

Строение атомов и молекул  
химического вещества с  
позиции квантовой теории

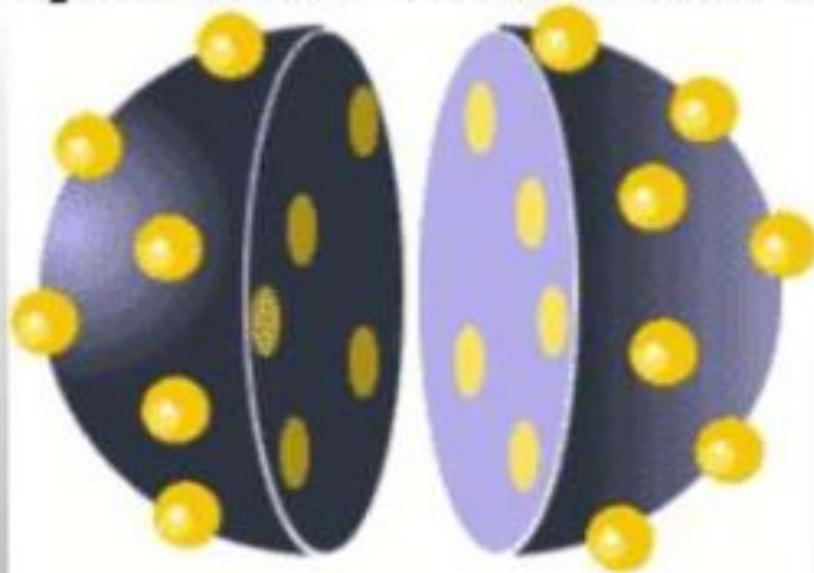
Слово «атом» впервые упоминалось в трудах философов Древней Греции, и в переводе оно означает «неделимый». Не имея современных приборов, философ Демокрит, используя логику и наблюдательность, пришел к выводу, что любое вещество не может дробиться бесконечно, и в итоге должна остаться какая-то неделимая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



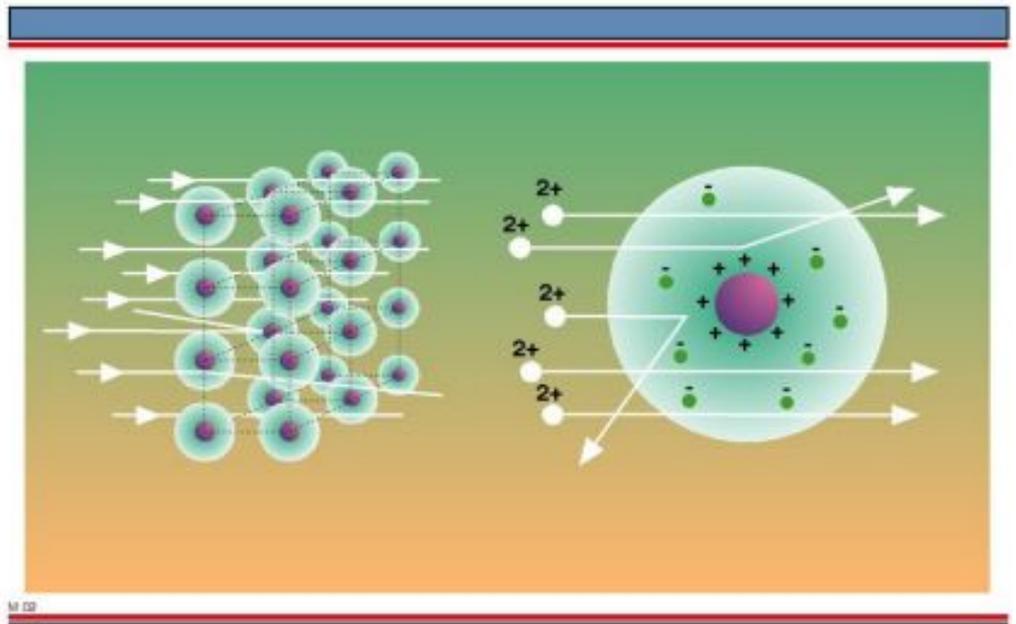
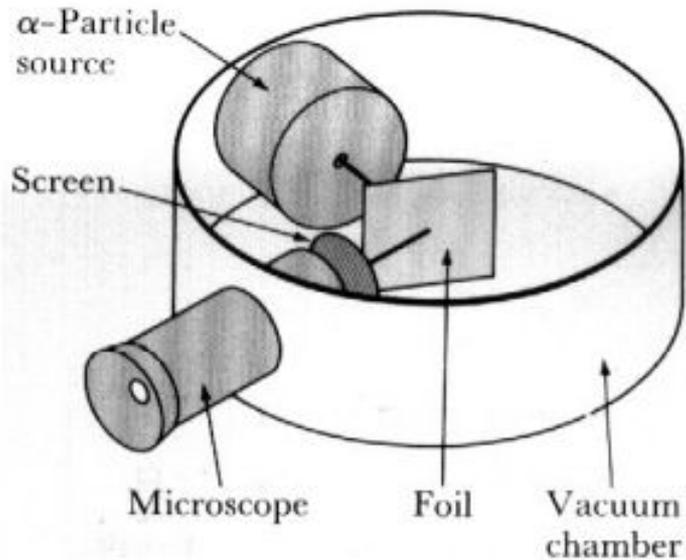
Пудинговая модель

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.

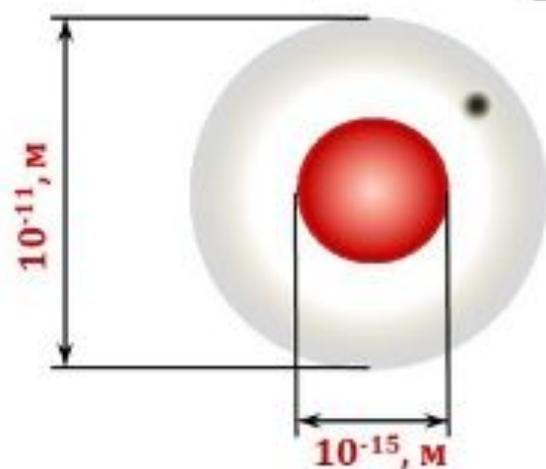
Бор выдвинул предположение, что атом водорода (система протон-электрон) может находиться только в определенных стационарных энергетических состояниях (электрон – на определенных орбитах), причем одно из них соответствует минимуму энергии и является основным (невозбужденным). Испускание или поглощение 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

