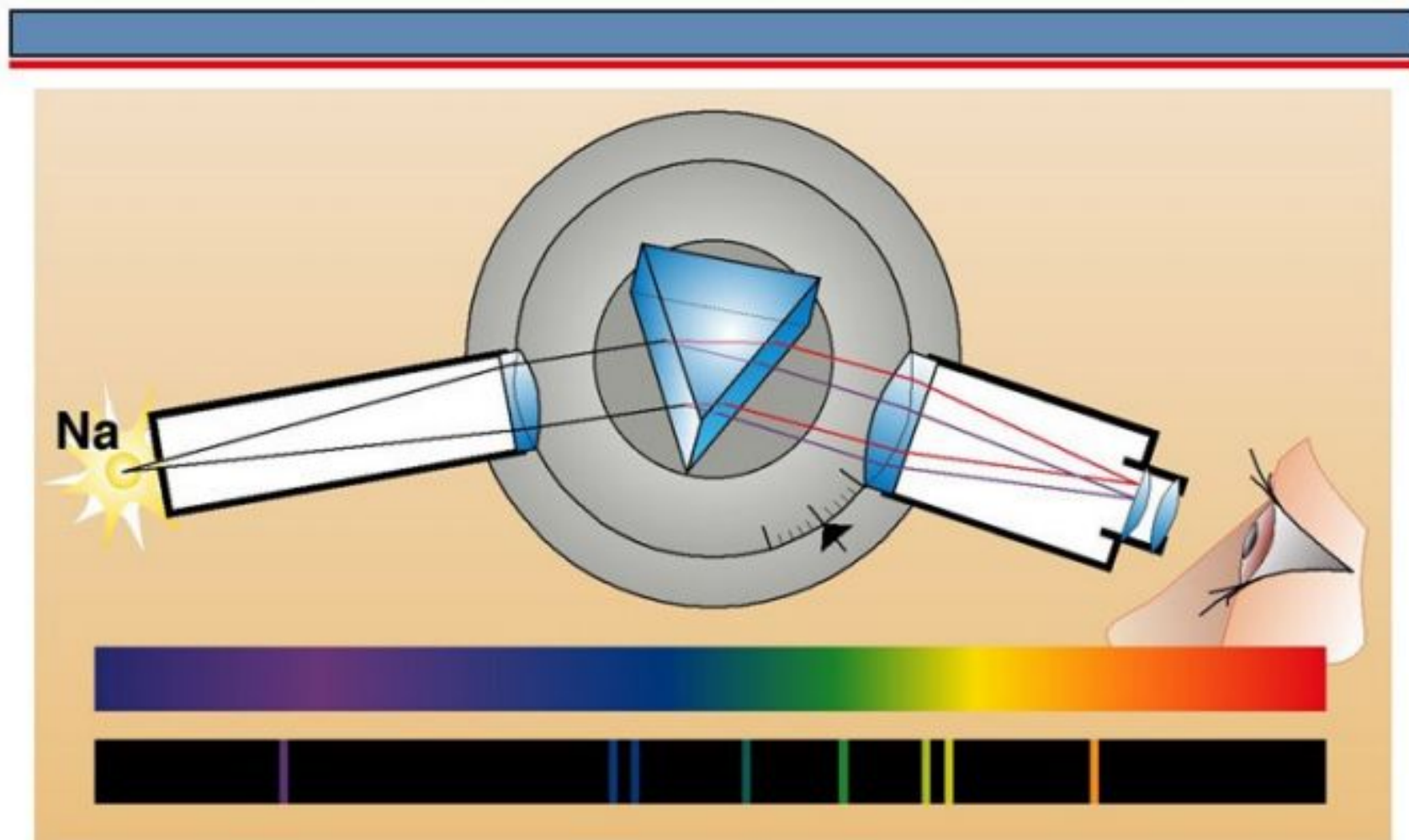
Квантование энергии электрона в атоме

- ◆ Физические величины, относящиеся к микрообъектам, изменяются не непрерывно, а скачкообразно – **квантуются**.
- ◆ Электромагнитное излучение испускается в виде отдельных порций (**квантов**) энергии (М.Планк, 1900 г.).
- ◆ Значение одного кванта: $\Delta E = h\nu$, где ΔE – энергия, Дж; ν – частота, с^{-1} ; $h = 6,626 \cdot 10^{-34}$ Дж с (постоянная Планка).



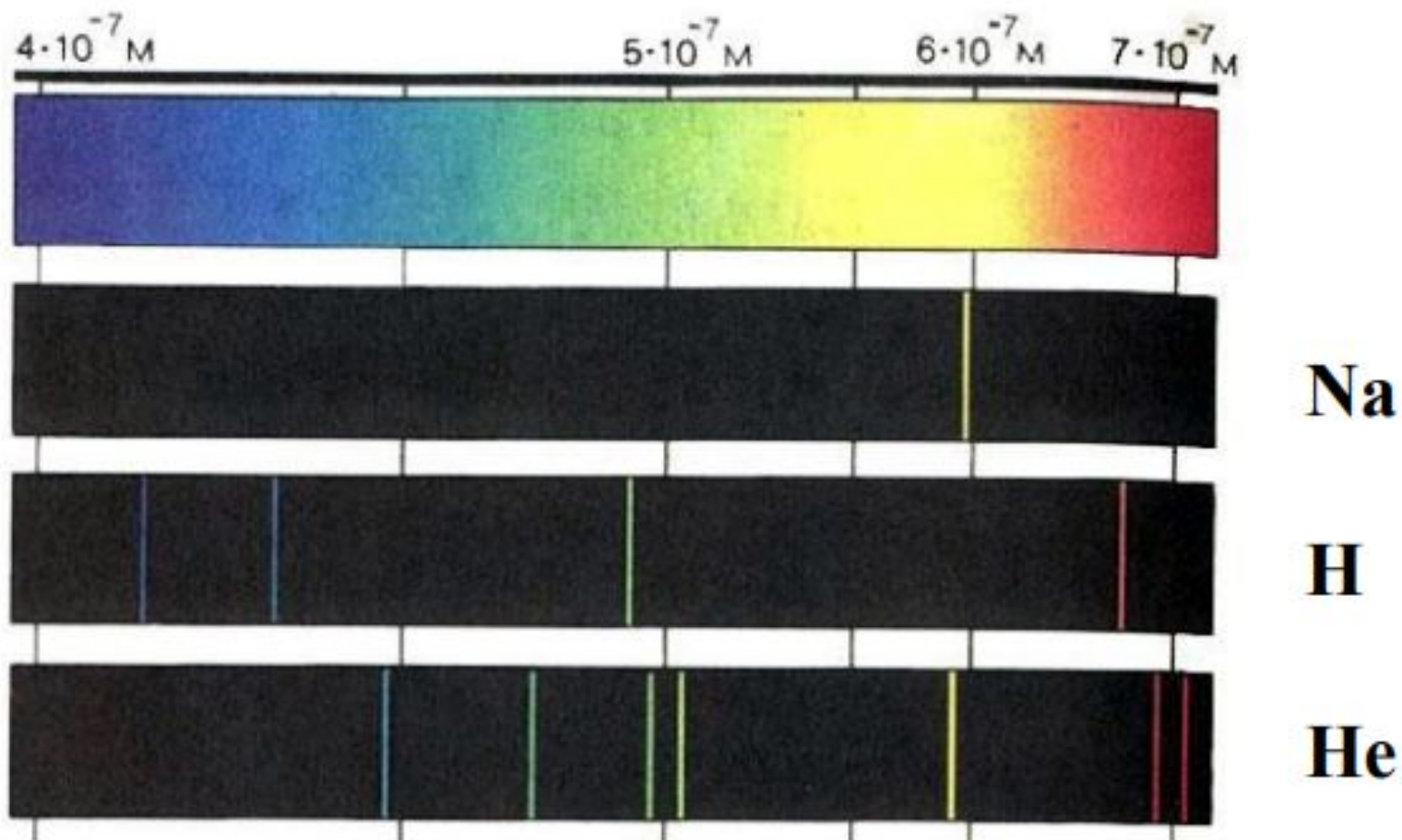
Макс ПЛАНК
(1858 – 1947)

Оптическая схема спектроскопа

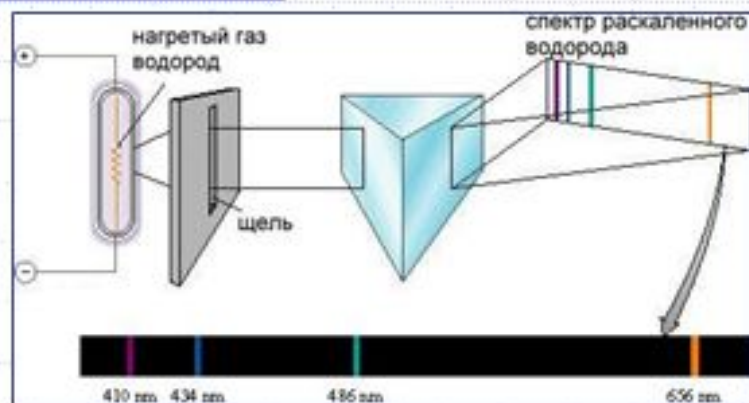


Спектры излучения (Na, H, He)

