

**Строение и свойства  
атомов в свете  
квантово-  
механической  
теории**

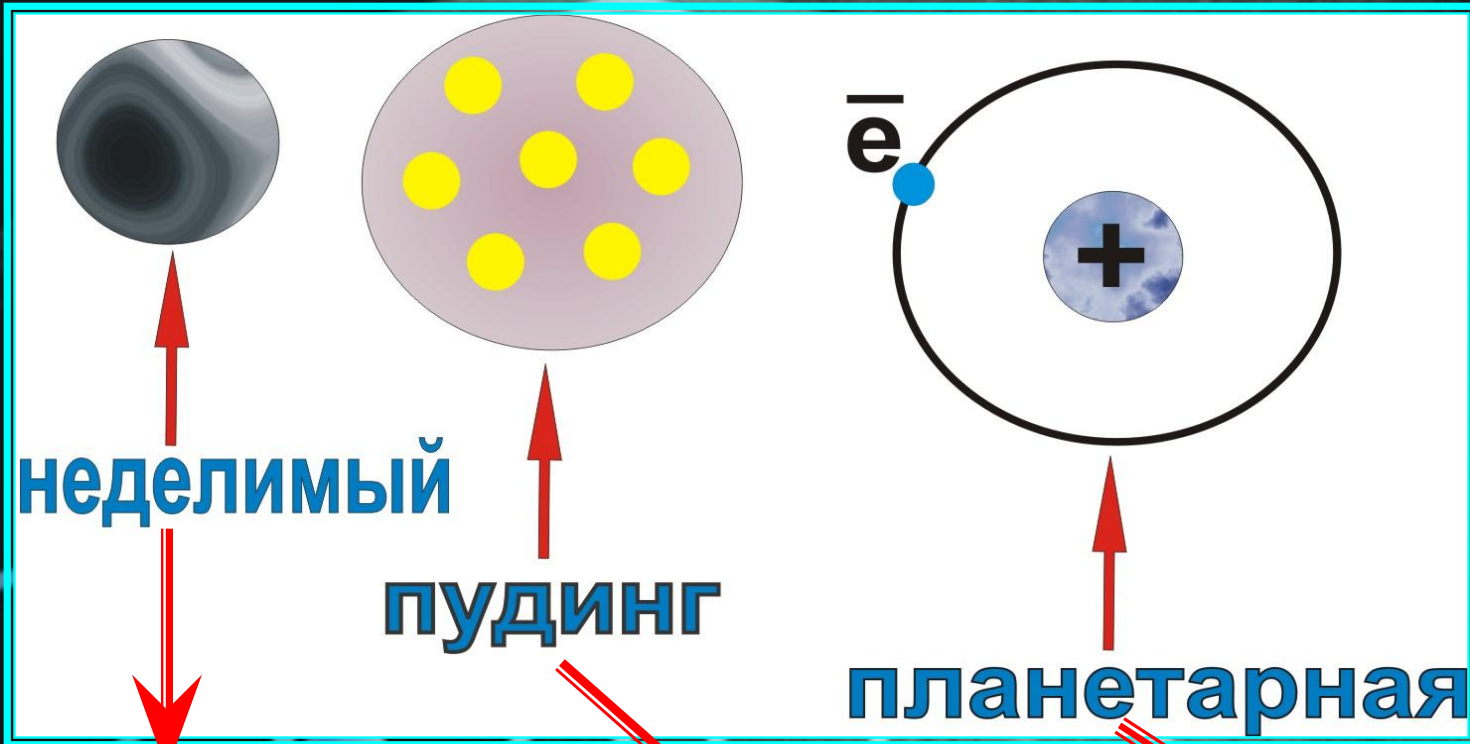
***Периодический  
закон – основа  
основ химии!!!***

**Т. Судакова, СамГТУ**

## План

1. Принцип неопределенности В. Гейзенберга.
2. Уравнение Э. Шредингера. Атомная орбиталь.
3. Квантовые числа.
4. Строение многоэлектронных атомов. Принципы заполнения атомных орбиталей электронами.
5. Свойства атомов: потенциал ионизации, сродство к электрону, электроотрицательность.

# Модели атома



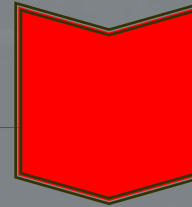
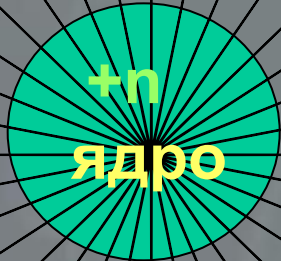
Демокрит,  
до н.э.

Дж.  
Томсон

Э.  
Резерфор  
Д

# у микромира свои законы!

В. Гейзенберг Э. Шредингер



Основы квантовой механики –  
современной теории,  
объясняющей строение атома

Волновой характер  
движения  
электрона  
(корпускулярно-  
волновой дуализм)

Вероятностный,  
статистический метод  
описания электрона  
(принцип  
неопределенности)

# Принцип неопределенности

$$\Delta x \Delta p \geq \hbar$$

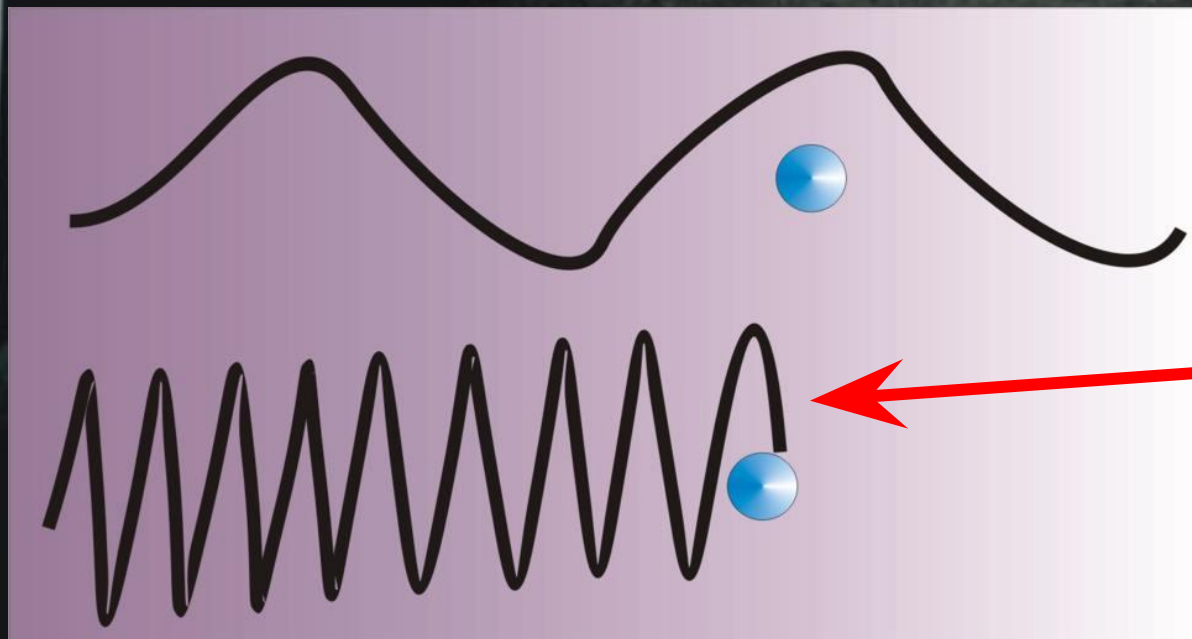
или  $\Delta E \cdot \Delta t = h/2\pi$

$\hbar$  – приведенная постоянная Планка,  $\hbar = h/2\pi$ ;  
 $\Delta x$  – неопределенность в измерении координаты электрона,  $\Delta p$  – неопределенность в измерении импульса;

$\Delta E$  – неопределенность энергии;  
 $\Delta t$  – неопределенность времени.