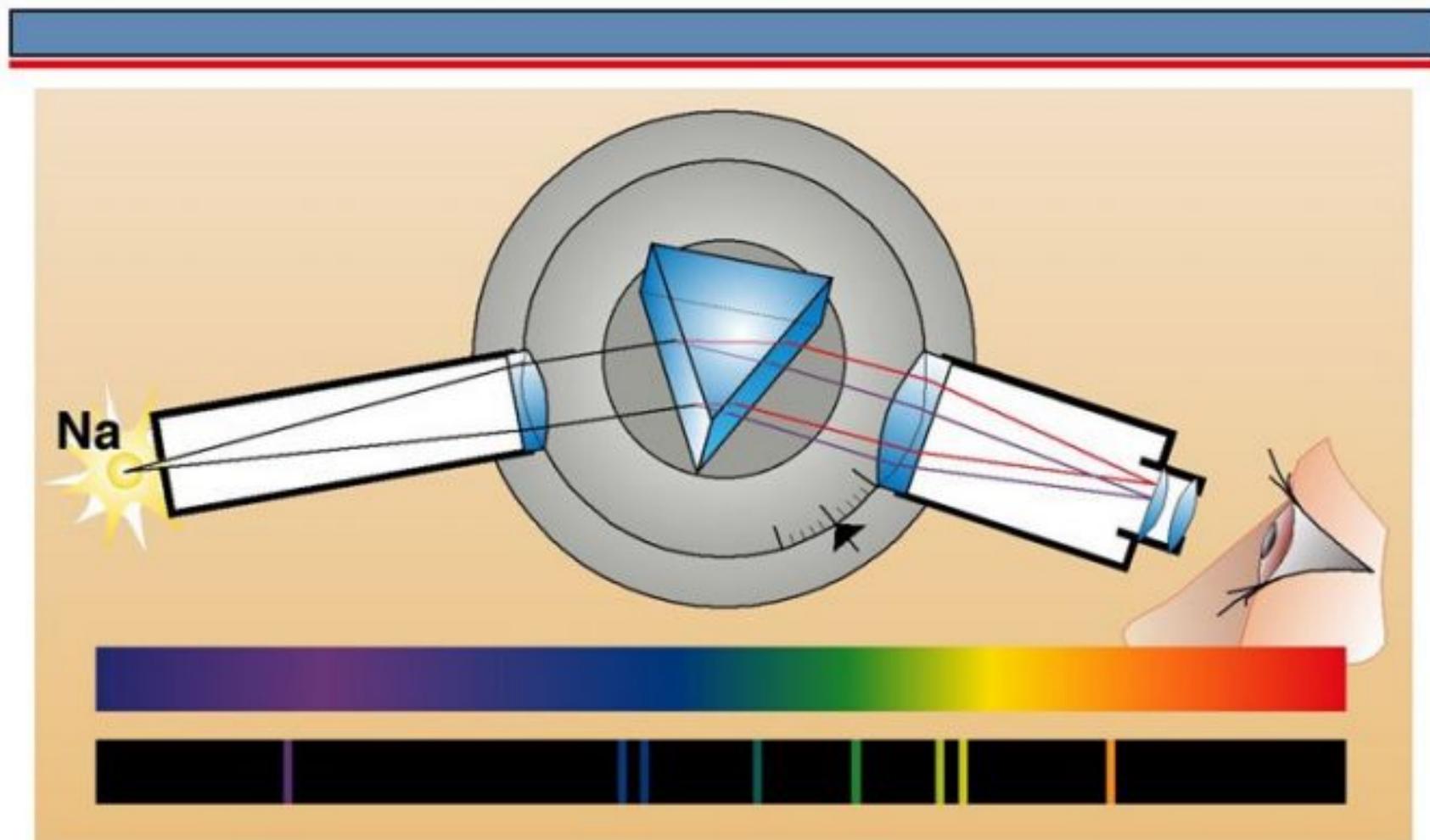
# Квантование энергии электрона в атоме

- ◆ 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  $\Delta E$  – энергия, Дж;  $\nu$  – частота,  $\text{с}^{-1}$ ;  $h = 6,626 \cdot 10^{-34}$  Дж с (постоянная Планка).



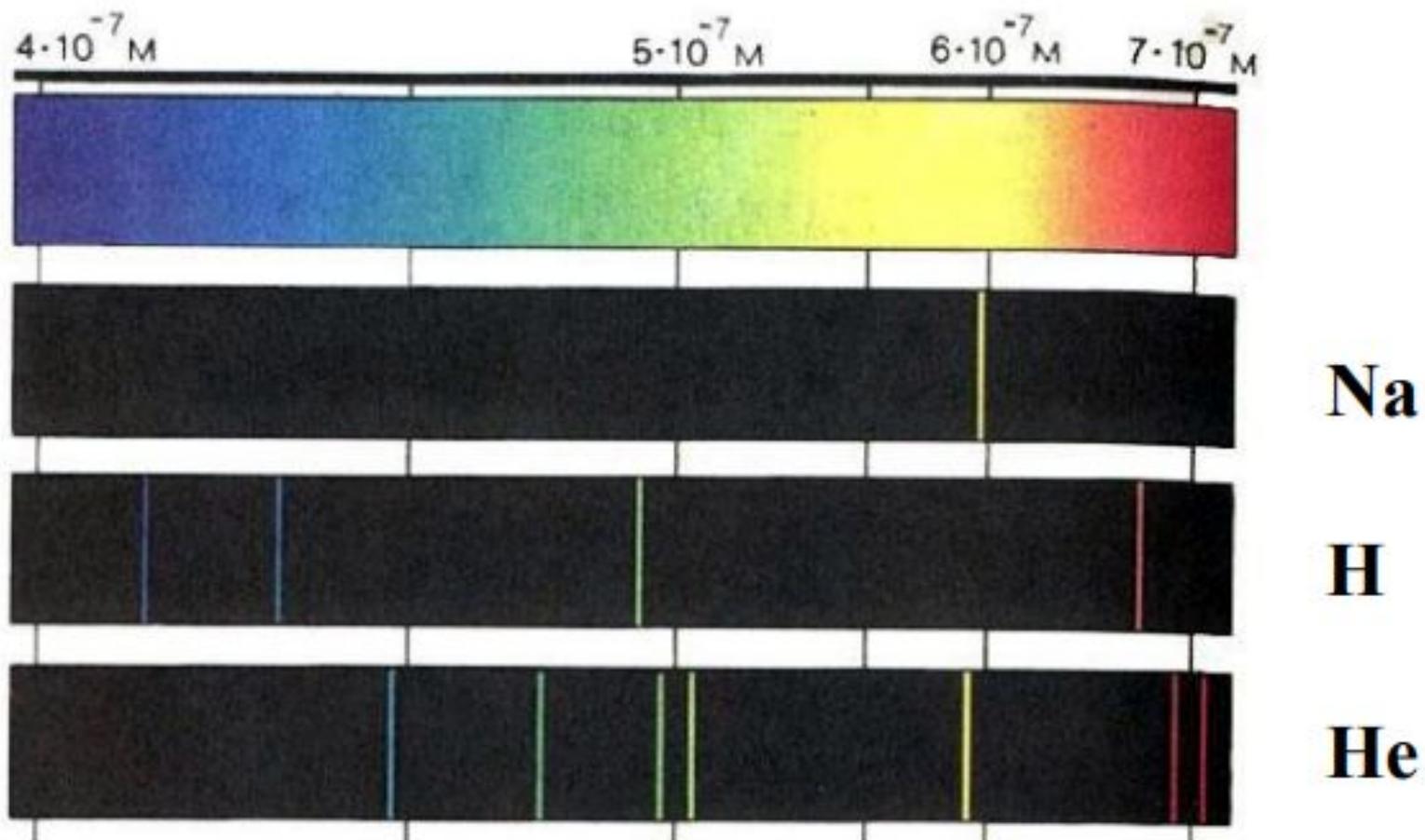
Макс ПЛАНК  
(1858 – 1947)

# Оптическая схема спектроскопа

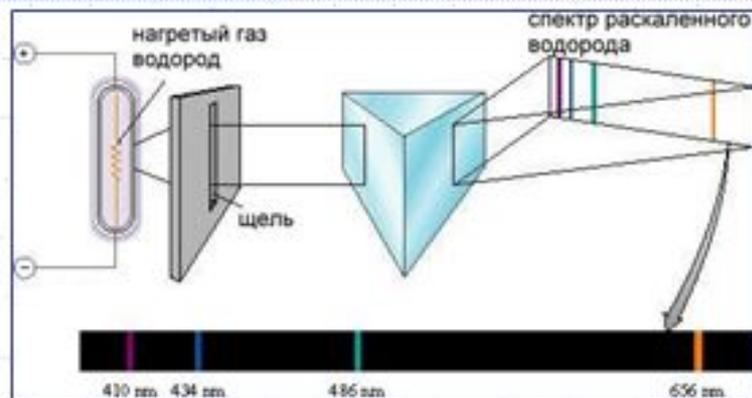


# Спектры излучения (Na, H, He)

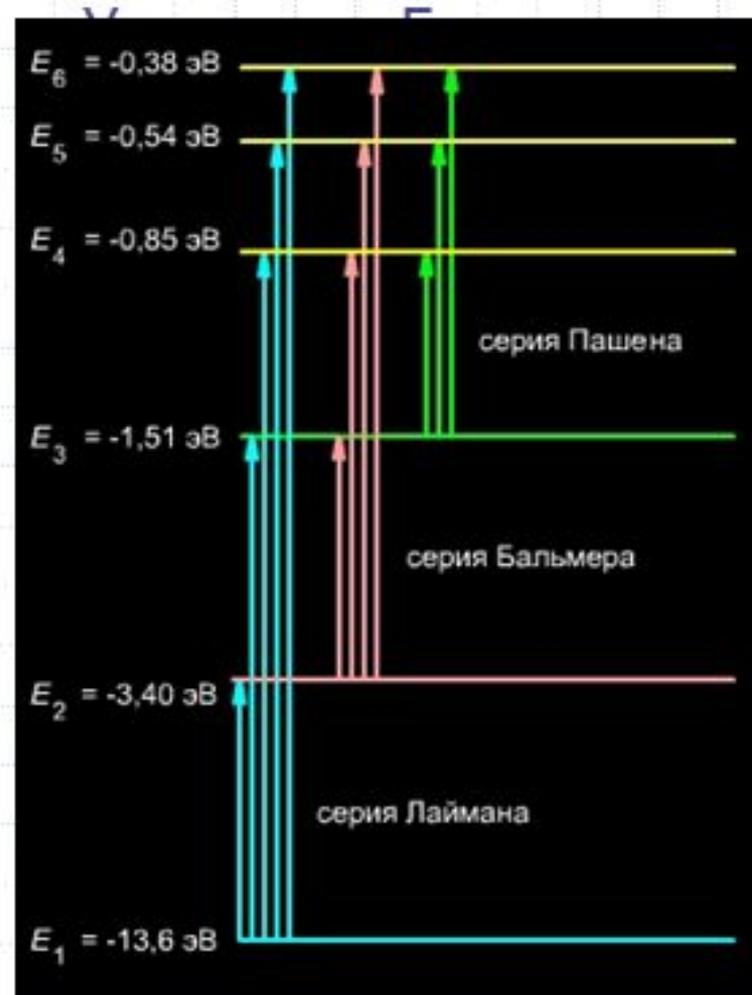
## Желтая линия натрия при 589 нм



# 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.)

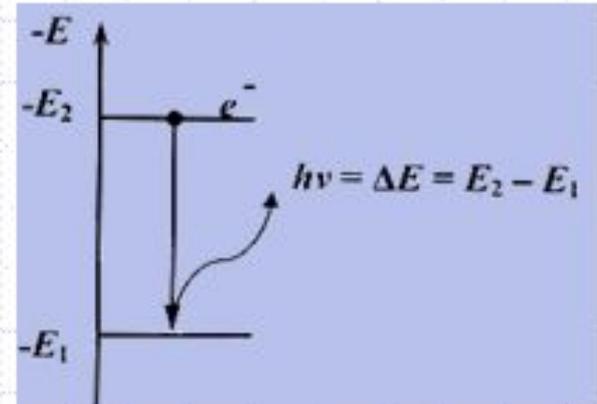


# Постулаты Н.Бора

- ◆ 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

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

( $\Delta E$  – 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,  $\nu$  – частота излучения,  $\lambda$  – длина волны.