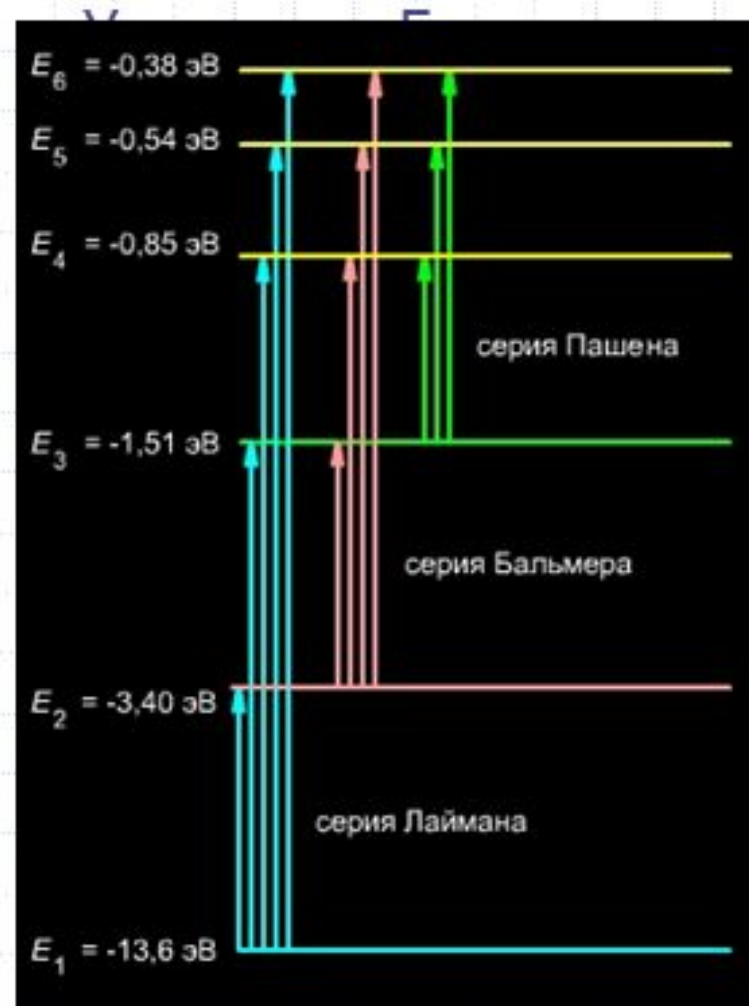
Желтая линия натрия при 589 нм



Квантование энергии объясняет происхождение линейчатых атомных спектров



Длины волн, отвечающие линиям в спектре атома водорода, можно выразить как ряд целых чисел (швейцарский физик и математик И.Я. Бальмер, 1885 г.)

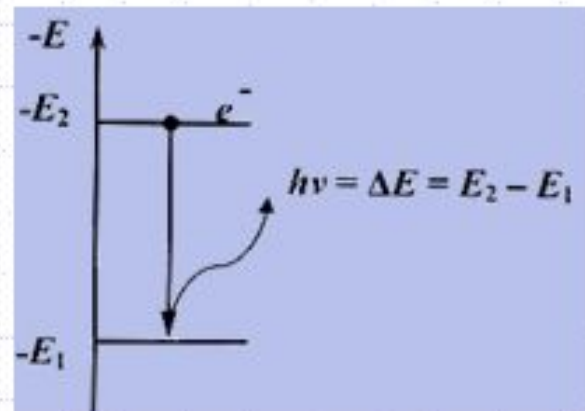


Постулаты Н.Бора

- ◆ В изолированном атоме электроны движутся по круговым стационарным орбитам, не излучая и не поглощая энергию.
- ◆ Каждой такой орбите отвечает определенный уровень энергии
- ◆ Переход электрона из одного стационарного состояния в другое сопровождается излучением или поглощением кванта излучения с частотой

$$\nu = \Delta E / h$$

(ΔE – разность энергий начального и конечного состояний электрона, h – постоянная Планка)



Корпускулярно-волновой дуализм

- ◆ Микрочастицы (обладающие массой, размерами и зарядом) одновременно проявляют свойства **волны** (способность к дифракции, интерференции и др.).
- ◆ Кванты электромагнитного излучения (фотоны) рассматривают как движущиеся со скоростью света частицы, имеющие нулевую массу покоя (А. Эйнштейн).
- ◆ Энергия фотонов: $E = mc^2 = h\nu = hc / \lambda$,
где m – масса фотона, c – скорость света в вакууме, h – постоянная Планка, ν – частота излучения, λ – длина волны.

Гипотеза де Бройля (1924 г.)



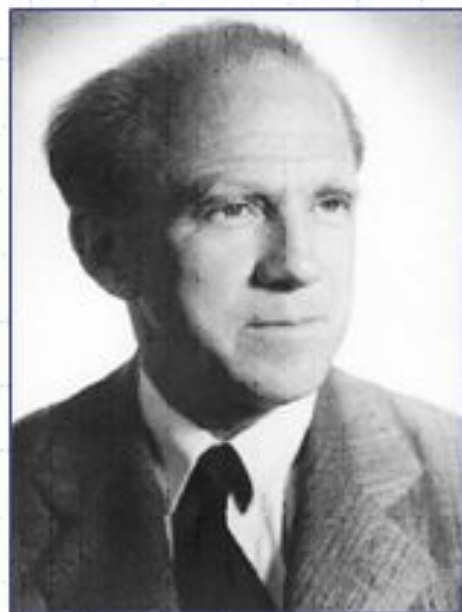
Луи де БРОЙЛЬ
(1892 – 1987)

- ◆ Корпускулярно-волновыми свойствами обладает любая частица, движущаяся со скоростью v .
- ◆ Уравнение де Бройля:

$$\lambda = h/m v,$$

где m – масса частицы, v – ее скорость, h – постоянная Планка; λ – длина «волны де Бройля».

Принцип неопределенности Гейзенберга (1927 г.)



Вернер ГЕЙЗЕНБЕРГ
(1901 - 1976)

- ◆ Для микрочастицы нельзя одновременно точно определить положение в пространстве и импульс количества движения:

$$\Delta p_x \cdot \Delta x \geq h / 2\pi,$$

где $\Delta p_x = m \Delta v_x$ – неопределенность (ошибка в определении) импульса по координате x ; Δx – неопределенность (ошибка в определении) положения микрообъекта по этой координате.

Вероятностный характер явлений микромира

- ◆ Чем точнее определена скорость, тем меньше известно о местоположении частицы, и наоборот.
- ◆ Для микрочастицы неприемлемо понятие о траектории движения. Можно лишь говорить о вероятности обнаружить ее каких-то областях пространства.
- ◆ От «орбит движения электронов», введенных Бором, переходим к понятию **орбитали** – области пространства, где вероятность пребывания электронов максимальна.

Волновое уравнение Шрёдингера (1926 г.)



Эрвин ШРЁДИНГЕР
(1887–1961)

- ◆ Волновое уравнение описывает состояние электрона в атоме.
- ◆ Оно объединяет математические выражения для колебательных процессов и уравнение де Бройля
- ◆ Это линейное дифференциальное однородное уравнение

Уравнение Шрёдингера

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2} (E - E_p) \psi = 0$$

где ψ – волновая функция (аналог амплитуды для волнового движения в классической механике), которая характеризует движение электрона в пространстве как волнообразное возмущение; x, y, z – координаты, m – масса покоя электрона, h – постоянная Планка, E – полная энергия электрона, E_p – потенциальная энергия электрона.

Уравнение Шрёдингера в операторной форме

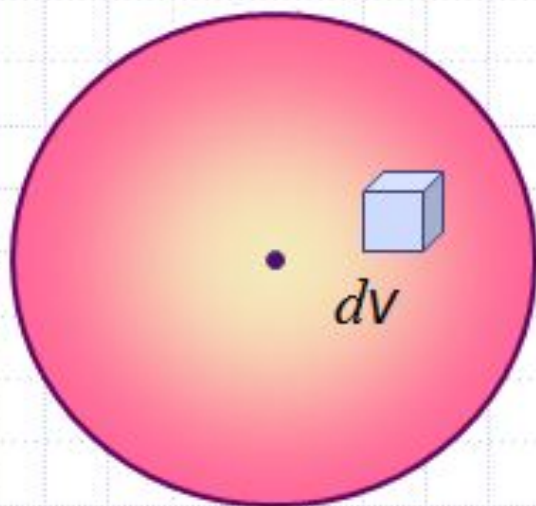
$$\nabla^2 \psi = \frac{\partial^2 \dots}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \dots}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \dots}{\partial z^2}$$

Оператор Лапласа

$$\nabla^2 \psi + \frac{8\pi^2 m}{h^2} (E - E_p) \psi = 0$$

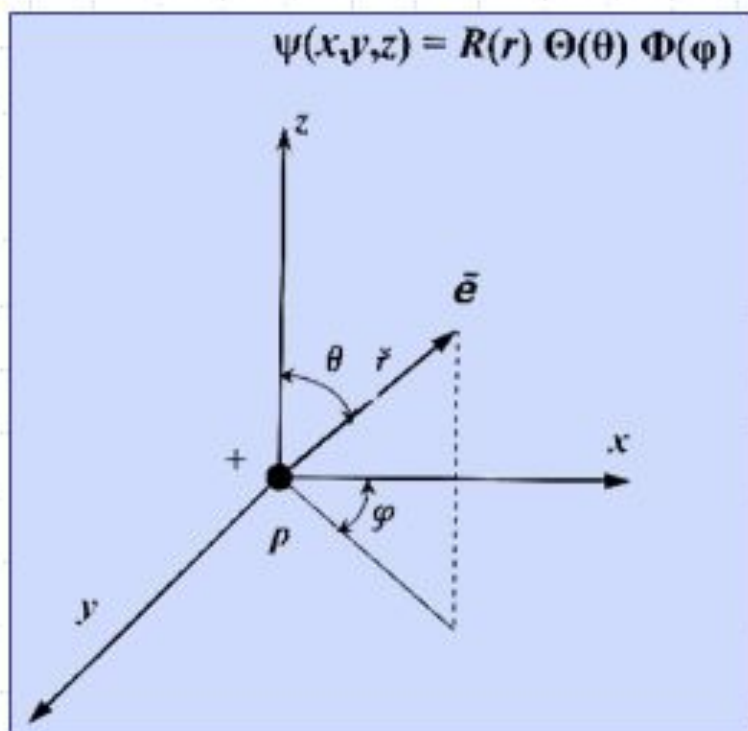
Волновое уравнение в операторной форме

Свойства волновой функции



- ❖ Волновая функция ψ характеризует вероятность нахождения электрона в атоме.
- ❖ Волновая функция ψ имеет действительное положительное значение
- ❖ Плотность вероятности: $\psi\psi^* = |\psi|^2$.
- ❖ Вероятность W нахождения электрона в элементарном объеме $dV = dx dy dz$:
$$W = |\psi|^2 dV$$
- ❖ Достоверность пребывания электрона в атоме
$$W = \int |\psi|^2 dV = 1$$

Разделение переменных – переход от декартовых координат к сферическим



- ◆ Переходим от декартовых координат x, y, z к сферическим r, θ, φ .
- ◆ Волновую функцию можно представить в виде произведения:
$$\psi(x,y,z) = R(r) \Theta(\theta) \Phi(\varphi)$$
- ◆ Функция $R(r)$ - радиальная, а $\Theta(\theta)$ и $\Phi(\varphi)$ – угловые составляющие волновой функции.