Невозможно в любой данный момент времени одновременно получить точные сведения и о скорости движения электрона и о его координатах в пространстве

Почему?



Чтобы наблюдать перемещение  $\bar{e}$ , необходимо излучение с очень малой  $\lambda$  и большой энергией

**НО!**

Такое излучение будет взаимодействовать с  $\bar{e}$  и изменит его импульс, не дав возможности определить его точную величину!

# Корпускулярно-волновой дуализм электрона:

Электрически заряженная частица (-), движение которой внутри атома описывается уравнением стоячей волны

## Свойства частицы:

- масса покоя  $m$
- энергия  $E$
- импульс  $mv$

## Свойства волны:

- длина волны  $\lambda$
- частота волнового процесса (колебаний)  $\nu$

Э. Шредингер объединил в одном уравнении

## Уравнение Шрёдингера:

$$(\partial^2\psi/\partial x^2 + \partial^2\psi/\partial y^2 + \partial^2\psi/\partial z^2) + 8m\pi^2/h^2 (E - U)\psi = 0$$

$$\Delta^2 \psi + 8m\pi^2/h^2 (E - U)\psi = 0$$

$\psi(x, y, z)$  - волновая функция, зависит от координат пространства

$(\partial^2\psi/\partial x^2 + \partial^2\psi/\partial y^2 + \partial^2\psi/\partial z^2) = \Delta^2\psi$  - сумма вторых частных производных волновой функции по координатам

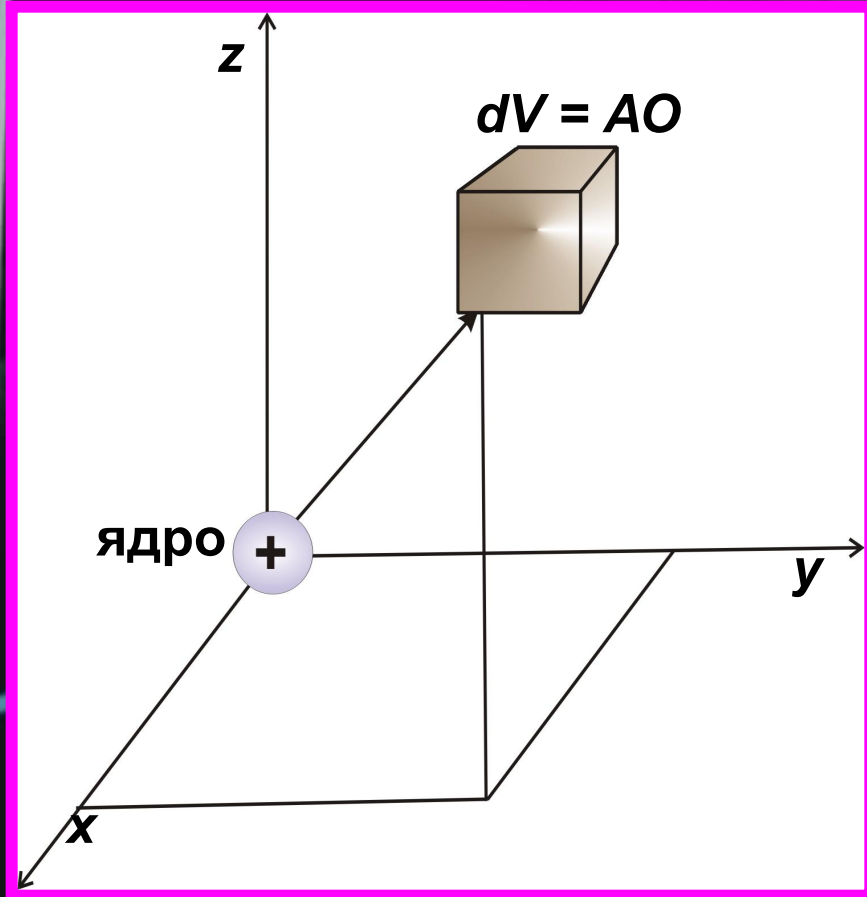
$m$  – масса электрона,

$h$  – постоянная Планка,

$E$  – полная энергия электрона,

$U$  – потенциальная энергия электрона

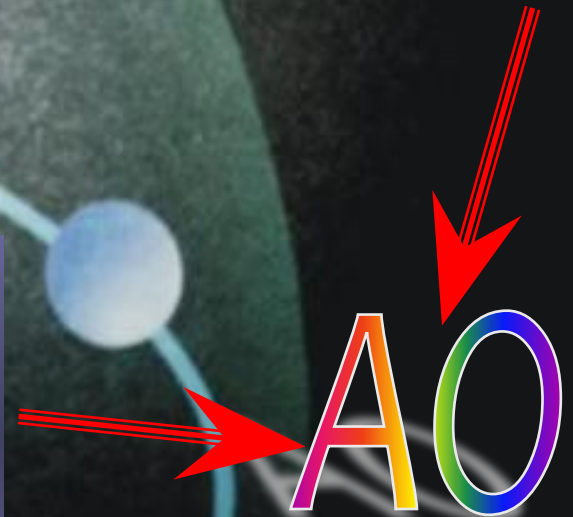




Волновая функция  $\psi$  не амплитудная, а вероятностная!!!

Ее физический смысл - это вероятность нахождения электрона в данной области пространства атома.

электрон находится в некотором объёме  $dV$ , вероятность найти его в этом объеме выразится формулой  $\Delta P = \psi^2(x, y, z) dV$



**Атомная орбиталь (АО) - волновая функция  $\psi(x, y, z)$ , определяющая область наиболее вероятного нахождения электрона в пространстве вокруг ядра**

**А также:**

- сама область наиболее вероятного нахождения электрона в пространстве вокруг ядра;

- графическое изображение этой области (например, сфера, гантель и более сложные).

**Размер и форма АО зависят от энергии электрона**

**Решение  
волнового  
уравнения**

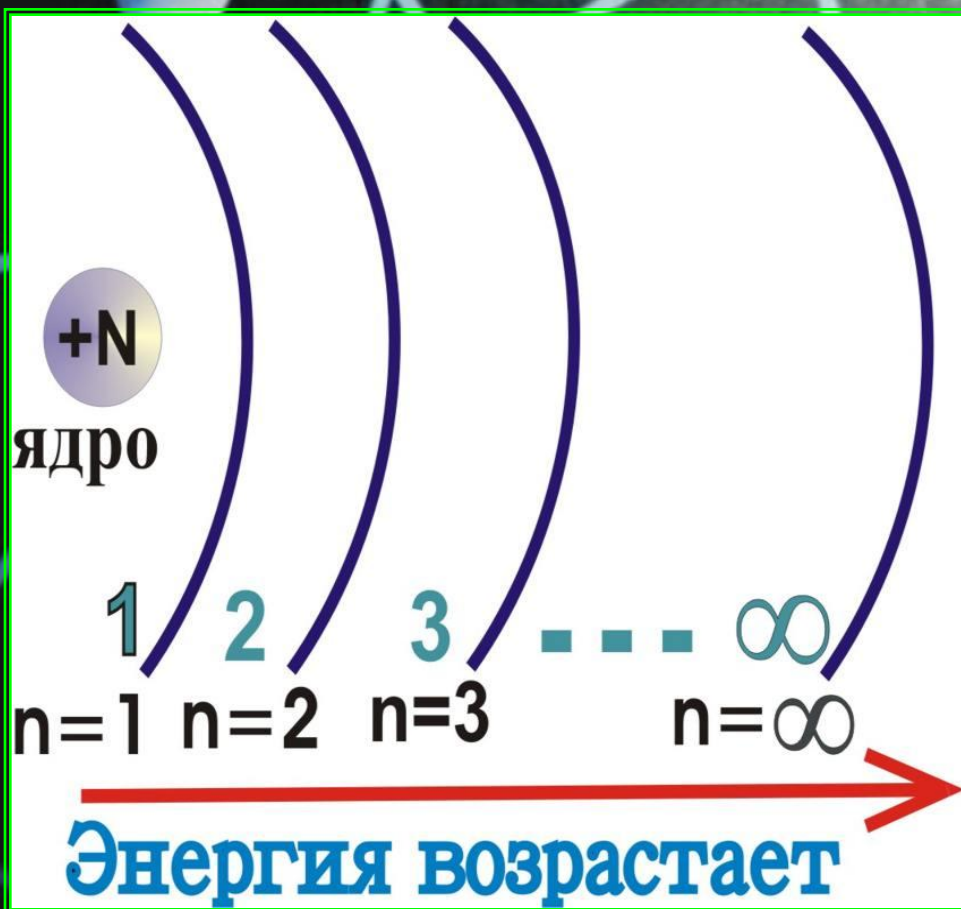
**Волновая функция и АО,  
существующие при  
определенных значениях  
некоторых целых чисел**