## Гипотеза де Бройля (1924 г.)



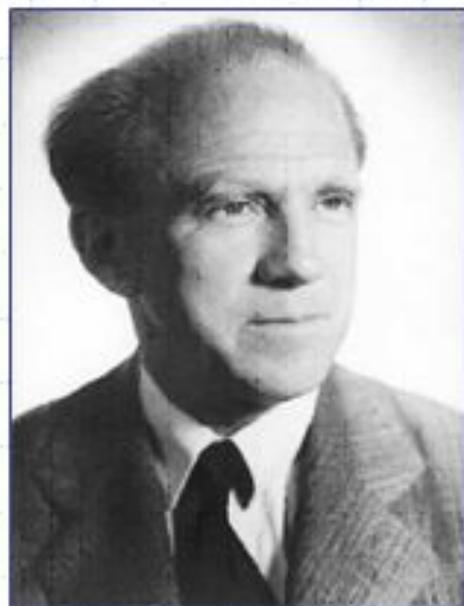
Луи де БРОЙЛЬ  
(1892 – 1987)

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

$$\lambda = h/mv,$$

где  $m$  – масса частицы,  $v$  – ее скорость,  $h$  – постоянная Планка;  $\lambda$  – 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  $x$ ;  $\Delta x$  – 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  $\psi$  – 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

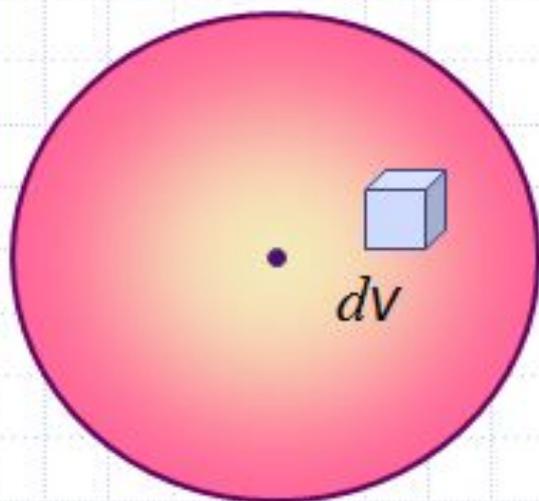
$$\nabla^2 \psi = \frac{\partial^2 \dots}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \dots}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \dots}{\partial z^2}$$

Оператор Лапласа

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

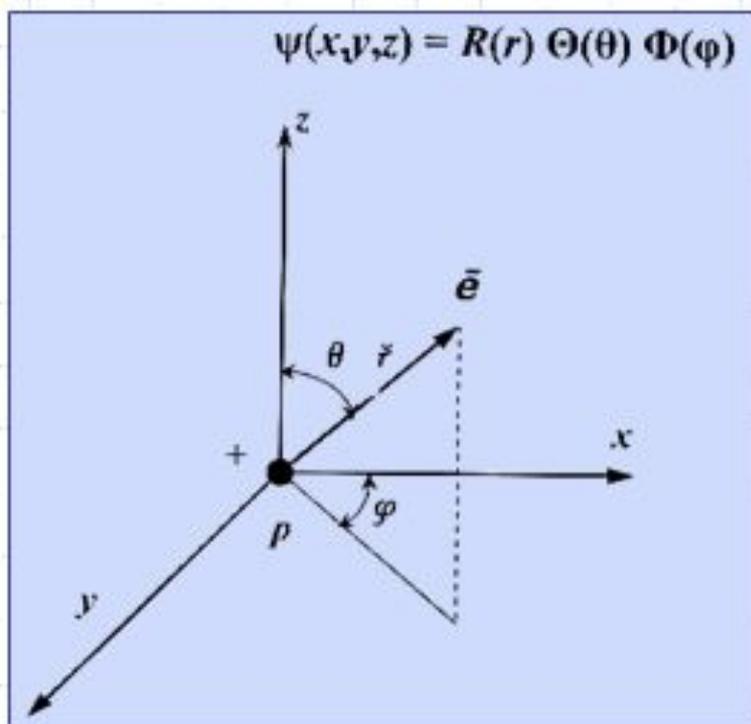
Волновое уравнение в операторной форме

# Свойства волновой функции



- ❖ Волновая функция  $\psi$  характеризует вероятность нахождения электрона в атоме.
- ❖ Волновая функция  $\psi$  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  $r, \theta, \varphi$ .
- ◆ 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:

$$E = E_k$$

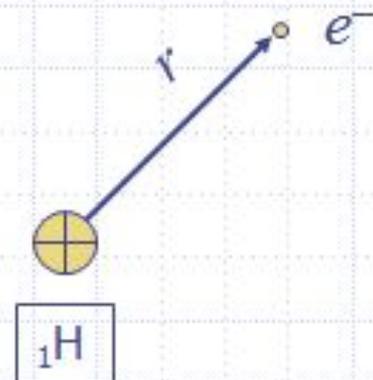
◆ В атоме:  $E = E_k + E_p$

◆ 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

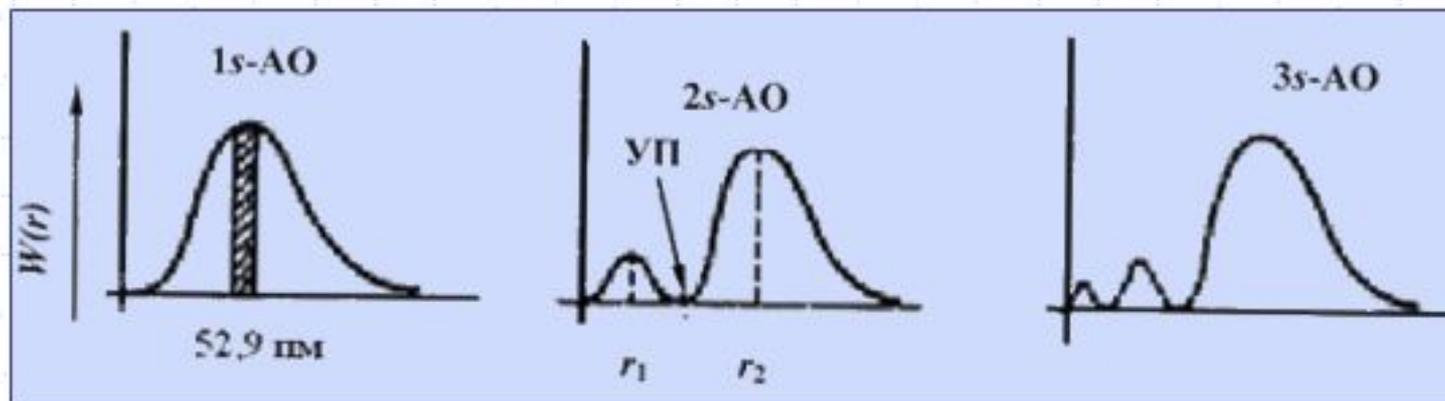
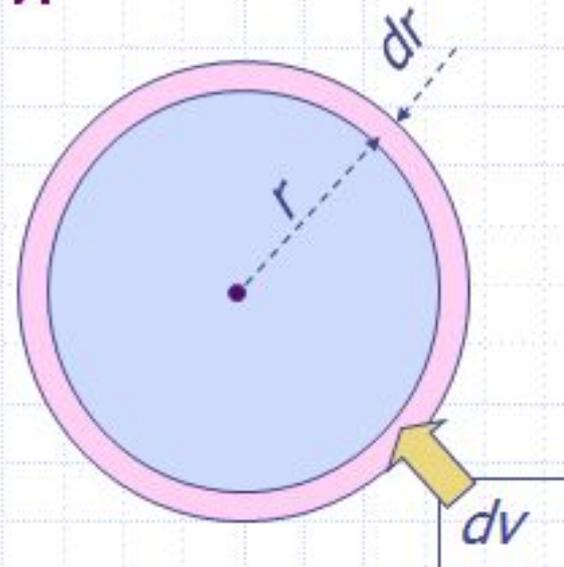
# Атомная орбиталь