Решение уравнения Шрёдингера для атома водорода ${}_1\text{H}$

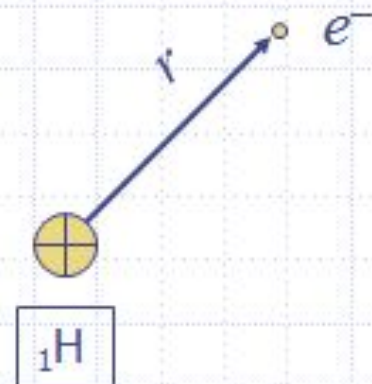
- ◆ Для свободного электрона:

$$E = E_k$$

- ◆ В атоме: $E = E_k + E_p$
- ◆ Электрон находится в поле ядра, только если $E_p > E_k$
- ◆ Для атома водорода:

$E_p = -e^2/r$, где e – заряд электрона, r – расстояние от электрона до ядра.

- ◆ Значение E_p всегда меньше 0



Квантово-механическая

МОДЕЛЬ атома

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2} (E - U) \Psi = 0$$

Уравнение Шредингера

$$\left| \Psi(x, y, z) \right|^2$$

Величина, пропорциональная вероятности нахождения электрона в некотором объеме, окружающем точку с координатами x, y, z . **Электронная плотность**

Область пространства, в которой вероятность нахождения электрона составляет не менее 95%, называется

атомной орбиталью, она характеризуется определенной формой и расстоянием от ядра

Состояние электрона в атоме полностью определяется четырьмя квантовыми числами, три из которых (n, l, m_l) характеризуют электронную орбиталь, а четвертое (m_s) – собственный момент электрона

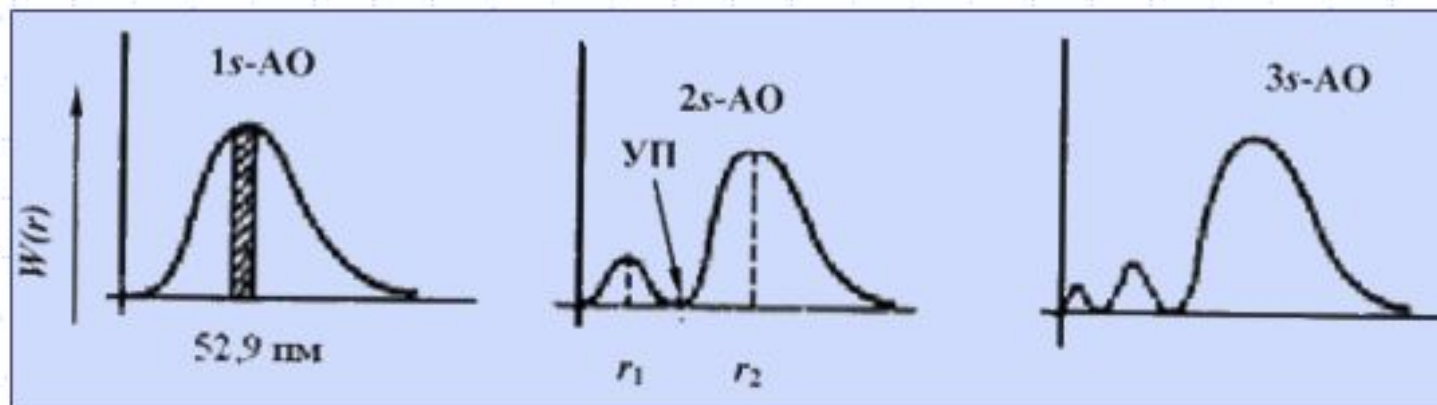
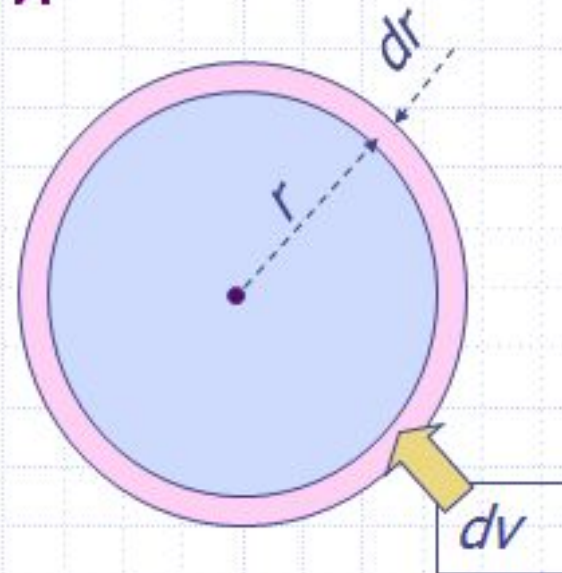
Атомная орбиталь

- ◆ Геометрический образ одноэлектронной волновой функции – **атомная орбиталь** – область пространства вокруг ядра атома, где вероятность обнаружения электрона максимальна (обычно 90–95%).
- ◆ Граничная поверхность атомной орбитали – это графическое отображение волновой функции.

Функция радиального распределения электронной плотности

- ♦ Вероятность пребывания электрона в объеме dv :

$$W(r) = 4\pi r^2 |\psi|^2 dr$$



Квантовые числа

$R(r)$	n, l
$\Theta(\theta)$	l, m_l
$\Phi(\varphi)$	m_l

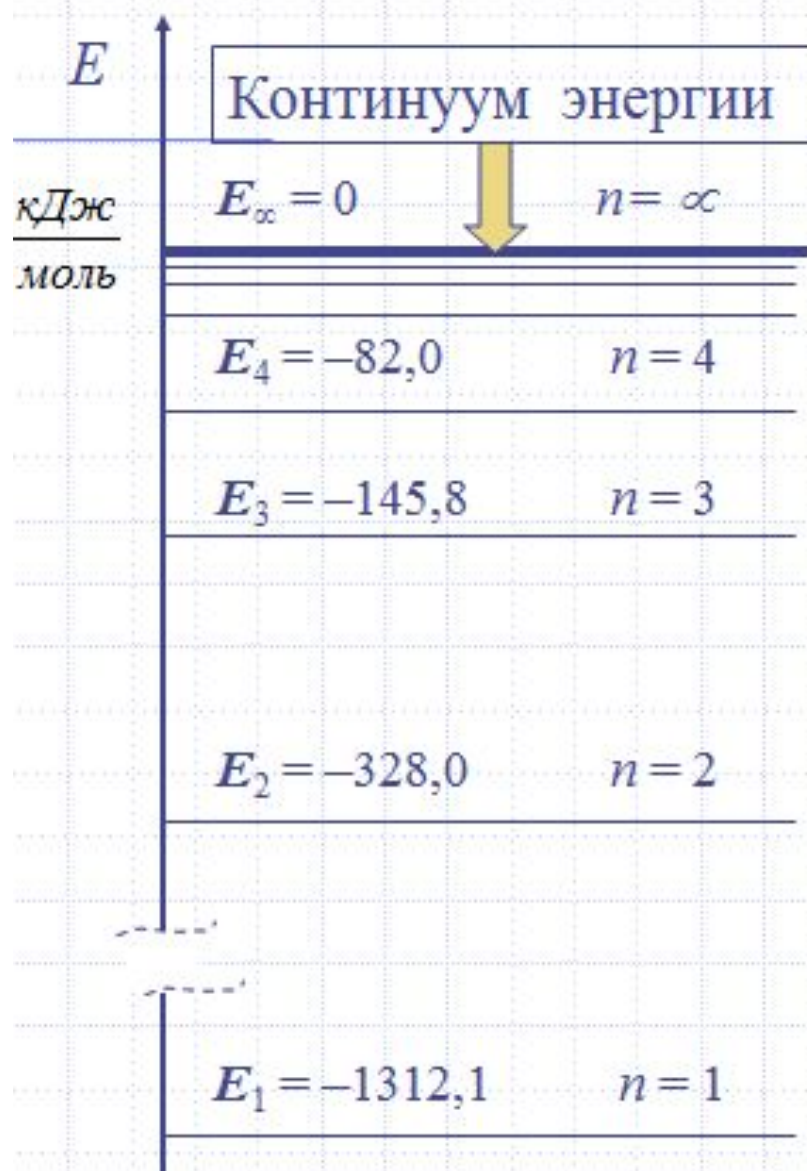
Целые
положительные
числа

Каждая атомная орбиталь характеризуется набором из трех квантовых чисел: главного n , орбитального l и магнитного m_l .