**Квантовые числа  $n, l, m$**

**n – главное квантовое число:**

характеризует энергетический уровень  $\bar{e}$  (запас энергии) и среднее расстояние  $\bar{r}$  от ядра.

Может принимать значения  $n=1, 2, 3 \dots \infty$ .



Количество энергетических уровней в атоме определяется номером периода, где находится атом. В I периоде – 1 уровень, во II – уже 2 и т.д.

Уровни состоят из подуровней

Т. Судакова, СамГТУ

**$l$  – орбитальное квантовое число:**

**определяет запас энергии электрона на подуровне и форму АО.**

**$l$  может принимать значения от 0 до  $(n - 1)$ .**

**Количество подуровней и значений  $l$  равно величине  $n$ .**

**При  $n=1$  одно значение  $l = 1-1=0$**

**При  $n=2$  два значения  $l=1-1=1, l=2-1=1$**

**При  $n=3$  три значения  $l=0, l=1, l=3-1=2$**

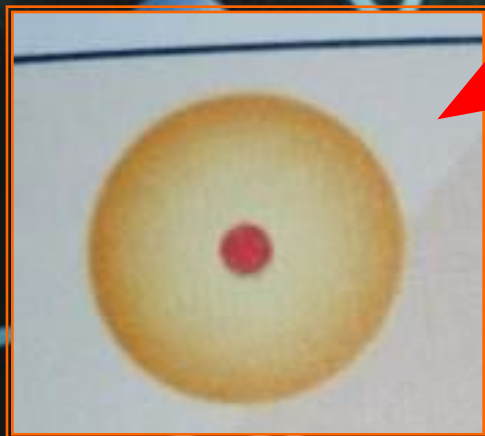
**И т.д.**

каждому значению  $l$  присвоено буквенное обозначение:

**s-подуровень,  
s-АО,  
s-электрон**

$l$ : 0	1	2	3	4
s	p	d	f	g

**d-подуровень,  
d-АО, d-  
электрон**



**p-подуровень,  
p-АО, p-  
электрон**

каждому значению  $l$  соответствует АО особой формы и только 1 форма АО.

величина  $l$  – степень кривизны АО

$l$ : 0	1	2	3	4
s	p	d	f	g

Кривизна АО увеличивается

Энергия АО и  $\bar{\epsilon}$  увеличивается

При постоянном взаимном отталкивании  $\bar{\epsilon}$  их расположение на разных АО отвечает наименьшему их приближению друг к другу, и энергетически наиболее стабильному состоянию.

**Магнитное квантовое число  $m$ :**

**характеризует ориентацию АО в пространстве.**

**Число ориентаций АО – это количество значений числа  $m$ .**

**Для каждого  $l$  возможно  $(2l+1)$  значений  $m$ .**

**возможно  $(2l+1)$  ориентаций АО в пространстве**

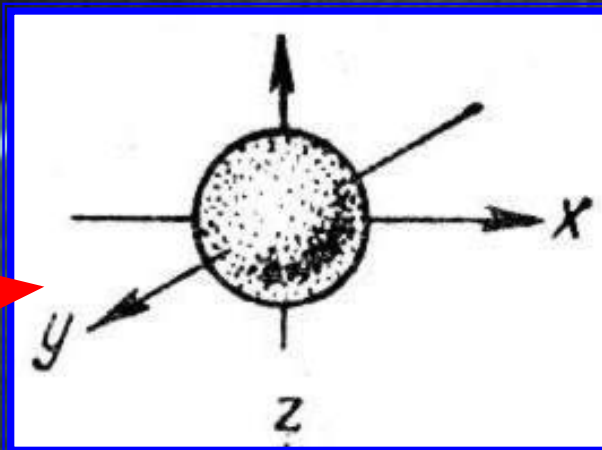
**Само же магнитное число может принимать следующие значения:  $m = 0$  и все целые числа в интервале от  $-l$  до  $+l$**



$l=0$ , s - АО

Кол-во  $m=(2l+1)=1$   
1 ориентация

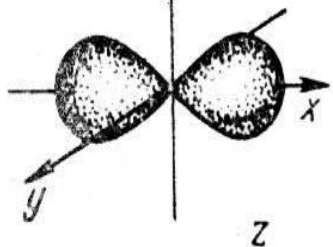
$m=0$



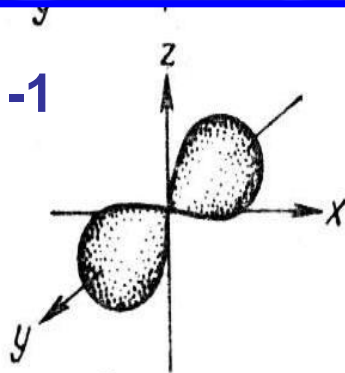
$l=1$ , p-АО

Кол-во  $m=(2l+1)=3$   
3 ориентации  
 $m= -1, m=0, m=1$

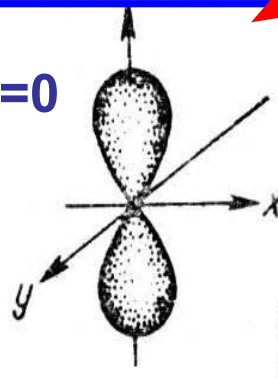
$m=1$



$m= -1$



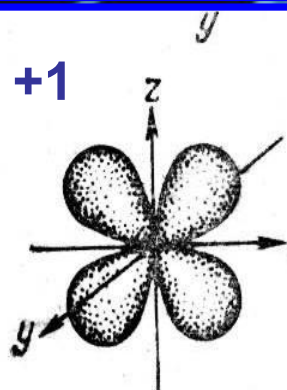
$m=0$



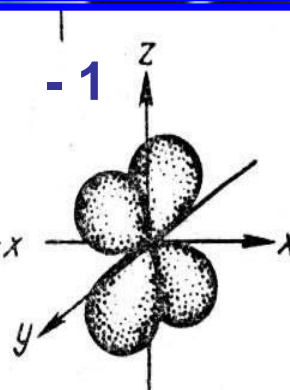
$l=2$ , d-АО

Кол-во  $m=5$   
5 ориентаций

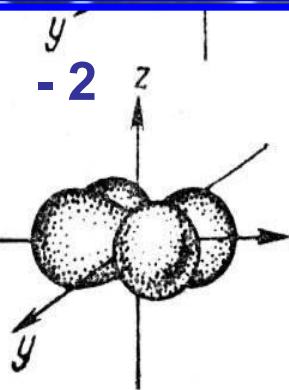
+1



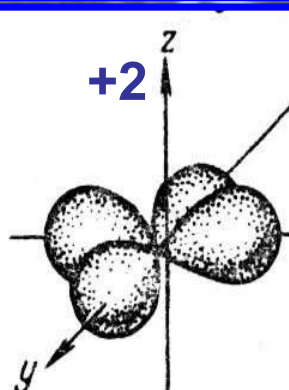
-1



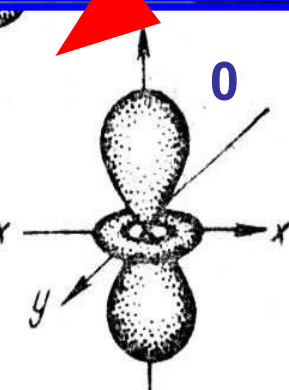
-2



+2



0



$m= -2,$   
 $m= -1,$   
 $m= 0,$   
 $m= 1,$   
 $m= 2$

$\vec{e}$  вращается вокруг своей оси как по часовой стрелке так и против нее

Имеет собственный момент движения (вектор)

