



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

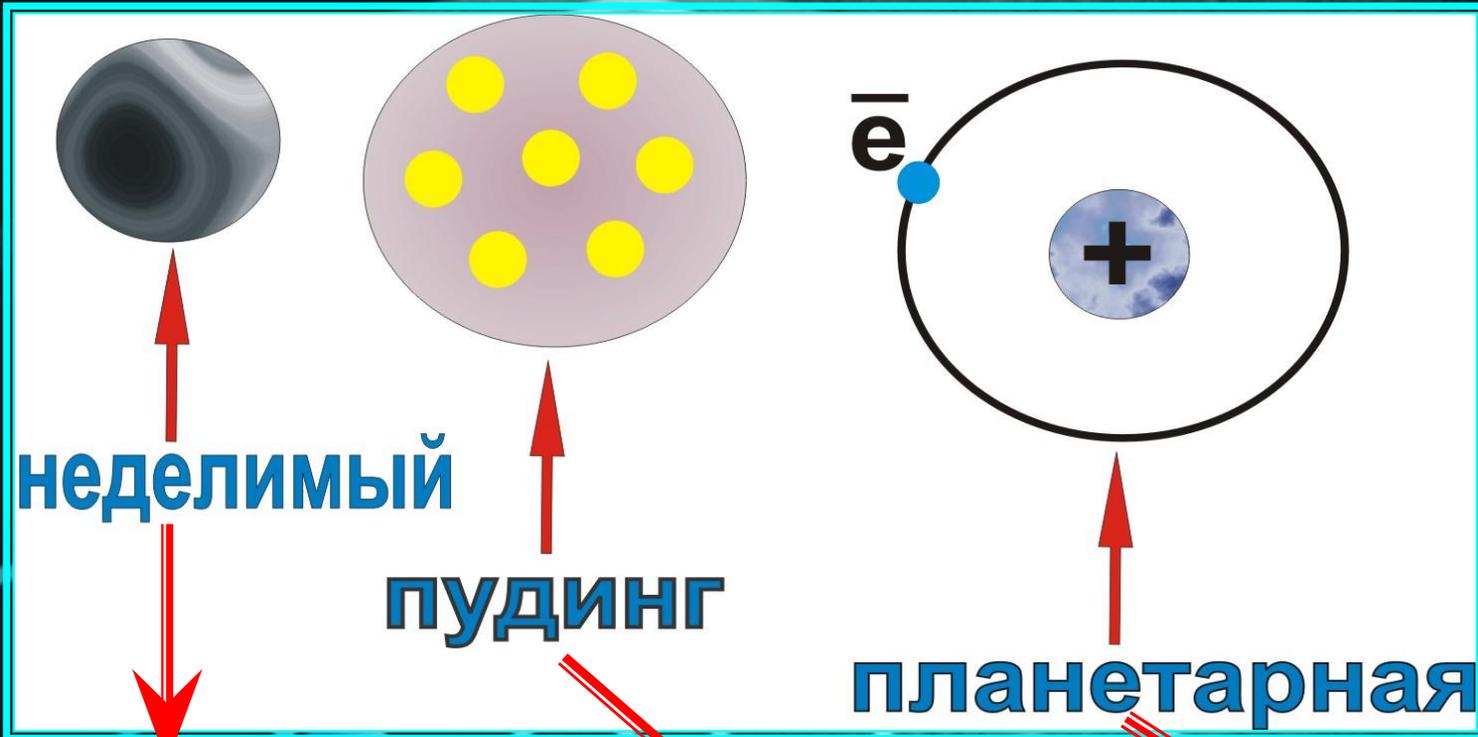
***Периодический
закон – основа
основ химии!!!***

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



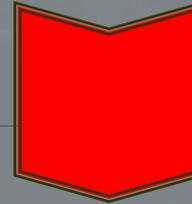
Демокрит,
до н.э.