- ◆ 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

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

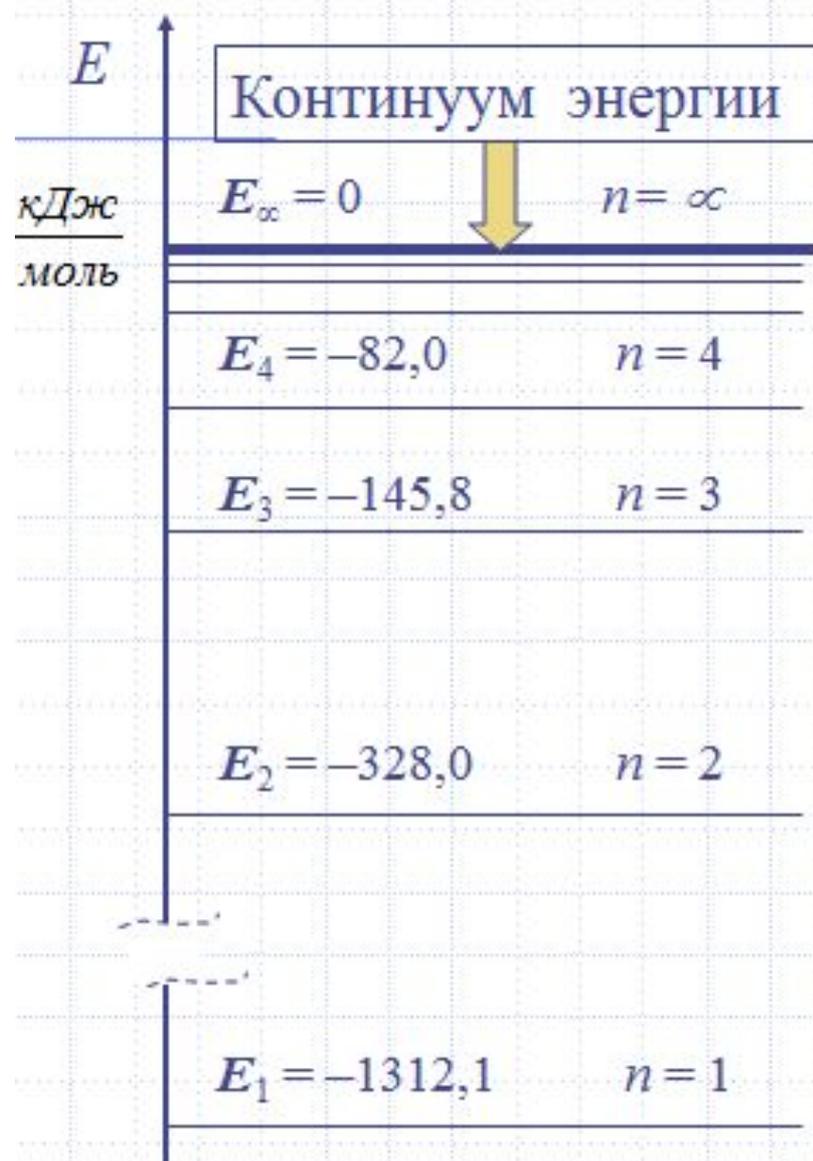
Целые  
положительные  
числа

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.

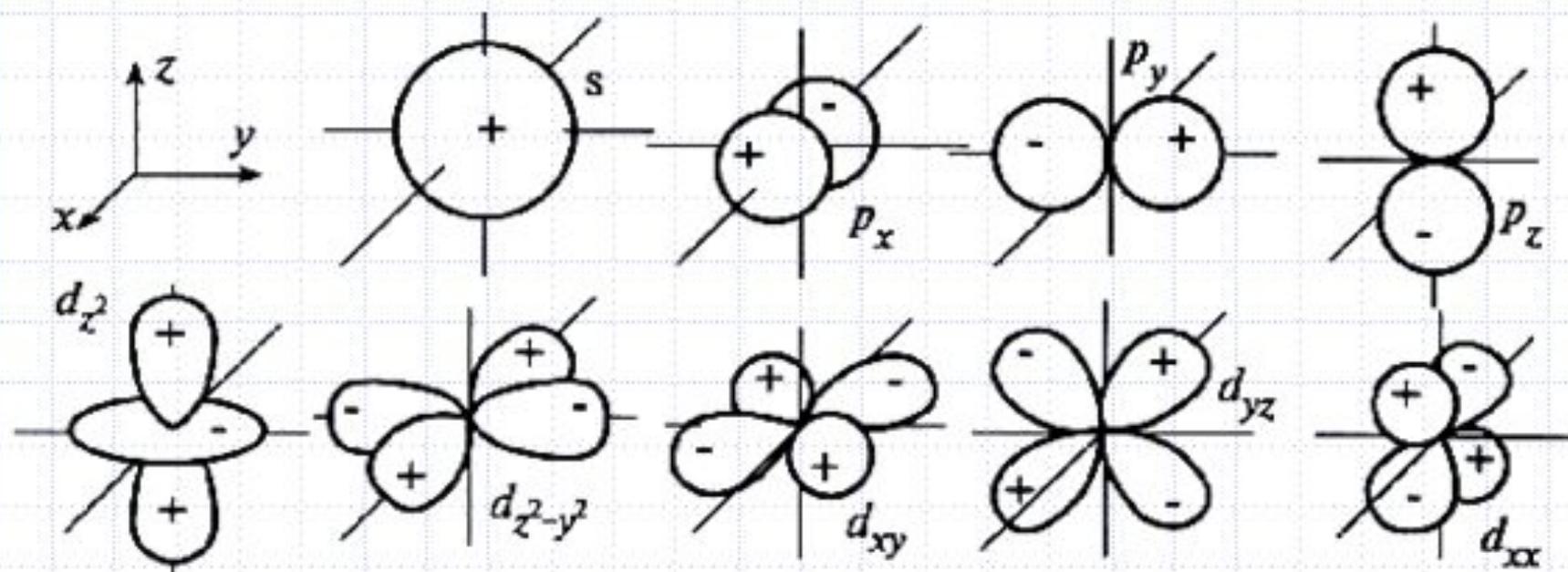
## Магнитное спиновое квантовое число $m_s$

- ◆ 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

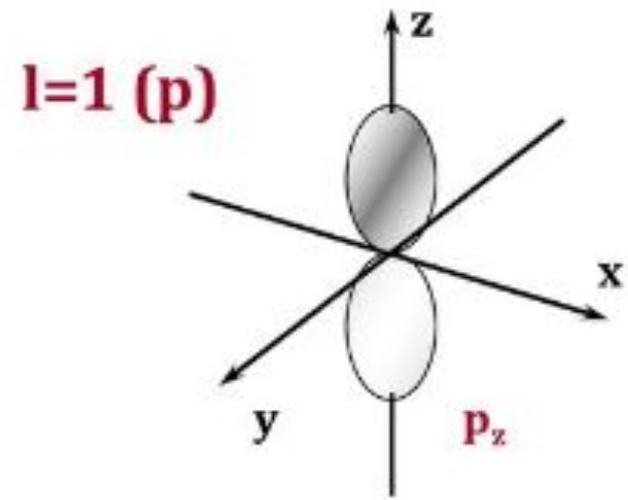
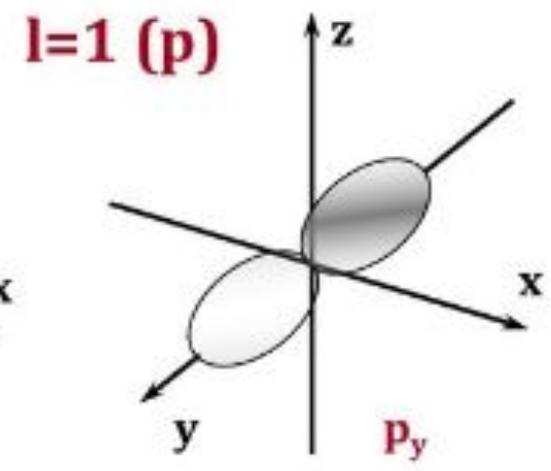
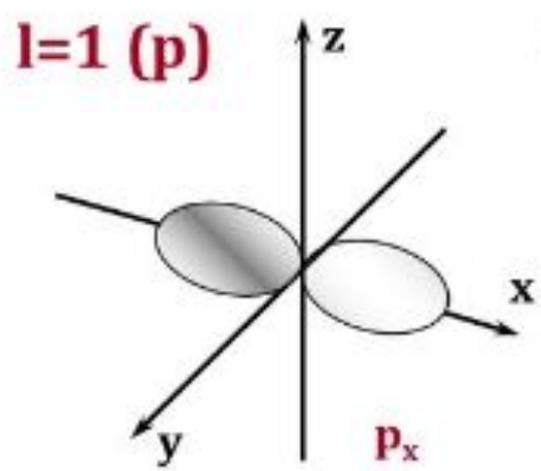
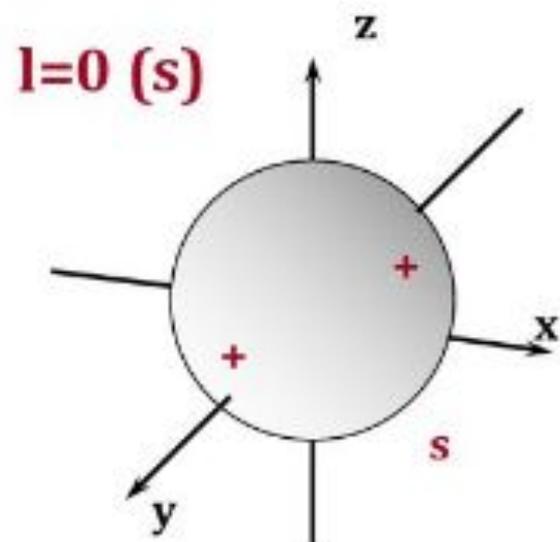
Квантовое число	Принимаемые значения	Характеризуемое свойство	Примечание
Главное ( $n$ )	1, 2, 3, ..., $\infty$	Энергия (E) уровня Среднее расстояние от ядра	$n=\infty$ - отсутствует взаимодействие с ядром. $E = 0$
Орбитальное ( $l$ )	0, 1, ..., (n-1) Всего n значений для данного n	Орбитальный момент 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