Спин (спиновое квантовое число)  $m_s$  – проекция собственного момента количества движения  $\vec{e}$  на какую-либо ось.

Может принимать только 2 значения:  $m_s = +1/2$  (проекция  $>0$ ) или  $m_s = -1/2$  (проекция  $<0$ )

Создает магнитное поле определенного направления

$\vec{e}\uparrow$  и  $\vec{e}\downarrow$  с противоположно направленными спинами (магнитными полями)

Спаренные электроны

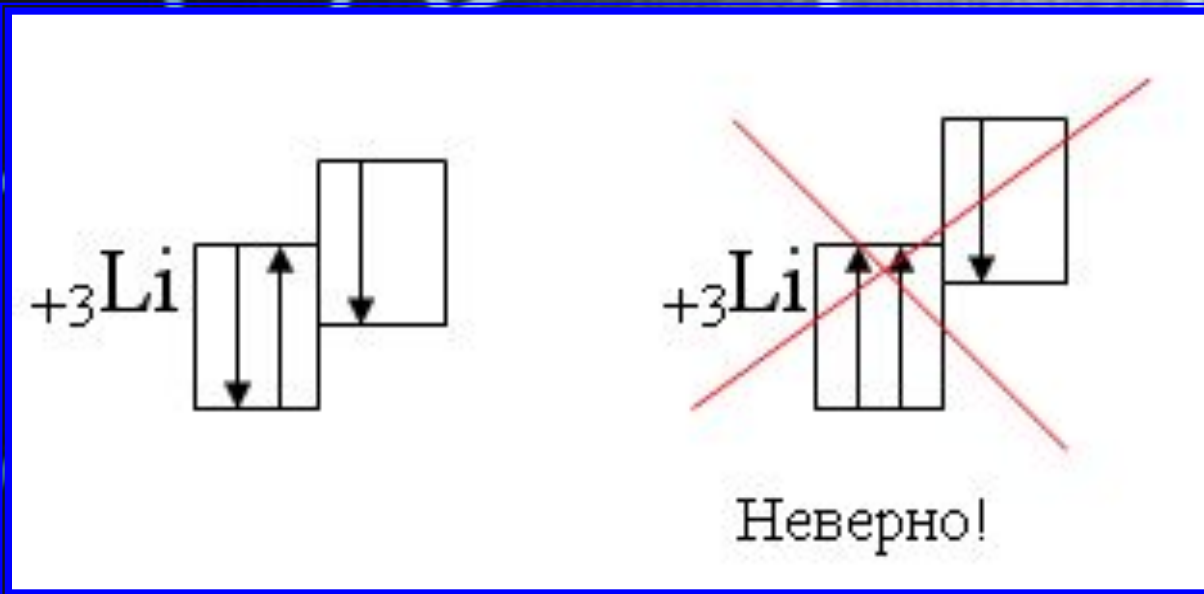


притягиваются

Т. Судакова, СамГТУ

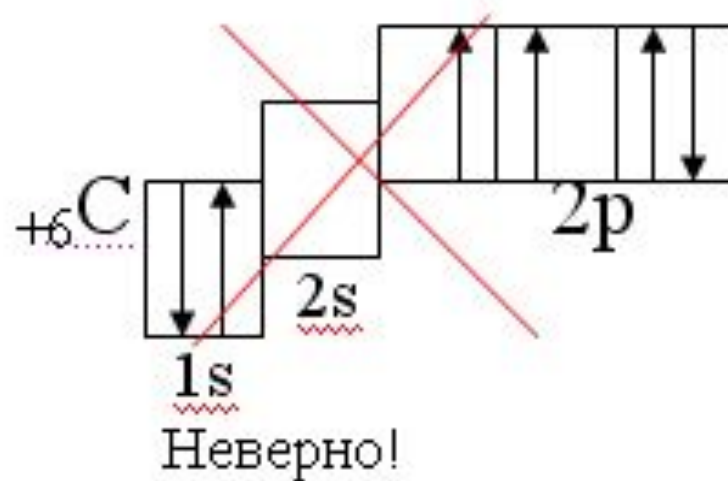
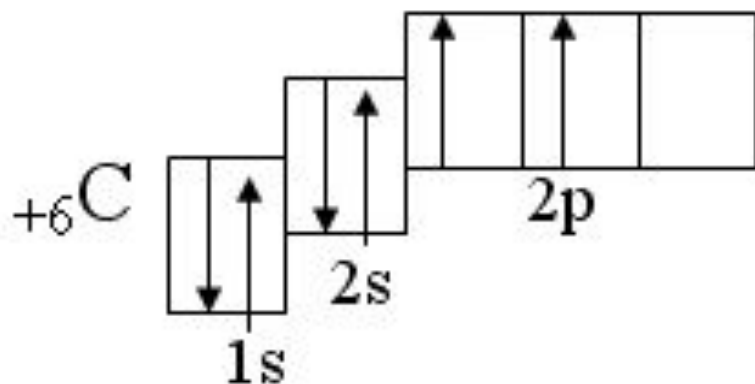
# ПРАВИЛА РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ЭЛЕКТРОНОВ В АТОМАХ

1. Принцип запрета Вольфганга Паули - в атоме не может быть двух электронов с одинаковыми значениями всех 4-х квантовых чисел.



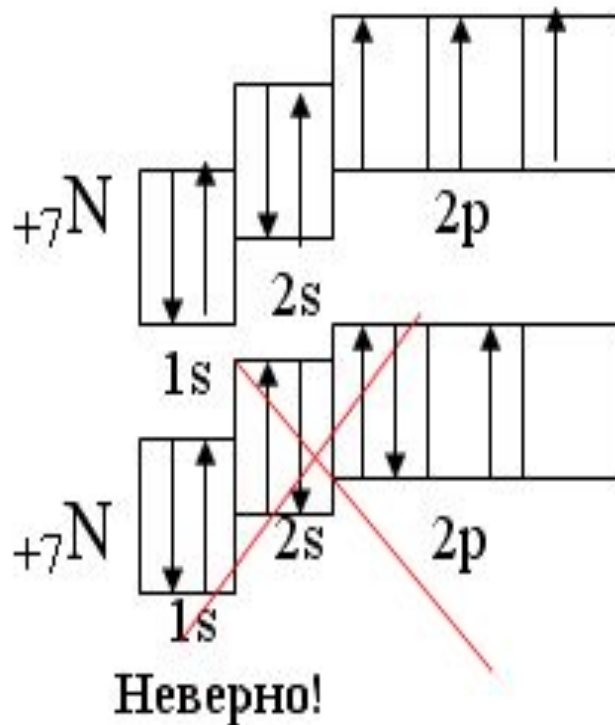
На любой АО могут находиться только 2  $\bar{e}$  с антипараллельными спинами (одинаковы только 3 квантовых числа –  $n, l, m$ !)