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

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

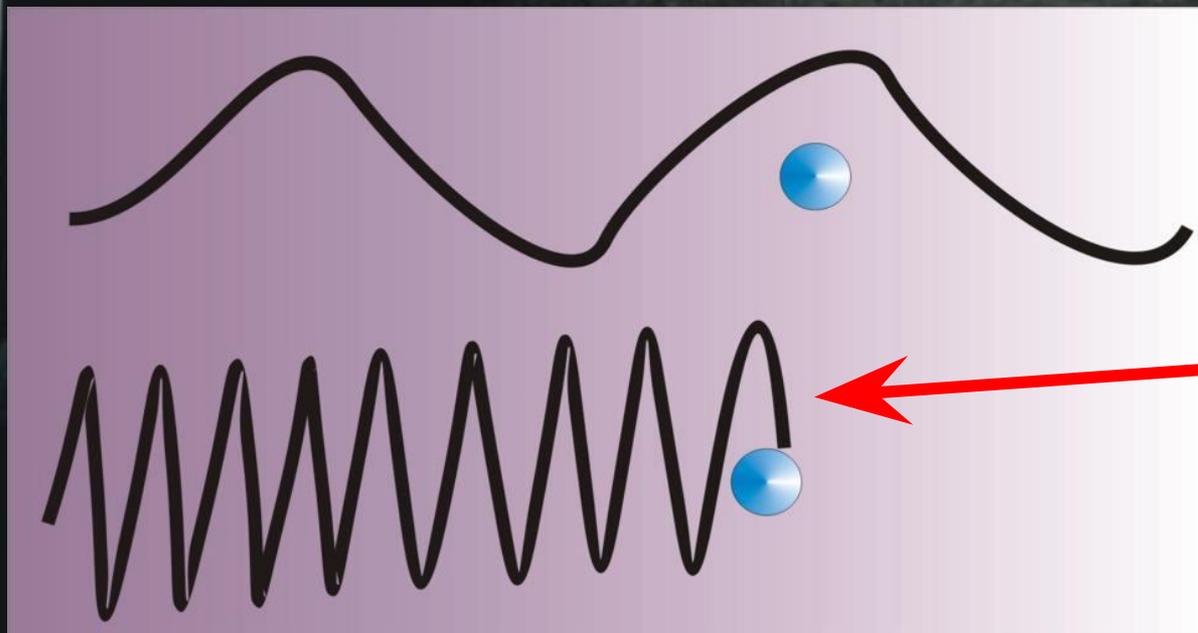
или $\Delta E \cdot \Delta t = h/2\pi$

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

ΔE – неопределенность энергии;
 Δt – 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 λ 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 λ
- частота волнового процесса (колебаний) ν

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

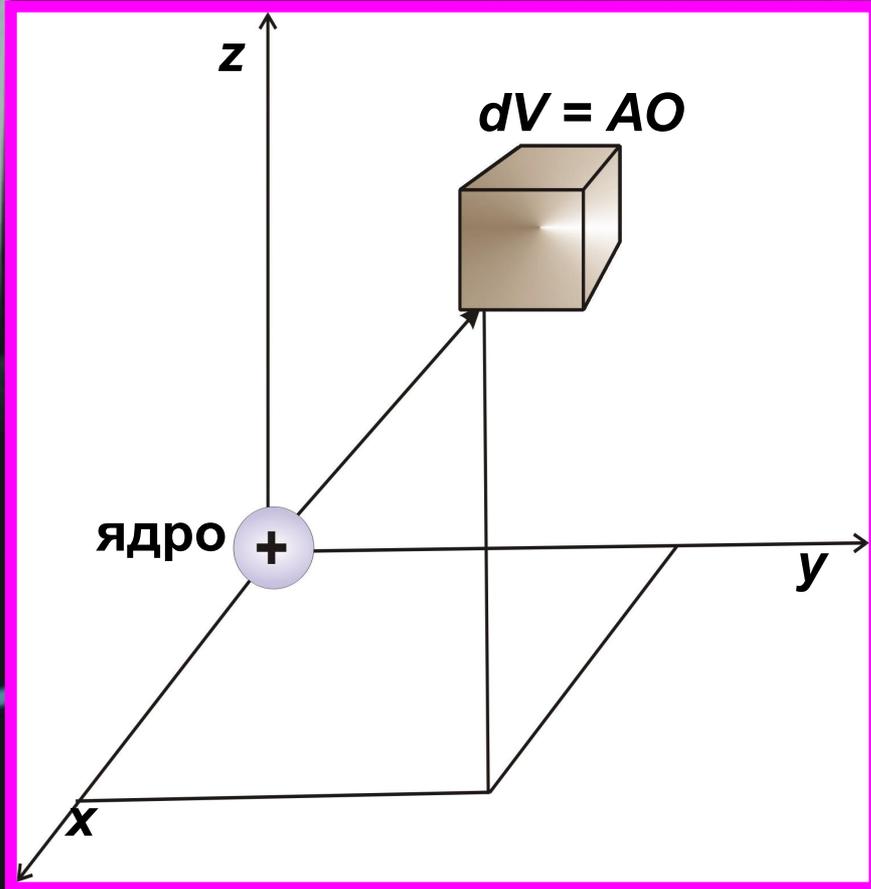
$(\partial^2\psi/\partial x^2 + \partial^2\psi/\partial y^2 + \partial^2\psi/\partial z^2) = \Delta^2\psi$ - сумма вторых частных производных волновой функции по координатам