Главное квантовое число n

- ◆ n характеризует энергию атомной орбитали.
- ◆ n может принимать положительные целочисленные значения (1, 2, 3, 4 и т.д.).
- ◆ Чем больше значение n , тем выше энергия и больше размер орбитали.
- ◆ Уровни энергии с определенными значениями n обозначают буквами $K, L, M, N...$ (для $n = 1, 2, 3, 4...$).
- ◆ Решение уравнения Шрёдингера для атома водорода дает следующее выражение для энергии электрона:

$$E = -\frac{2\pi^2 m e^4}{n^2 h^2} = -\frac{1312,1}{n^2} \text{ (кДж / моль)}$$



Энергетические уровни в атоме водорода

$$E = -\frac{1312,1}{n^2} \text{ (кДж / моль)}$$

Орбитальное квантовое число l

- ◆ Орбитальное квантовое число l характеризует энергетический подуровень.
- ◆ Атомные орбитали с разными орбитальными квантовыми числами различаются формой и (для многоэлектронных атомов) энергией.
- ◆ Для каждого значения n разрешены целочисленные значения l от 0 до $(n-1)$.
- ◆ Значения $l = 0, 1, 2, 3 \dots$ соответствуют энергетическим подуровням s, p, d, f .

Магнитное квантовое число m_l

- ◆ Магнитное квантовое число m_l отвечает за ориентацию атомных орбиталей в пространстве.
- ◆ Для каждого значения l магнитное квантовое число m_l может принимать целочисленные значения от $-l$ до $+l$ (всего $2l + 1$ значений).
- ◆ Например, p -орбитали ($l = 1$) могут быть ориентированы тремя способами ($m_l = -1, 0, +1$), а для d -орбиталей возможно уже пять значений магнитного квантового числа.

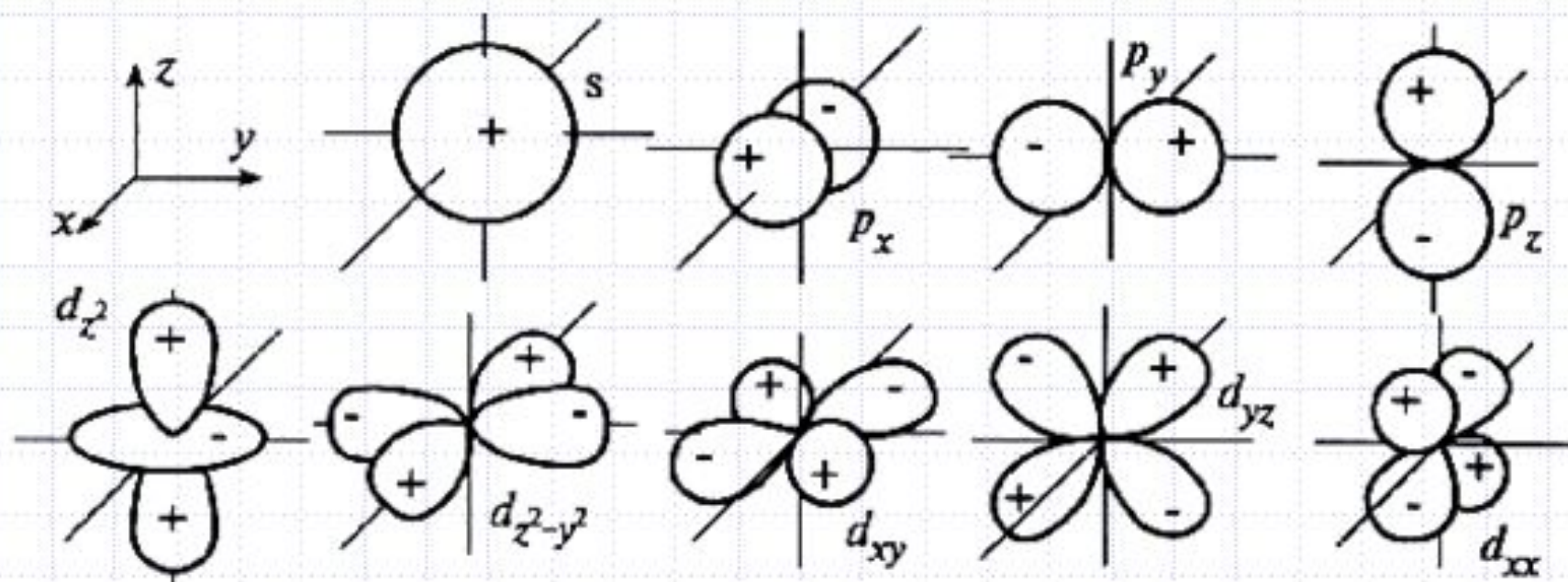
Магнитное спиновое квантовое число m_s

- ◆ Электрон, занимающий АО, характеризуется спиновым квантовым числом m_s .
- ◆ Спин - собственный магнитный момент количества движения элементарной частицы.
- ◆ Спин не связан с каким-либо перемещением частицы, а имеет квантовую природу.
- ◆ Спиновое квантовое число m_s может принимать значения $+1/2$ и $-1/2$.

Квантовые числа

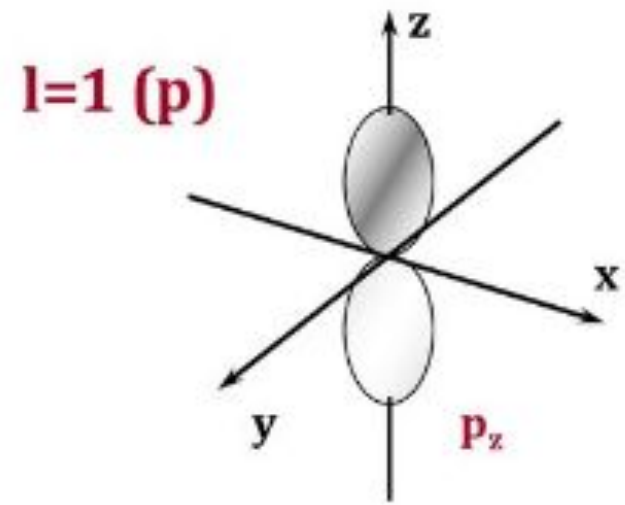
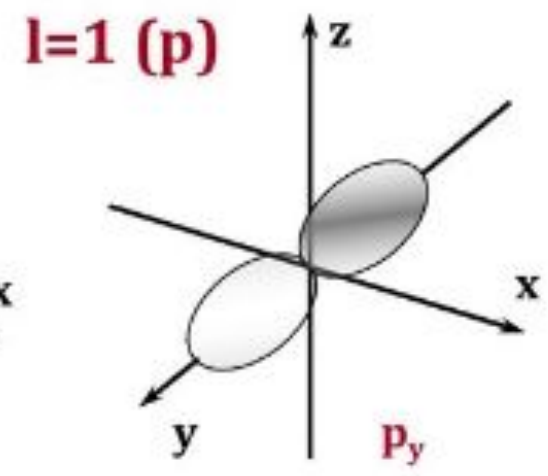
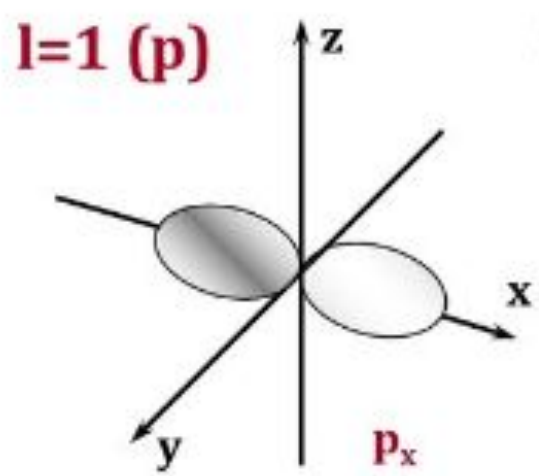
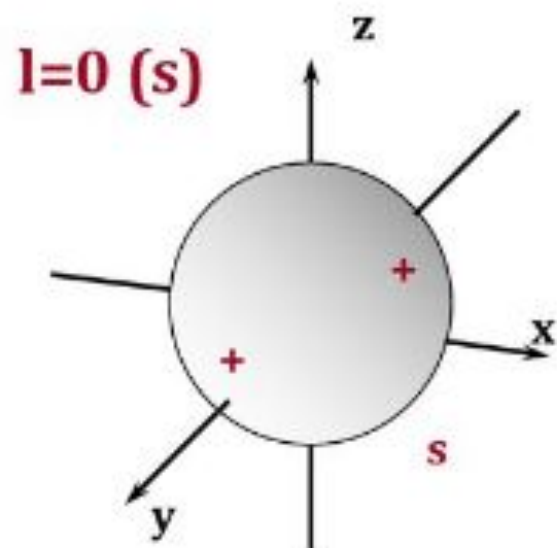
Квантовое число	Принимаемые значения	Характеризуемое свойство	Примечание
Главное (n)	1, 2, 3, ..., ∞	Энергия (E) уровня Среднее расстояние от ядра	$n=\infty$ - отсутствует взаимодействие с ядром. $E = 0$
Орбитальное (l)	0, 1, ..., (n-1) Всего n значений для данного n	Орбитальный момент количества движения – форма орбитали	Обычно используются буквенные символы: l: 0 1 2 3 4 s p d f g
Магнитное (m_l)	-l, ..., 0, ..., +l Всего 2l+1 значение для данного l	Ориентация момента количества движения – расположение орбитали в пространстве	При помещение в магнитное поле орбитали с разными m_l имеют разную энергию
Спиновое (m_s)	$\pm 1/2$ Не зависит от свойств орбитали	Ориентация собственного магнитного момента электрона	Обозначают \uparrow или \downarrow