**2. Принцип наименьшей энергии: электроны заполняют АО в атоме в порядке увеличения их энергии.**



**Энергия 2s–АО меньше, чем энергия 2p–АО**

**3. Правило Фридриха Хунда (Гунда):** электроны в пределах данного подуровня располагаются сначала по одному в свободных АО, чтобы сумма значений спиновых квантовых чисел была максимальной.



$$\sum s = +1/2 + 1/2 + 1/2 = 1,5$$

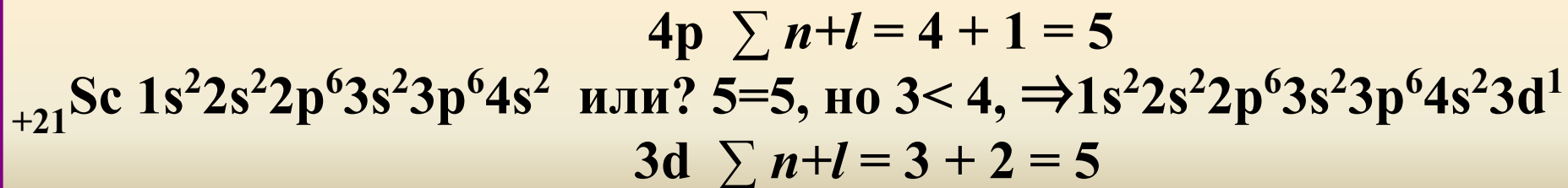
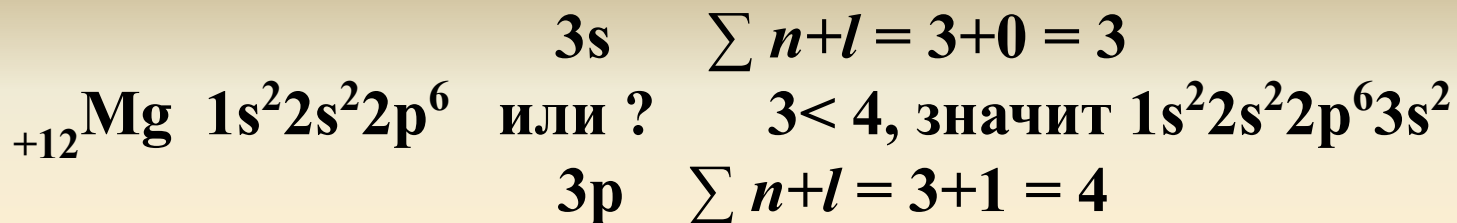
$$\sum s = +1/2 - 1/2 + 1/2 = 1/2 = 0,5$$

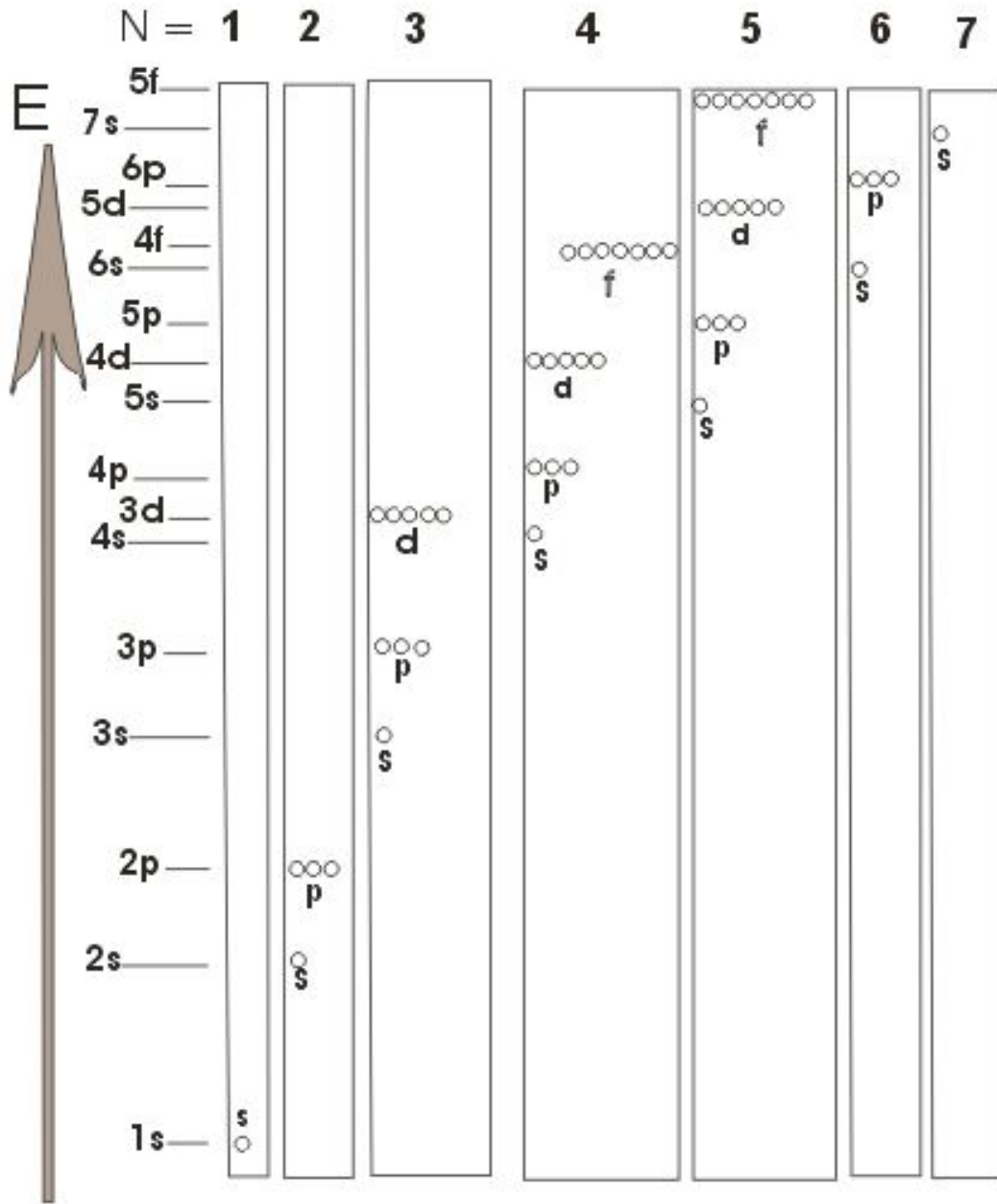
**возрастает энергия кулоновского отталкивания электронов друг от друга и энергия атома в целом тоже возрастает.**

## 4. Правила Клечковского:

А) заполнение электронных уровней с увеличением атомного номера элемента происходит последовательно в порядке увеличения суммы  $(n + l)$ ;

Б) если сумма  $(n + l)$  одинакова для нескольких АО, то сначала заполняется АО с меньшим значением  $n$ .