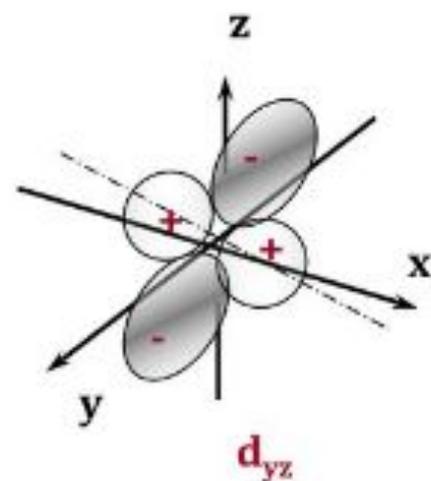
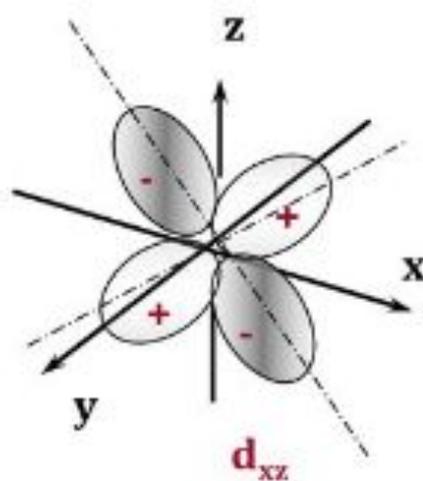
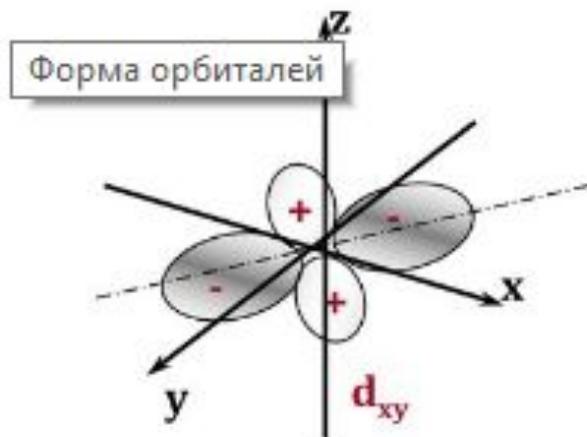
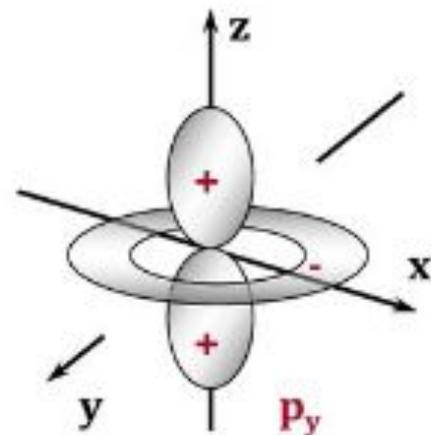
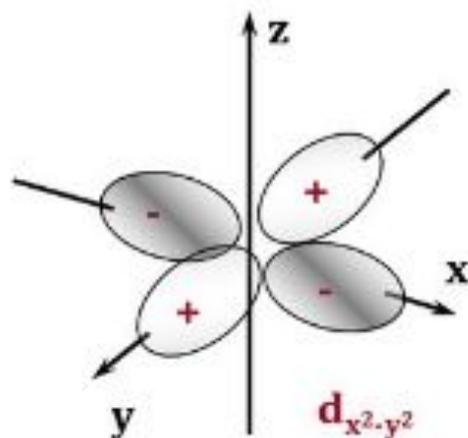
Изображения орбиталей ("+" и "-" знаки волновой функции)

# Форма орбиталей



# Форма орбиталей

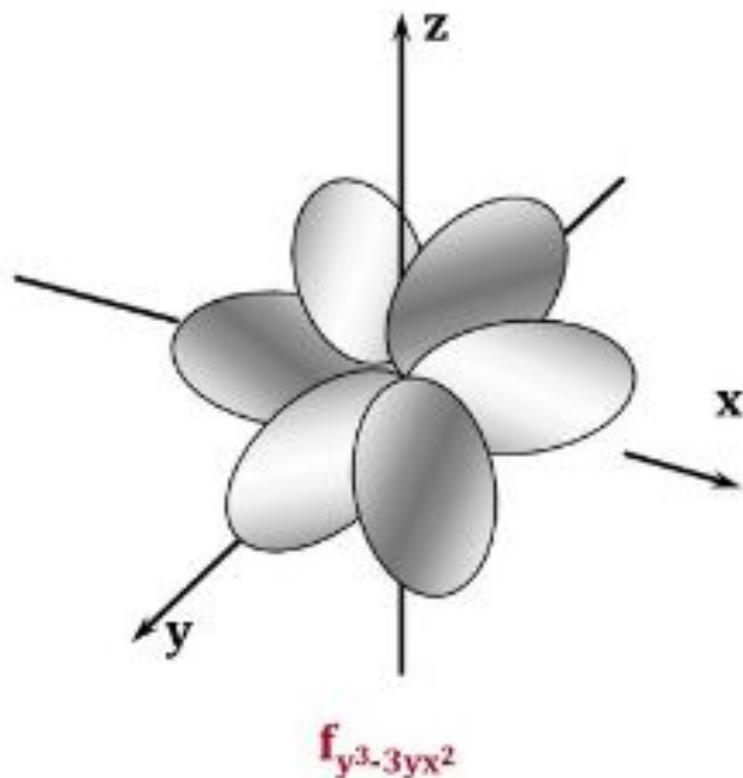
$l=2$  (d)



# Форма орбиталей

$l=3$  (f)