Форма атомных орбиталей



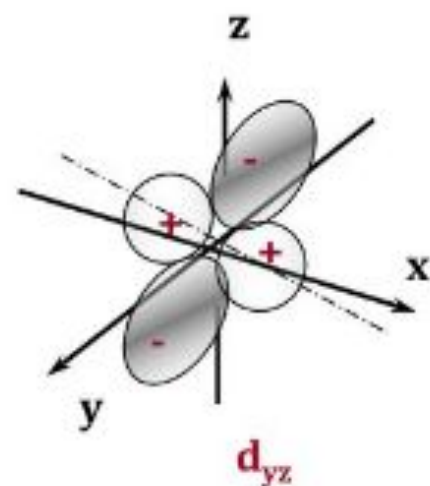
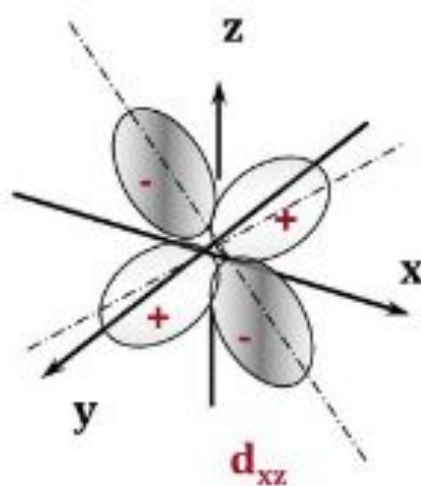
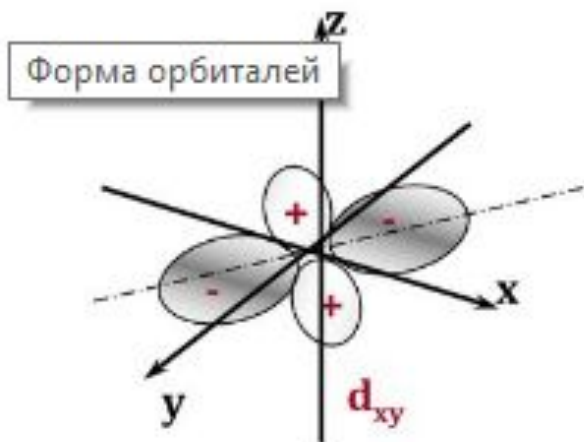
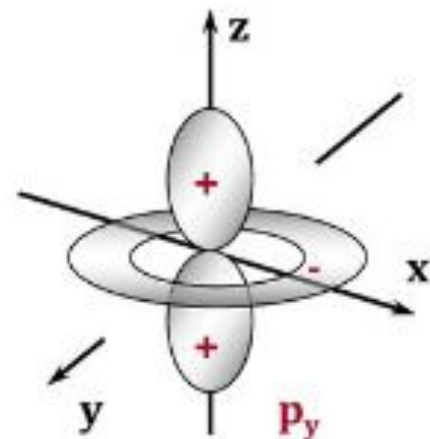
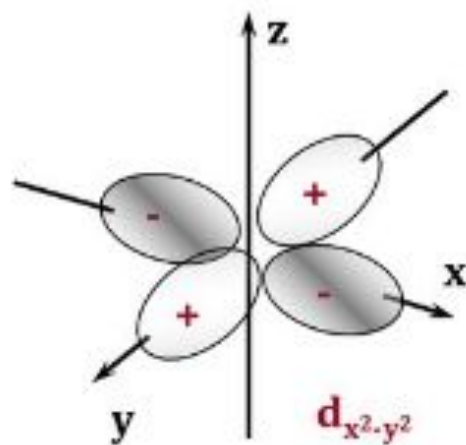
Изображения орбиталей (“+” и “-” знаки волновой функции)

Форма орбиталей



Форма орбиталей

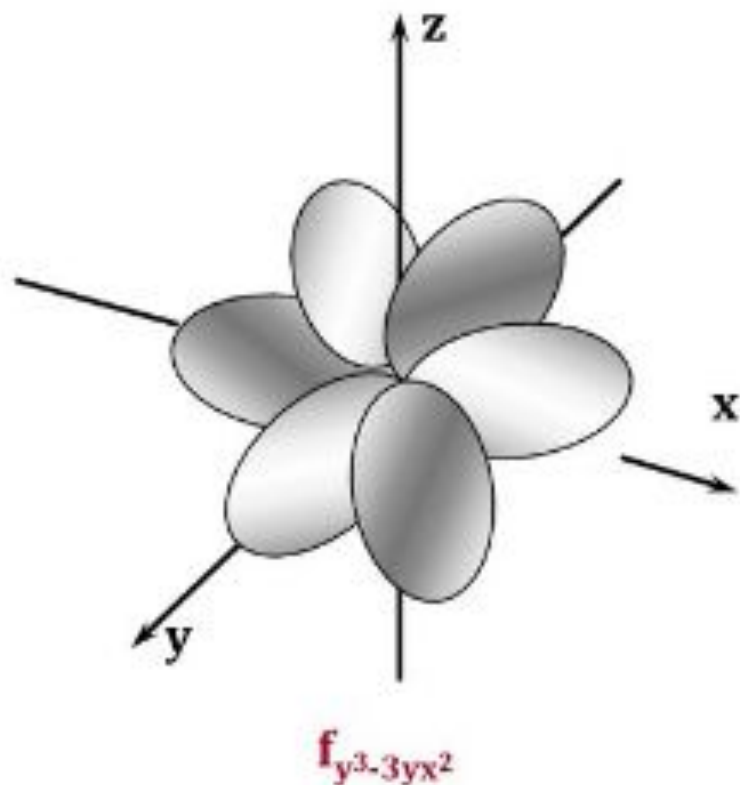
$l=2$ (d)



Форма орбиталей

$l=3$ (f)

При Форма орбиталей **f** из
семи орбиталей



Основные принципы заполнения орбиталей электронами

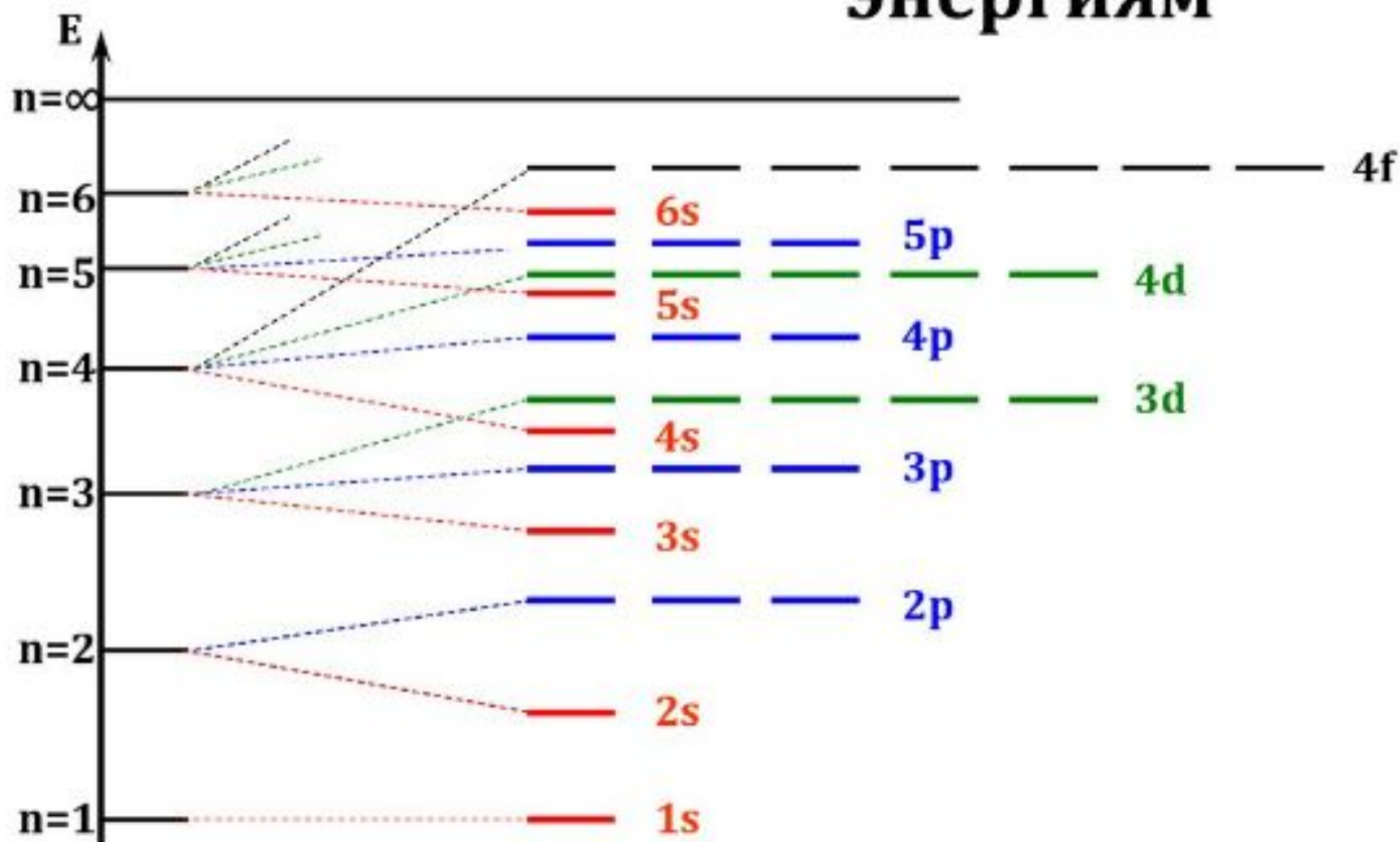
Основные принци

$Z_{\text{эфф}}$ – на электрон внешнего уровня действует заряд меньшего истинного заряда ядра

1. В многоэлектронном атоме подуровни имеют различную энергию. Для одноэлектронного приближения их распределение по энергиям показано далее...
2. Зависимость энергии орбитали от заряда ядра носит сложный немонотонный характер