**В  
многоэлектронных  
атомах АО  
заполняются  
электронами в  
соответствии с  
диаграммой**

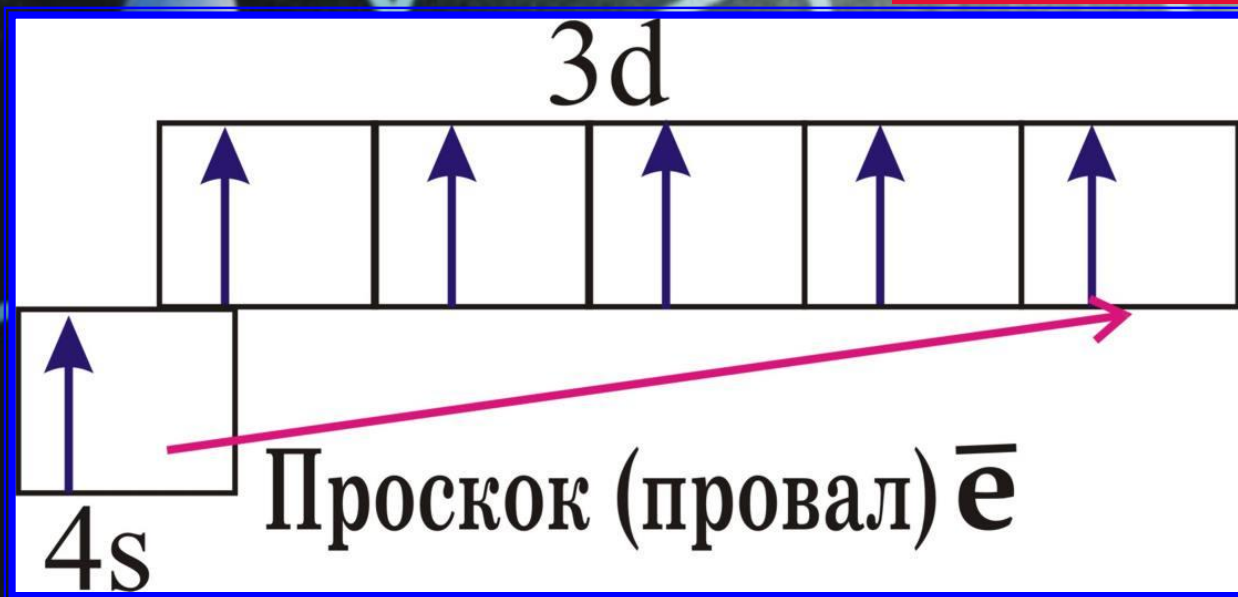
**НО!**

## ИСКЛЮЧЕНИЯ ИЗ ПРАВИЛА:

По всем правилам:



Более вероятное:



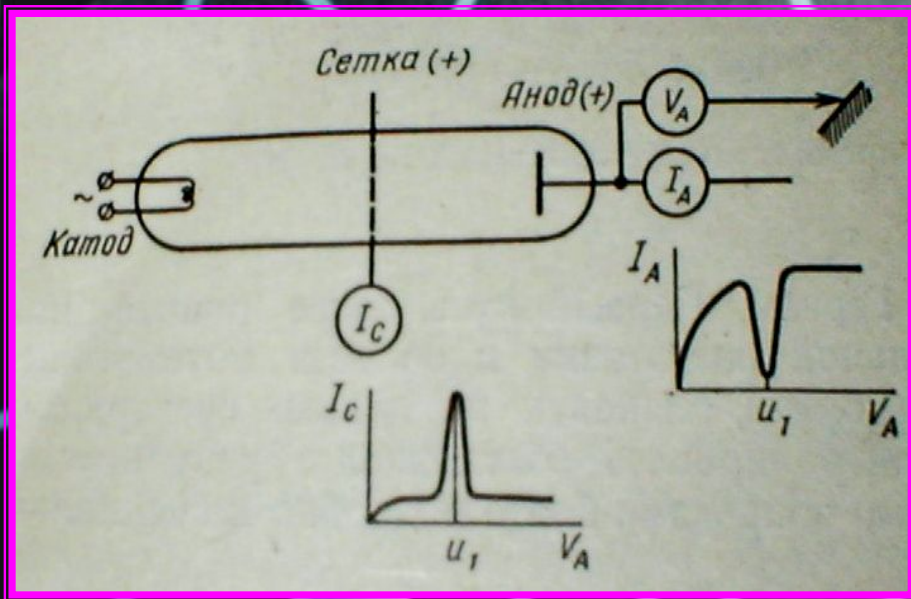
более низкой энергией обладает конфигурация с полузаполненным 3d подуровнем – симметричным распределением заряда в пространстве





# свойства атом

1) Потенциал (энергия) ионизации:



Энергия ионизации – энергия, которую требуется затратить для удаления  $\bar{e}$  с его устойчивой орбиты на бесконечно большое расстояние от ядра

Кал, Дж, эВ

Схема установки Франка и Герца для определения потенциала ионизации

Потенциал ионизации  $I$  – разность потенциалов, под воздействием которой  $\bar{e}$  приобретает энергию, соответствующую энергии ионизации (эВ)

# Для многоэлектронных атомов:

Отрыв 1-го  $\bar{e}$  – первый потенциал ионизации  $I_1$

Отрыв 2-го  $\bar{e}$  – второй потенциал ионизации  $I_2$

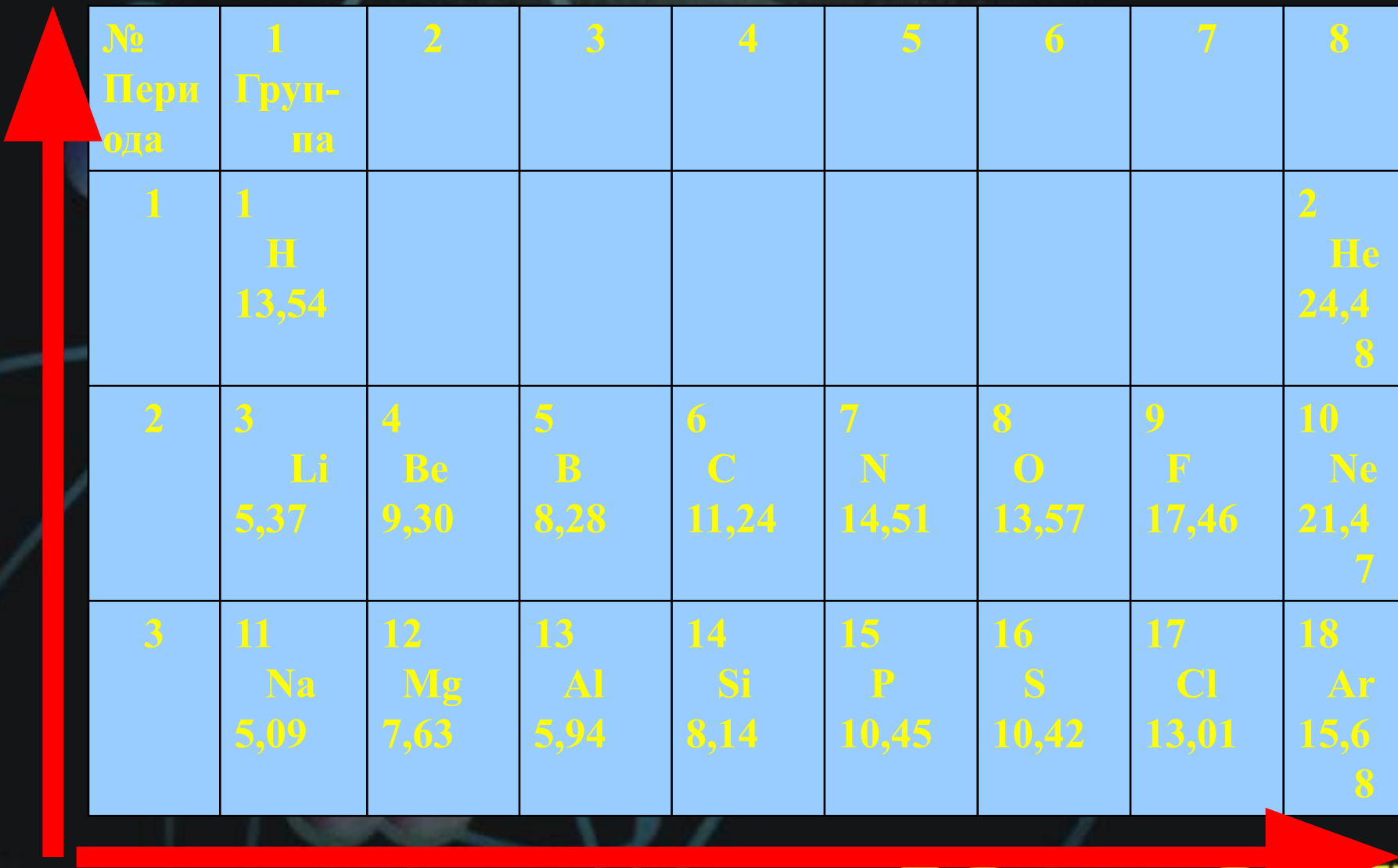
Отрыв  $n$ -го  $\bar{e}$  –  $n$ -й потенциал ионизации  $I_n$