При Форма орбиталей **f** из  
семи орбиталей



# Основные принципы заполнения орбиталей электронами

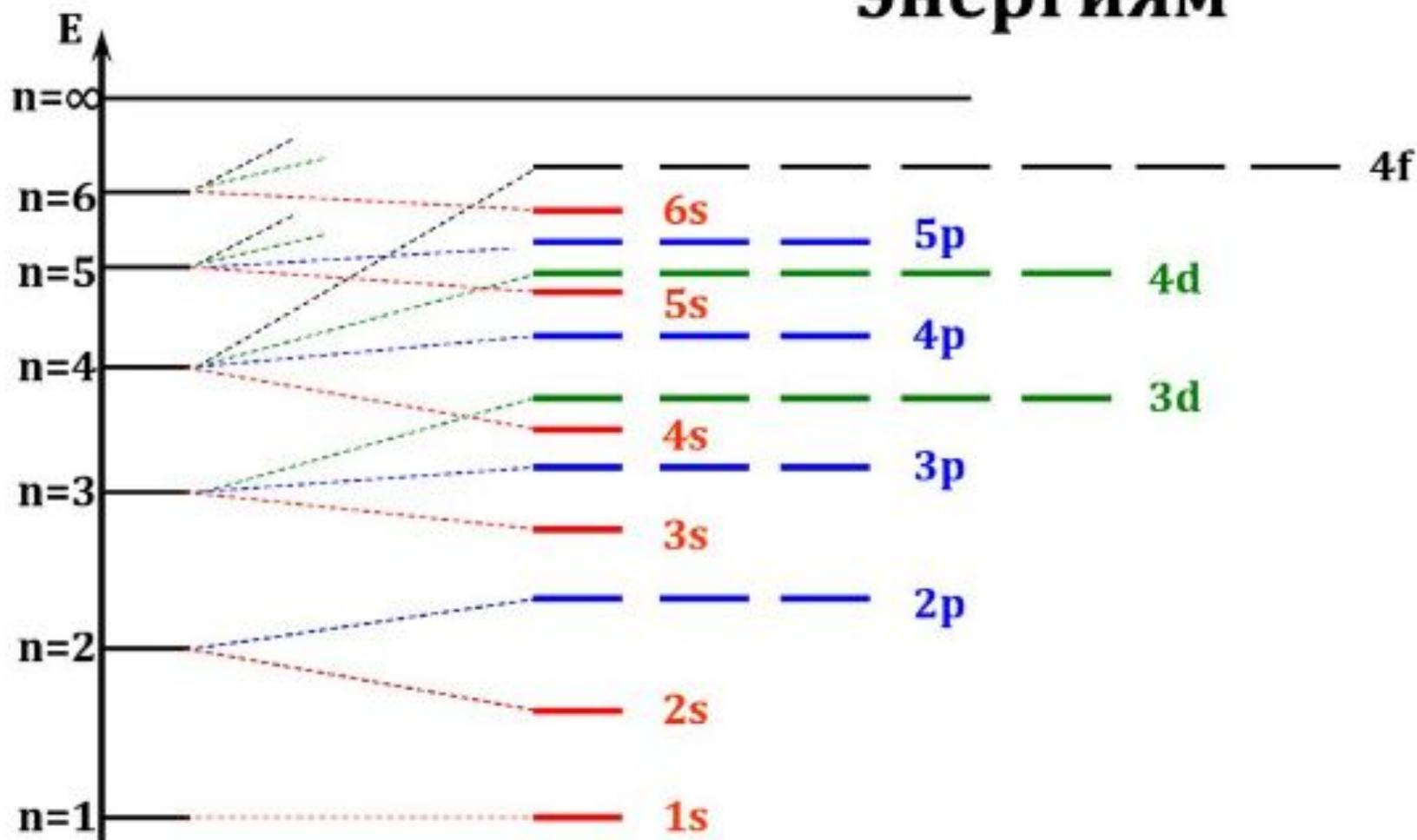
Основные принци

**$Z_{\text{эфф}}$  – 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

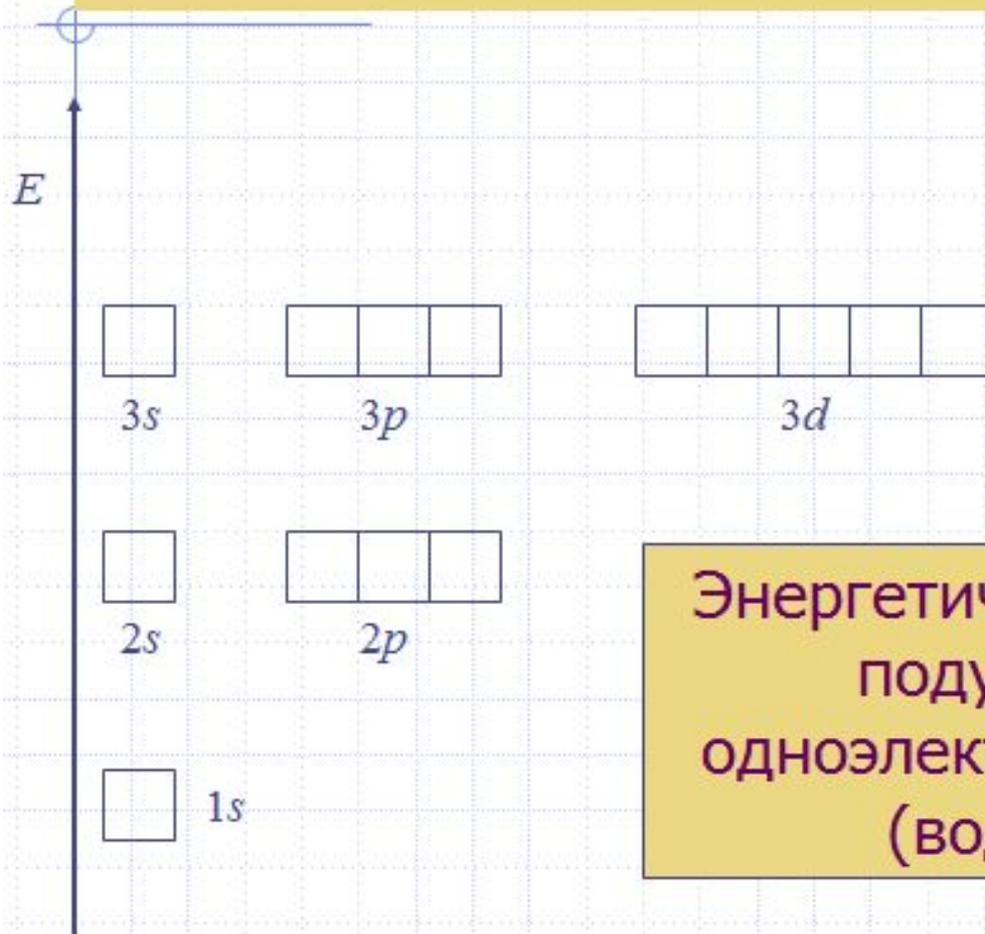
## 2. Принцип Паули

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 ( $\Sigma m_s$ ) был максимален.

# Энергетическая диаграмма



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

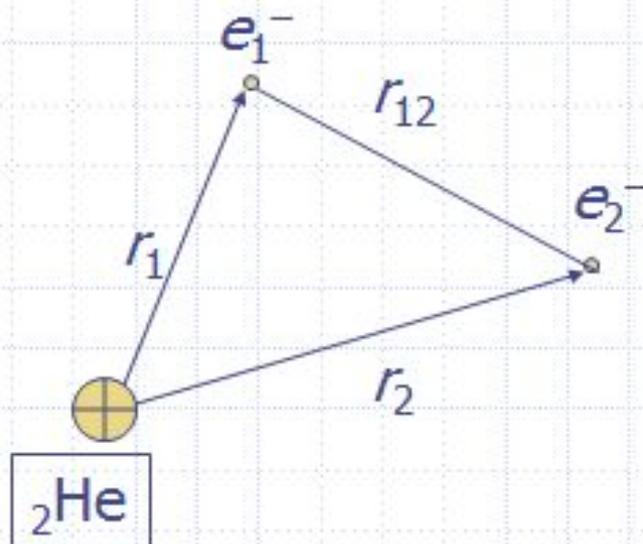
# Уравнение Шрёдингера для многоэлектронного атома (водородоподобная модель)

◆ Притяжение к ядру:

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

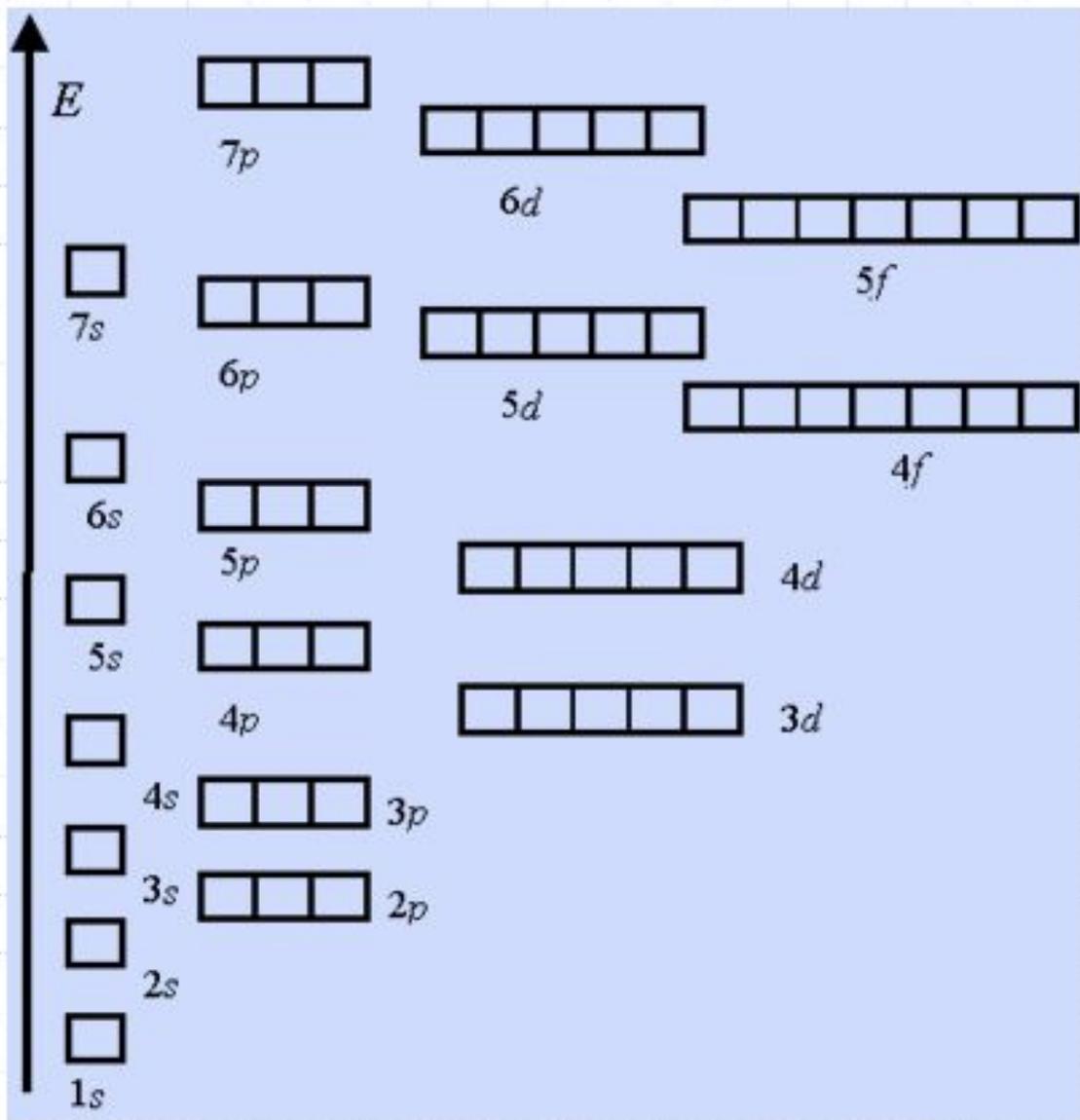
◆ Отталкивание электронов:

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



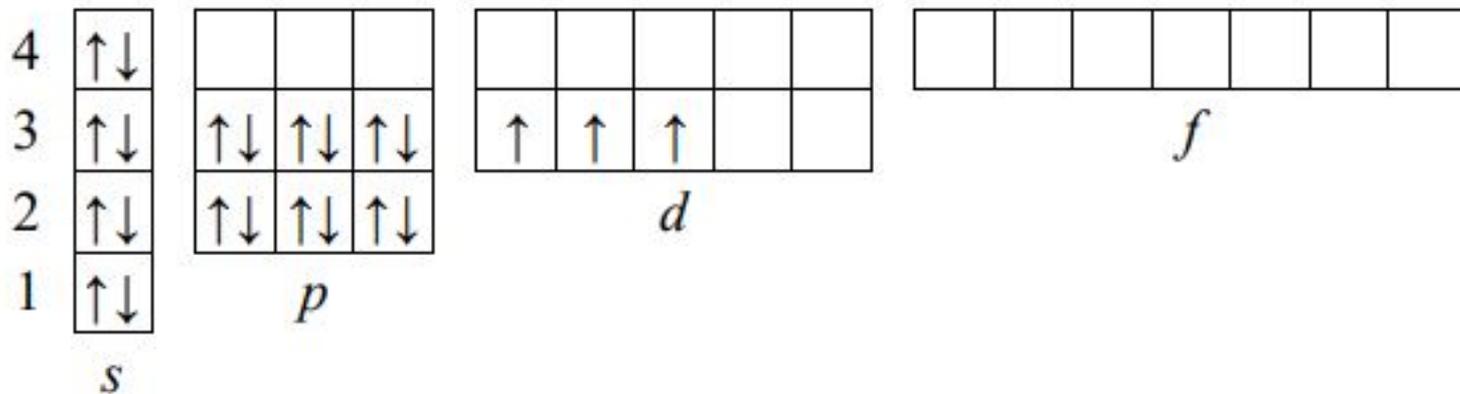
$$\nabla_1^2 \psi + \nabla_2^2 \psi + \frac{8\pi^2 m}{h^2} (E - \sum E_p^i) \psi = 0$$

# Энергетическая диаграмма многоэлектронного атома

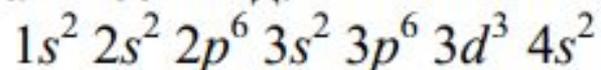


Для наглядного изображения электронной структуры атома существуют два способа: электронно-структурные формулы и электронные формулы. Электронно-структурная формула представляет собой графическую схему в виде «квантовых ячеек». Атомная орбиталь в схеме изображается небольшим квадратом, а электроны – стрелками 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  $l$ :

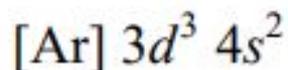
вертикальные ряды (столбцы) соответствуют определённому значению магнитного квантового числа  $m_l$  ; значение спинного квантового числа соответствует направлению стрелки в ячейке («↑» –  $m_s = +\frac{1}{2}$ , «↓» –  $m_s = -\frac{1}{2}$  ). Пример изображения электронной конфигурации для атома ванадия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



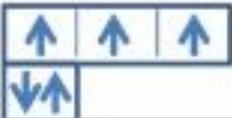
**Электронная формула** – это краткая буквенно-цифровая запись электронной структуры атома, в которой цифрами указывается главное квантовое число (номер энергетического уровня), буквами обозначаются орбитальное квантовое число и в качестве верхнего индекса записывается количество электронов на подуровне. 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"> <li>1. Принцип наименьшей энергии</li> <li>2. Принцип Паули</li> </ol>
${}^3\text{Li}$	$1s^2 2s^1$	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. Принцип наименьшей энергии</li> <li>2. Принцип Паули</li> </ol>
${}^7\text{N}$	$1s^2 2s^2 2p^3$ 	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"> <li>1. Правило Хунда</li> <li>2. «Проскок электрона» - переход одного s-электрона на d-орбиталь, так как симметричные конфигурации d5 и d10 очень устойчивы</li> </ol>
${}^{57}\text{La}$	$[\text{Xe}] 5d^1 6s^2$	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. Указываются только валентные электроны.</li> <li>2. «Аномалия» (<math>5d^1</math>, а не <math>4f^1</math>) связана с близостью по энергии соответствующих орбиталей</li> </ol>

## **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.

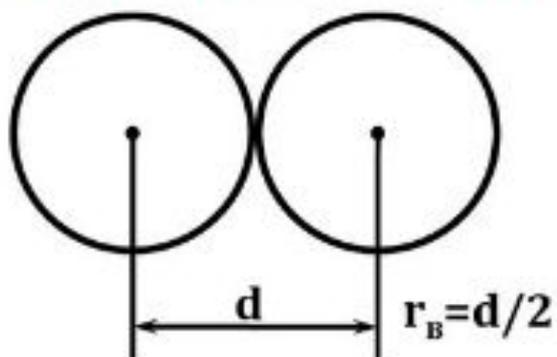
Номер периода, в котором расположен элемент, совпадает с главным квантовым числом, соответствующем внешнему энергетическому уровню. Элементы, у которых происходит заполнение внешнего  $s$ -подуровня, называют  $s$ -элементами, если заполняется внешний  $p$ -подуровень –  $p$ -элементами. В больших периодах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

# Основные характеристики атомов

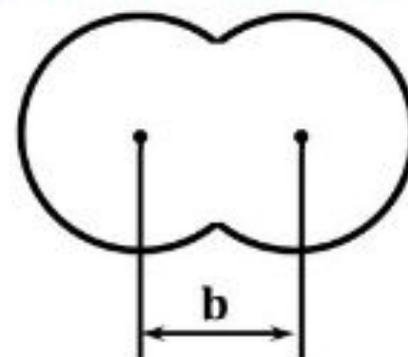
- Размер атома
- Энергетические характеристики, включая потенциал ионизации и сродство к электрону
- Спектральные характеристики  
(спектры испускания и поглощения)
- Магнитные свойства

# Атомные радиусы

Ван-дер-Ваальсов радиус ( $r_B$ )

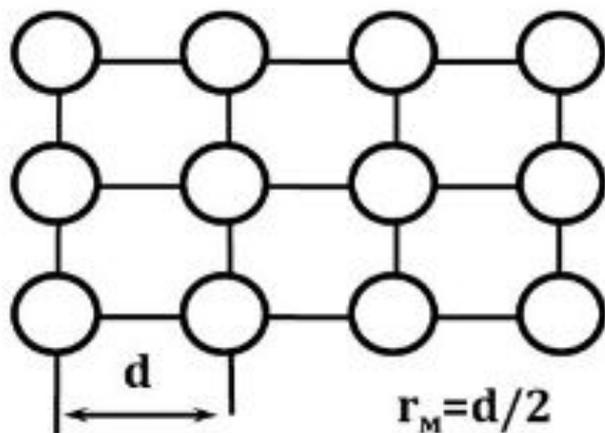


Ковалентный радиус ( $r_K$ )