Распределение орбиталей водородоподобного атома по

энергиям



Основные принципы заполнения орбиталей электронами

1. Принцип наименьшей энергии

В многоэлектронном атоме стабильной является такая конфигурация, для которой достигается минимум полной энергии. В первую очередь заполняются орбитали с наименьшей энергией, т.е. выполняется последовательность:

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

Энергия орбиталей увеличивается в порядке возрастания суммы квантовых чисел $n+l$, а при одинаковой сумме этих чисел – в порядке возрастания главного квантового числа

(Правило Клечковского)

Основные принципы заполнения орбиталей электронами

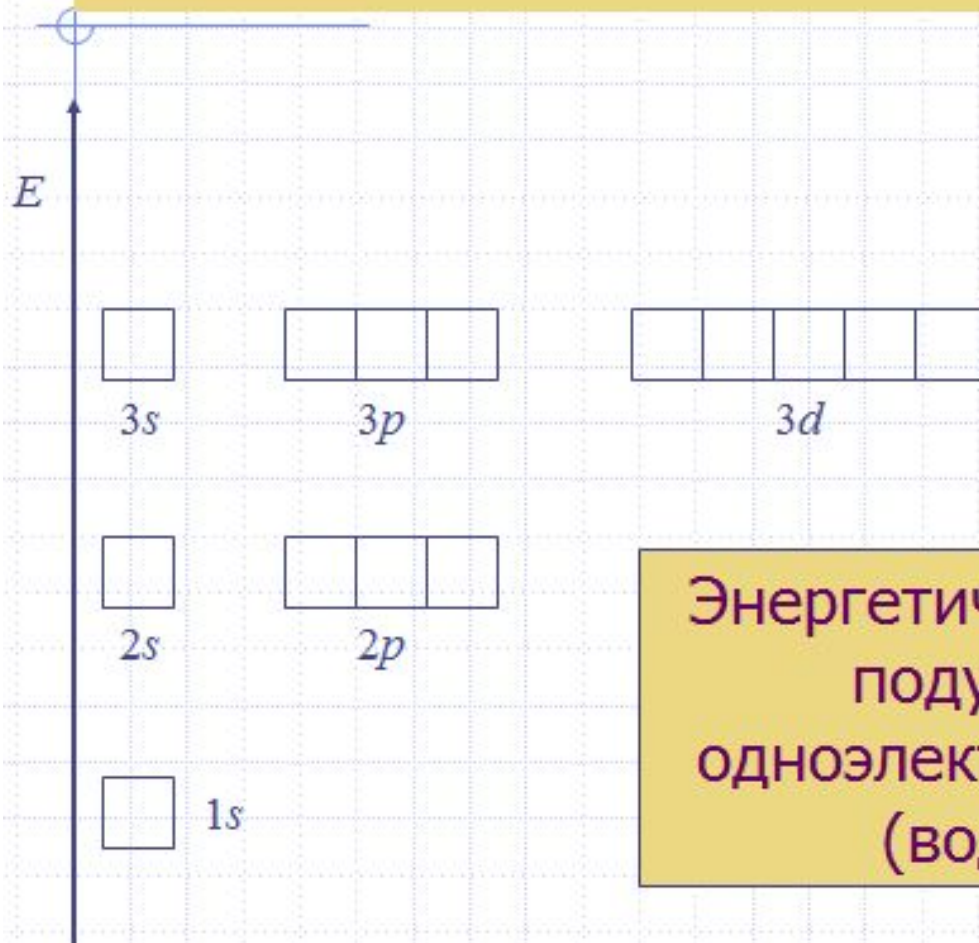
2. Принцип Паули

В атоме не существует двух электронов, состояние которых описывается одинаковым набором квантовых чисел (n, l, m_l, m_s) . Следовательно на одной орбитали (она характеризуется тремя квантовыми числами (n, l, m_l)) может находиться не более двух электронов с разными значениями спинового квантового числа (\uparrow и \downarrow).

3. Правило Хунда

В пределах одного подуровня (т.е. на орбиталях с одним и тем же значением l) Электроны распределяются так, чтобы суммарный спин (Σm_s) был максимален.

Энергетическая диаграмма



Энергетические уровни и подуровни для одноэлектронного атома (водород ${}_1\text{H}$)

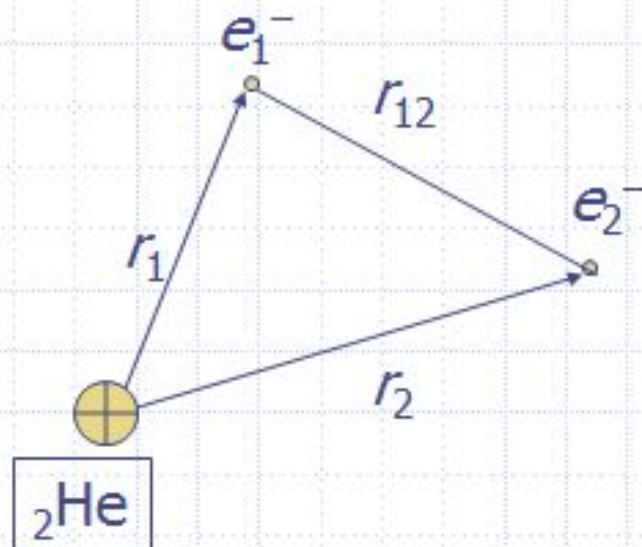
Уравнение Шрёдингера для многоэлектронного атома (водородоподобная модель)

◆ Притяжение к ядру:

$$E_{1p} = \frac{-2e^2}{r_1} \quad E_{2p} = \frac{-2e^2}{r_2}$$

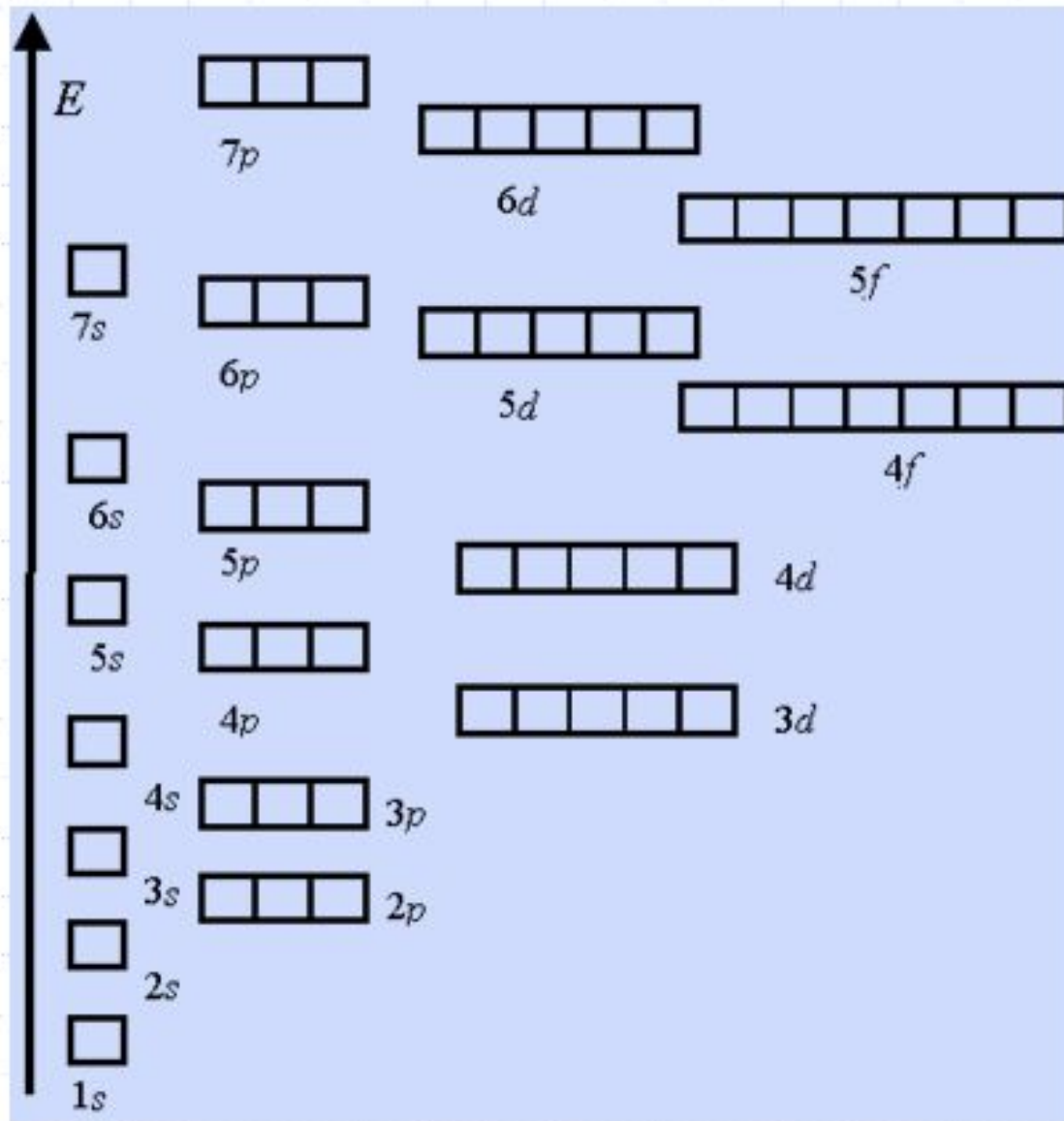
◆ Отталкивание электронов:

$$E_{12p} = \frac{+e^2}{r_{12}}$$



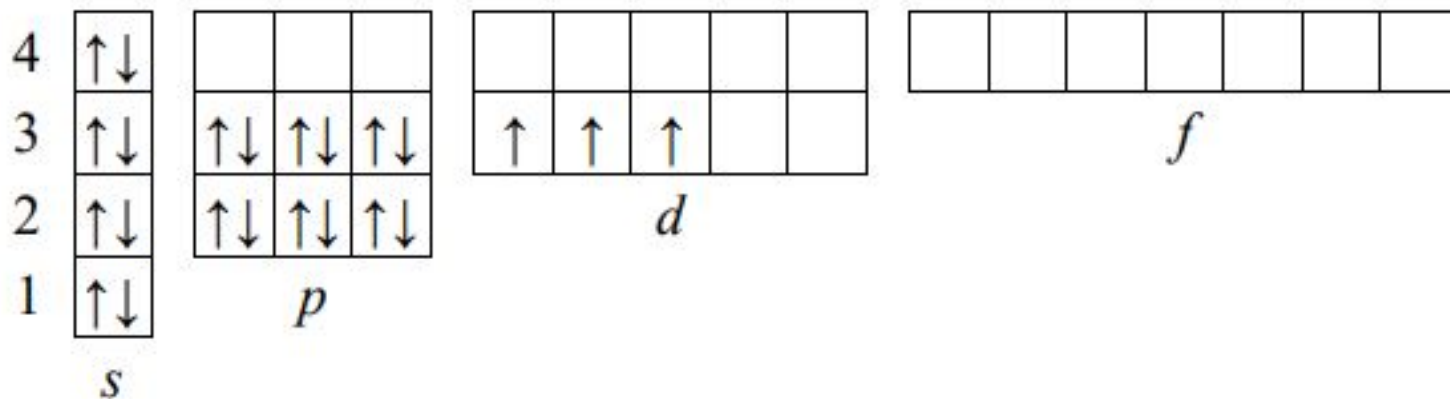
$$\nabla_1^2 \psi + \nabla_2^2 \psi + \frac{8\pi^2 m}{h^2} (E - \sum E_p^i) \psi = 0$$

Энергетическая диаграмма многоэлектронного атома

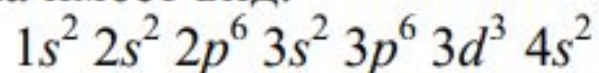


Для наглядного изображения электронной структуры атома существуют два способа: электронно-структурные формулы и электронные формулы. Электронно-структурная формула представляет собой графическую схему в виде «квантовых ячеек». Атомная орбиталь в схеме изображается небольшим квадратом, а электроны – стрелками вверх или вниз. Орбитали группируются в подуровни и уровни с учётом значения полной энергии. При этом: каждый горизонтальный ряд ячеек соответствует определённому энергетическому уровню, что отражает значение главного квантового числа n ; в пределах одного ряда ячейки объединяются в группы, соответствующие энергетическим подуровням и значению орбитального квантового числа l :

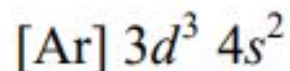
вертикальные ряды (столбцы) соответствуют определённому значению магнитного квантового числа m_l ; значение спинного квантового числа соответствует направлению стрелки в ячейке («↑» – $m_s = +\frac{1}{2}$, «↓» – $m_s = -\frac{1}{2}$). Пример изображения электронной конфигурации для атома ванадия приводится ниже:



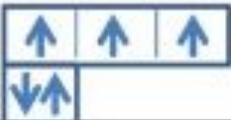

Электронная формула – это краткая буквенно-цифровая запись электронной структуры атома, в которой цифрами указывается главное квантовое число (номер энергетического уровня), буквами обозначаются орбитальное квантовое число и в качестве верхнего индекса записывается количество электронов на подуровне. Таким образом, электронная формула не может полностью отражать строение электронной оболочки атома. Для ванадия электронная формула имеет вид:



Часто пользуются сокращённой формой записи электронных формул, которые включают описание электронной конфигурации внешних энергетических оболочек атома и краткую запись заполненных внутренних орбиталей, соответствующих электронным структурам благородных газов. Например, в полной электронной формуле ванадия можно выделить часть электронной оболочки, соответствующую конфигурации аргона $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 = [\text{Ar}]$. Тогда сокращённая электронная формула ванадия будет выглядеть так:



Примеры построения электронных конфигураций атомов

Элемент	Электронная конфигурация	Применяемые правила
${}^2\text{He}$	$1s^2$	<ol style="list-style-type: none"> 1. Принцип наименьшей энергии 2. Принцип Паули
${}^3\text{Li}$	$1s^2 2s^1$	<ol style="list-style-type: none"> 1. Принцип наименьшей энергии 2. Принцип Паули
${}^7\text{N}$	$1s^2 2s^2 2p^3$ 	Правило Хунда: на 2p-орбитали расположены три электрона с одинаковыми спиновыми квантовыми числами
${}^{19}\text{K}$	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^1$	Принцип наименьшей энергии: $E_{4s} < E_{3d}$
${}^{24}\text{Cr}$	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^5 4s^1$ 	<ol style="list-style-type: none"> 1. Правило Хунда 2. «Проскок электрона» - переход одного s-электрона на d-орбиталь, так как симметричные конфигурации d5 и d10 очень устойчивы
${}^{57}\text{La}$	$[\text{Xe}] 5d^1 6s^2$	<ol style="list-style-type: none"> 1. Указываются только валентные электроны. 2. «Аномалия» ($5d^1$, а не $4f^1$) связана с близостью по энергии соответствующих орбиталей

Периодический закон и периодическая система химических элементов

Периодический закон является наиболее общим законом химии, позволяющим прогнозировать свойства элементов и их соединений в зависимости от строения их атомов. Он был открыт в 1869г. русским учёным Дмитрием Ивановичем Менделеевым, когда о строении атома ещё ничего не было известно. Д.И.Менделееву удалось проследить закономерности изменения свойств элементов по мере увеличения их атомной массы. Впоследствии, когда выявилась связь атомной массы с фундаментальной характеристикой атома – зарядом ядра – *Периодический закон* приобрёл свою современную формулировку:

Свойства химических элементов и образуемых ими веществ находятся в периодической зависимости от заряда ядра их атомов.

Периодическая зависимость означает повторение определённой последовательности изменения свойств атомов по мере увеличения заряда их ядер. Наглядным представлением Периодического закона является *периодическая система химических элементов*, основными структурными элементами которой являются – *период, группа и подгруппа*.

Периодом с номером n называют горизонтальный ряд элементов, в котором по мере увеличения заряда ядра атомов происходит заполнение электронами внешнего энергетического уровня от ns - до np -подуровня.

В периоде слева направо происходит последовательное изменение строения внешней электронной оболочки атомов, что приводит к изменению их свойств – от металлических к неметаллическим. Заканчивается период всегда элементом с устойчивой внешней оболочкой, соответствующей инертному газу.

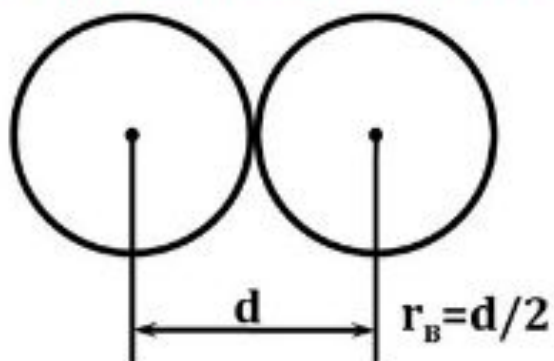
Номер периода, в котором расположен элемент, совпадает с главным квантовым числом, соответствующем внешнему энергетическому уровню. Элементы, у которых происходит заполнение внешнего s -подуровня, называют s -элементами, если заполняется внешний p -подуровень – p -элементами. В больших периодах содержатся также d -элементы, у которых достраивается внутренний d -подуровень, и f -элементы с достраивающимся глубинным f -подуровнем.

Основные характеристики атомов

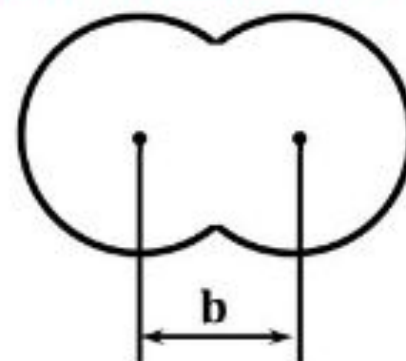
- Размер атома
- Энергетические характеристики, включая потенциал ионизации и сродство к электрону
- Спектральные характеристики
(спектры испускания и поглощения)
- Магнитные свойства

Атомные радиусы

Ван-дер-Ваальсов радиус (r_B)

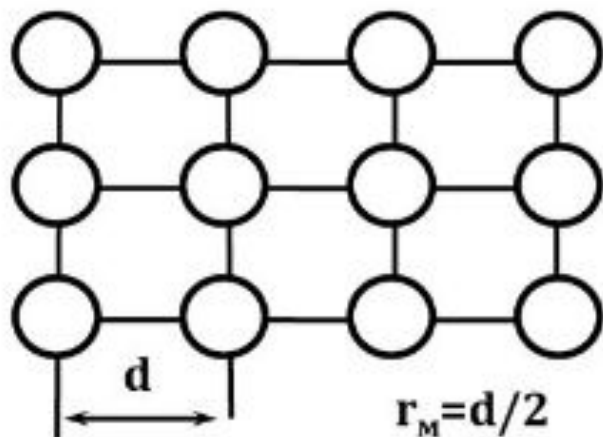


Ковалентный радиус (r_K)