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

Т.к. увеличивается заряд катиона  $\uparrow n+$

Увеличивается притяжение  $\bar{e}$  к ядру

**I изменяется периодически: в периодах увеличивается, в группах - уменьшается**



№ Периода	1 Группа	2	3	4	5	6	7	8
1	1 H 1,008							2 He 4,003
2	3 Li 6,941	4 Be 9,012	5 B 10,811	6 C 12,011	7 N 14,007	8 O 15,999	9 F 18,998	10 Ne 20,180
3	11 Na 22,990	12 Mg 24,305	13 Al 26,982	14 Si 28,086	15 P 30,974	16 S 32,065	17 Cl 35,453	18 Ar 39,948

**Чем меньше  $I$  данного  $\bar{e}$ , тем легче он покидает атом**

**Восстановительные свойства –  
характерны для металлов (Na, Ca, Mg,  
Zn, Cd и др.)**

**Наиболее  
высокими  
значениями  $I$   
обладают  
типичные  
неметаллы –  
элементы главных  
подгрупп с V по  
VIII групп.  
Максимальный – у  
инертных газов.**

**наименьшим  $I$   
обладают  
металлы,  
особенно  
главных  
подгрупп I и II  
групп.**

## 2) ЭНЕРГИЯ СРОДСТВА АТОМА К ЭЛЕКТРОНУ



анион

Энергия сродства атома к  $\bar{e}$  – энергия, которую надо затратить на присоединение к атому дополнительного  $\bar{e}$  (кал, Дж, эВ – чаще!)

Энергия ионизации =  
– энергия сродства к  $\bar{e}$

**Е сродства увеличивается**

**Атом хуже присоединяет  $\bar{e}$ , но легче его отдает**

Энергия сродства к  $e^-$  также находится в периодической зависимости от заряда ядра:

В группе с  $\uparrow Z$  – уменьшается

ПЕРИОДИЧЕСКАЯ СИСТЕМА ХИМИЧЕСКИХ ЭЛЕМЕНТОВ Д.И.МЕНДЕЛЕЕВА

ГРУППЫ ЭЛЕМЕНТОВ

Период	Ряд	ГРУППЫ ЭЛЕМЕНТОВ															
		I	II	III	IV	V	VI	VII	VIII								
1	1	H															He
2	2	Li	Be	B	C	N	O	F									Ne
3	3	Na	Mg	Al	Si	P	S	Cl									Ar
4	4	K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni						
5	5	Rb	Sr	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br								Kr
6	6	Cs	Ba	La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt						
7	7	Fr	Ra	Ac	Rf	Db	Sg	Bh	Hn	Mt							

ЛАНТАНОИДЫ

АКТИНОИДЫ

Д.И. Менделеев 1834-1907

СИМВОЛ ЭЛЕМЕНТА    ПОРЯДКОВЫЙ НОМЕР

НАЗВАНИЕ ЭЛЕМЕНТА

ОТНОСИТЕЛЬНАЯ АТОМНАЯ МАССА

РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ЭЛЕКТРОНОВ ПО СЛОЯМ

- s-элементы
- p-элементы
- d-элементы
- f-элементы

в периоде с  $\uparrow Z$  – увеличивается

**Электроотрицательность (ЭО) - относительная способность атомов элементов притягивать электроны при образовании химической связи в молекулах.**

**ЭО рассчитана теоретически**

**3 шкалы:**

- Р. Малликена
- Оллреда и Рохова
- Л. Полинга

**Cs**  
**0,7**

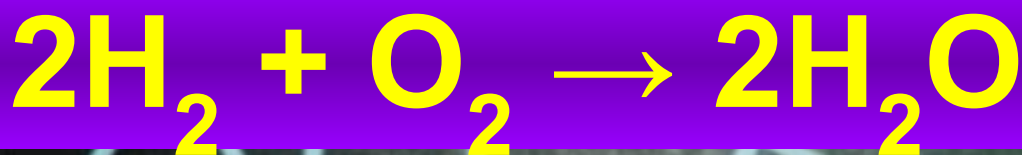
**F**  
**4,0**



$\text{ЭО}=2,2$

<

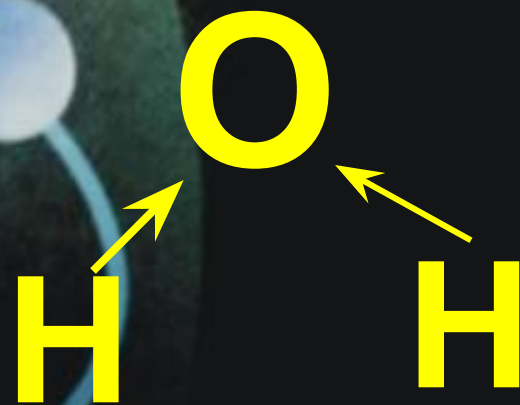
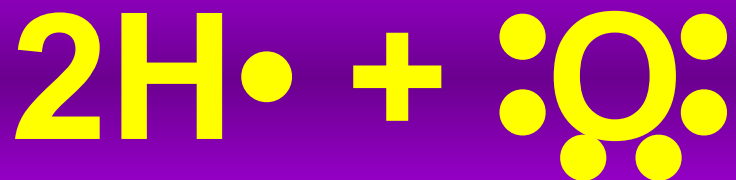
$\text{ЭО}=3,1$



$\text{ЭО}=2,2$

<

$\text{ЭО}=3,5$





# Элементы (атомы)

H, O, P, S,

Na, Mg

## Вещества

простые

$H_2$ ,  $O_2$ ,  $O_3$ ,  $N_2$ ,  
Mg

сложные

$H_2O$ ,  $NH_3$ ,  $MgO$

органические

$CCl_3$ ,  $C_2H_5OH$ ,  
 $CH_3COOH$

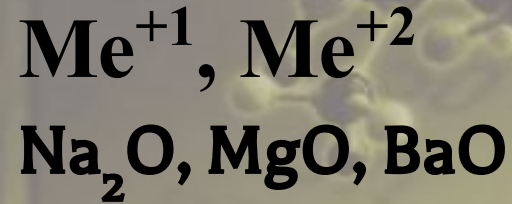
неорганические

$P_2O_5$ ,  $NH_4OH$ ,  
 $KMnO_4$ ,  $H_2SO_4$

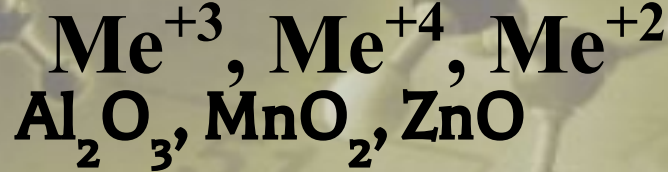
# ОСНОВНЫЕ КЛАССЫ НЕОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ

## Оксиды:

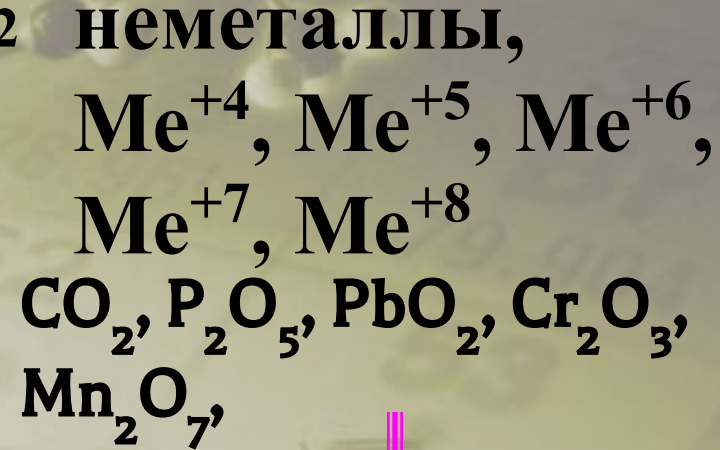
основные



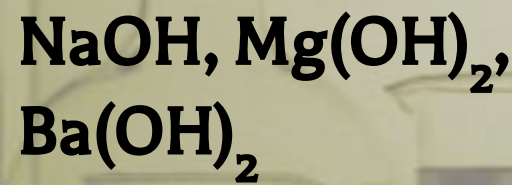
амфотерные



кислотные

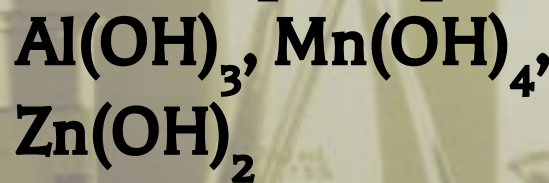


основные

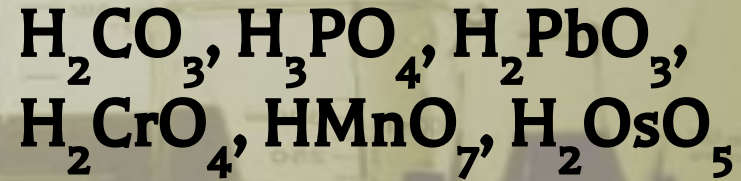


## Гидроксиды:

амфотерные

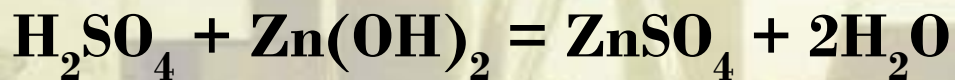
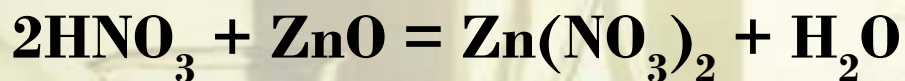
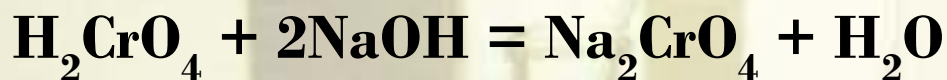
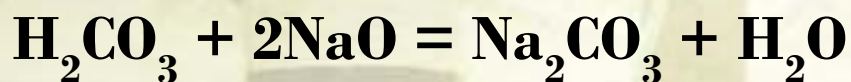
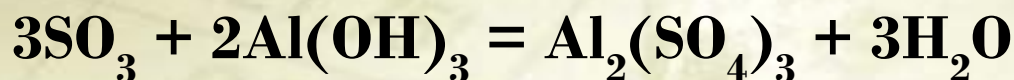
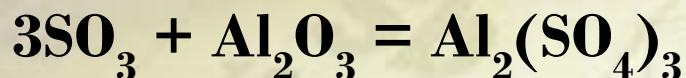


кислотные

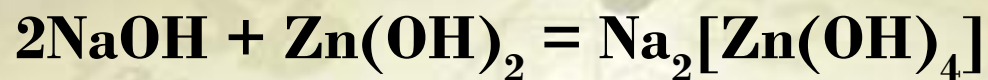
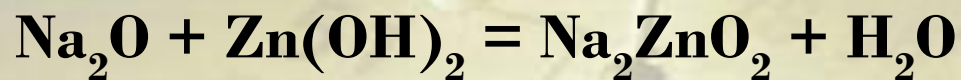
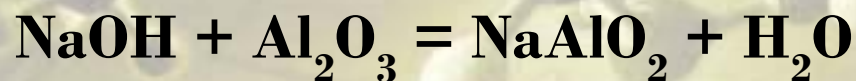
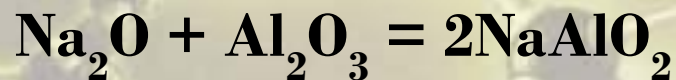


# Химические свойства оксидов и гидроксидов

1) Кислотные оксиды и гидроксиды реагируют с основными и амфотерными оксидами и гидроксидами с образованием солей:



**2) Основные оксиды и гидроксиды реагируют с кислотными и амфотерными оксидами и гидроксидами (см. предыдущий слайд):**



**3) Амфотерные оксиды и гидроксиды реагируют и с кислотными и с основными оксидами и гидроксидами (см. п.п. 1 и 2).**

# Соли:

— средние  $\text{Na}_2\text{CO}_3$ ,  $\text{Na}_2\text{SO}_4$ ,  $\text{MgSO}_4$   
карбонат сульфат

гидрокарбонат гидросульфат

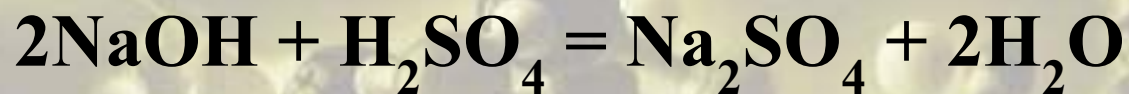
— кислые  $\text{NaHCO}_3$ ,  $\text{NaHSO}_4$ ,  $\text{Mg}(\text{HSO}_4)_2$

гидроксосульфат гидроксокарбонат

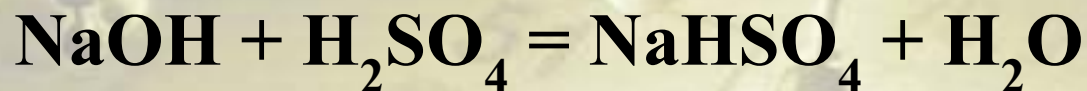
— основные  $(\text{MgOH})_2\text{SO}_4$ ,  $(\text{ZnOH})_2\text{CO}_3$ ,  $\text{MgOHCl}$

гидроксохлорид

### 1) Образование средних солей:



### 2) Образование кислых солей:

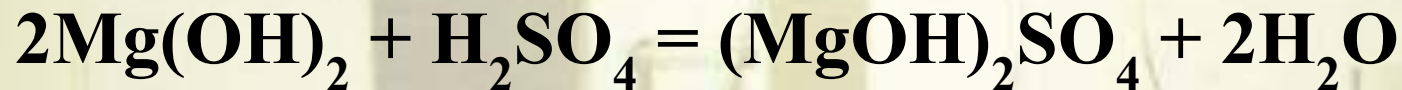


недостаток

избыток

Кислотный остаток -  $\text{HSO}_4^-$

### 3) Образование основных солей:



избыток

недостаток

Основной остаток -  $(\text{MgOH})^-$

[К содержанию](#)

**Д**  
Даже не думай!.....  
Тебе и в следующий  
раз придти придется!