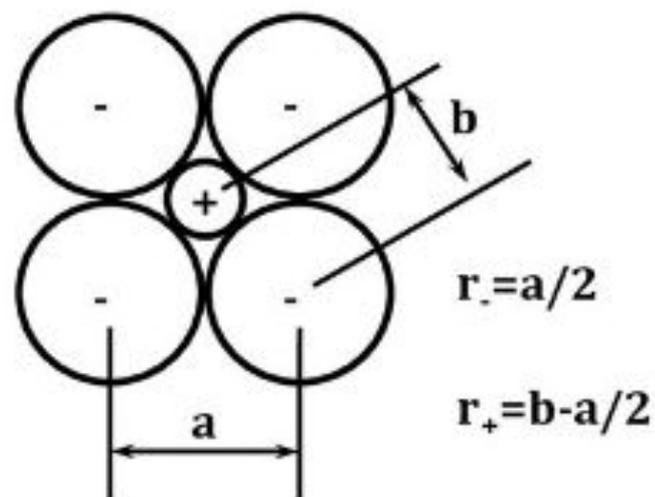


$b$  - длина связи

Металлический радиус ( $r_M$ )

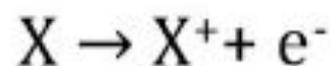


Ионные радиусы



## 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  $X + e^{-} \rightarrow X^{-}$

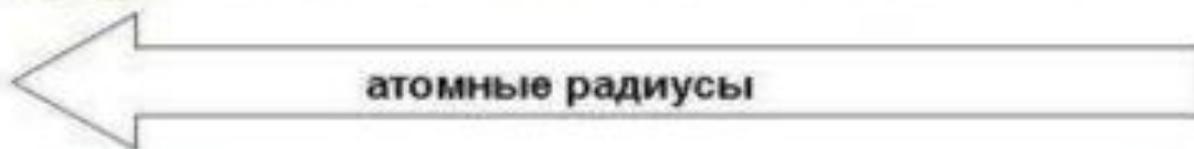
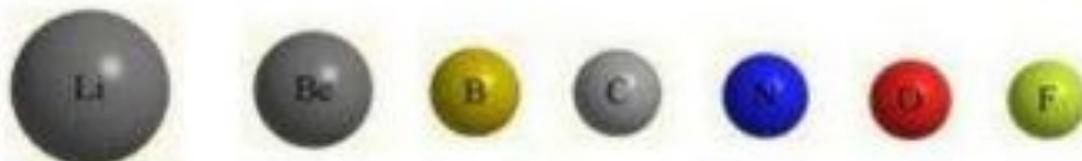
- СРОДСТВО К ЭЛЕКТРОНУ ( $A_e$ )

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

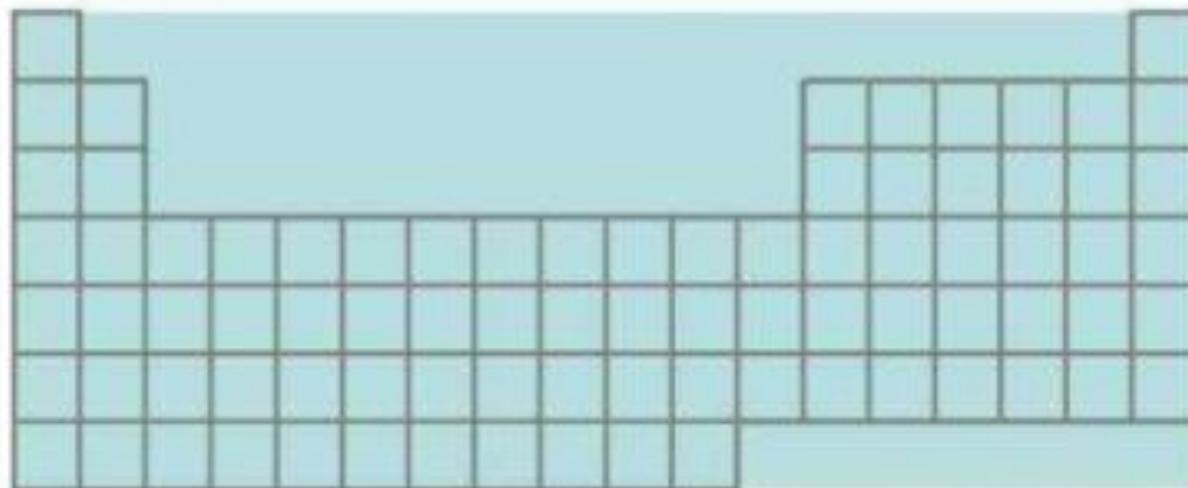
1,52    1,11    0,86    0,77    0,73    0,74    0,72



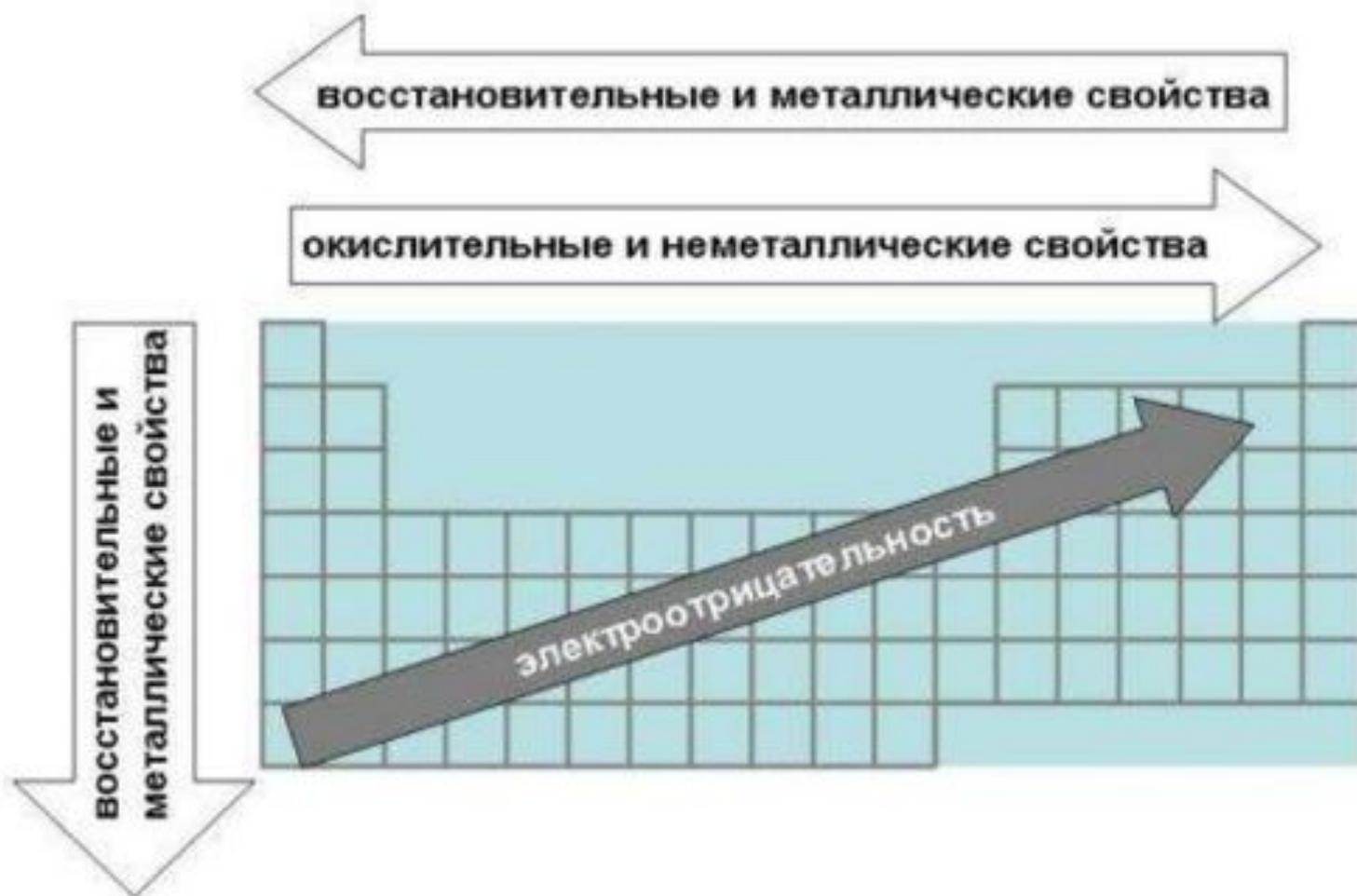
1,86



2,32



# Периодическая система элементов



# Магнитный момент

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

$Z < 30$  – основной вклад: собственный магнитный

$$\mu_{\text{эфф}} = 2\sqrt{S(S-1)} \quad \text{момент электрона } \mu_B$$

$S = \sum m_s$  – 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)

*ДИАМАГНЕТИК*

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

*ПАРАМАГНЕТИК*