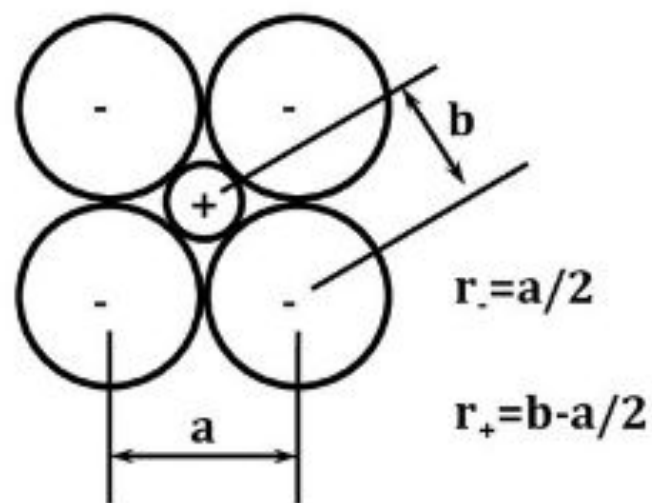


b - длина связи

Металлический радиус (r_M)

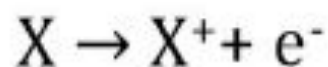


Ионные радиусы



Потенциал ионизации

Минимальная энергия, которую необходимо затратить для удаления электрона из атома, находящегося в основном состоянии



- ПЕРВЫЙ ПОТЕНЦИАЛ ИОНИЗАЦИИ (I_1)

$$I_1 < I_2 < I_3 \dots < I_n$$

Сродство к электрону

Способность атома присоединять электрон с образованием отрицательно заряженного иона количественно характеризуется изменением энтальпии (энергии) процесса $X + e^{-} \rightarrow X^{-}$

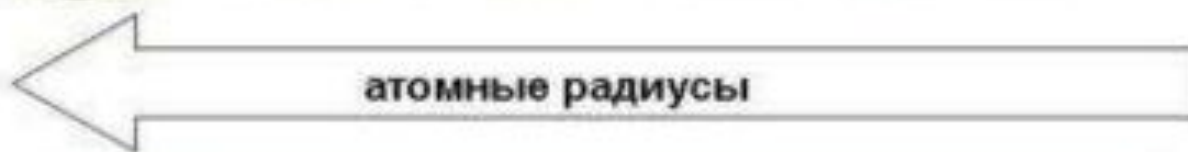
- СРОДСТВО К ЭЛЕКТРОНУ (A_e)

В периоде по мере увеличения заряда ядра атомов и заполнения внешней электронной оболочки взаимодействие внешних электронов с ядром усиливается. Поэтому в периоде слева направо увеличивается неметалличность атомов, а металличность – ослабевает. При этом потенциалы ионизации, энергия сродства к электрону и электроотрицательность атомов возрастают, а радиусы Ван-дер-Ваальса уменьшаются. Наибольшими значениями потенциала ионизации обладают благородные газы, а максимальное значение сродства к электрону характерно для *p*-элементов VII группы.

В главных подгруппах сверху вниз по мере увеличения числа энергетических уровней, возрастает радиус атомов, и происходит ослабление взаимодействия внешних электронов с ядром. Поэтому в главных подгруппах сверху вниз усиливаются металлические свойства, а неметаллические – ослабевают. Потенциалы ионизации, энергия сродства к электрону и электроотрицательность атомов в группе уменьшаются.

Периодическая система элементов

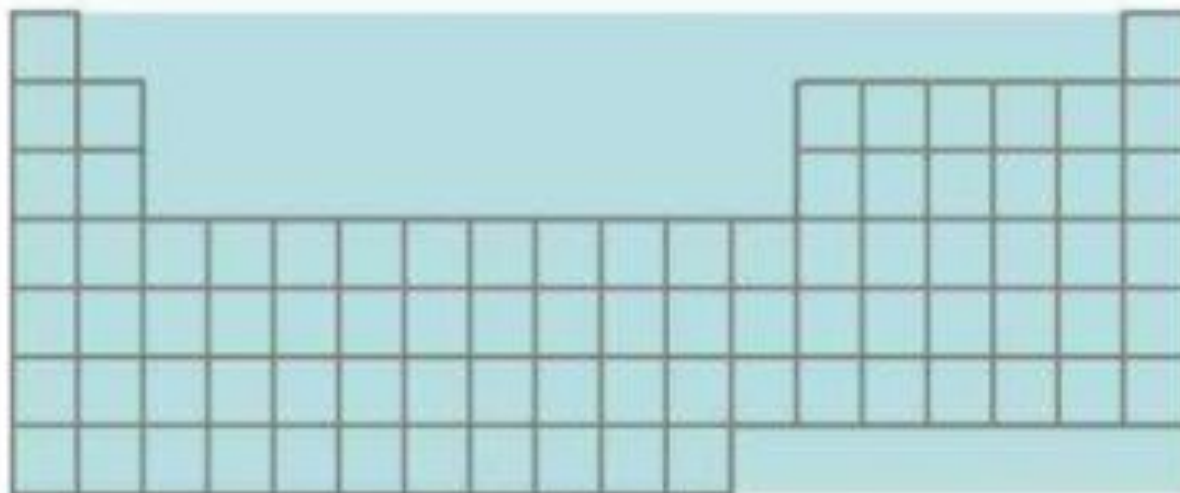
1,52 1,11 0,86 0,77 0,73 0,74 0,72



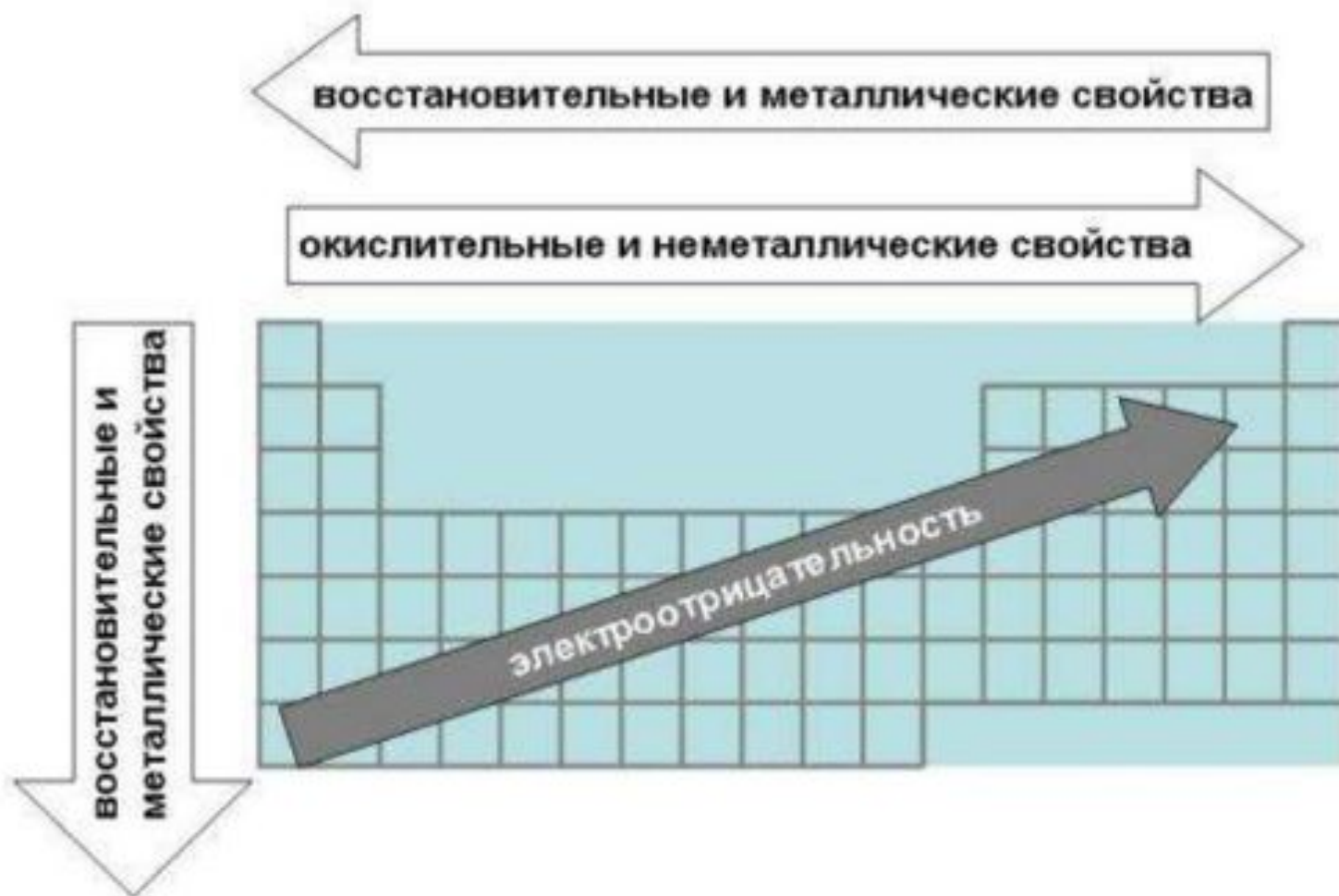
1,86



2,32



Периодическая система элементов



Магнитный момент

$\mu_{\text{эфф}}$ – Эффективный магнитный момент

$Z < 30$ – основной вклад: собственный магнитный

$$\mu_{\text{эфф}} = 2\sqrt{S(S-1)}$$

момент электрона μ_B

$S = \sum m_s$ – суммарный спин атома

Т.к. в суммарный спин атома вклад вносят только

неспаренные электроны (n), то

$$\mu_{\text{эфф}} = 2\sqrt{n(n+2)}$$

$Z \gg 30$ – основной вклад: спин-орбитальное

взаимодействие

$\mu_{\text{эфф}} = 0$ (атом или ион, все электроны которого спарены)

ДИАМАГНТИК

$\mu_{\text{эфф}} \neq 0$ (атом или ион, имеющий неспаренные электроны)

ПАРАМАГНТИК