m – масса электрона,

h – постоянная Планка,

E – полная энергия электрона,

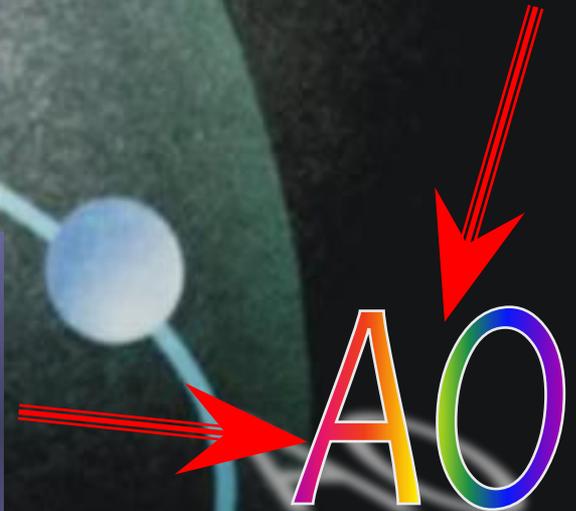
U – потенциальная энергия электрона



Волновая функция ψ 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**

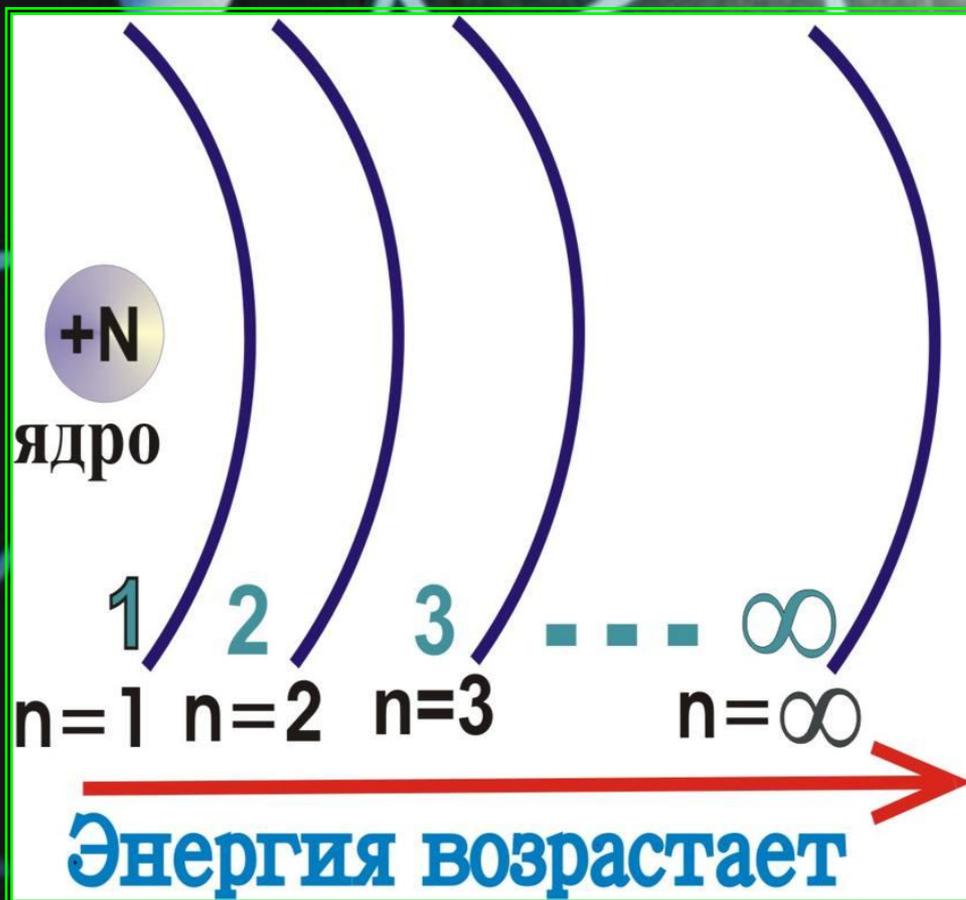
**Волновая функция и АО,
существующие при
определенных значениях
некоторых целых чисел**

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 $l=0, l=1, l=3-1=2$

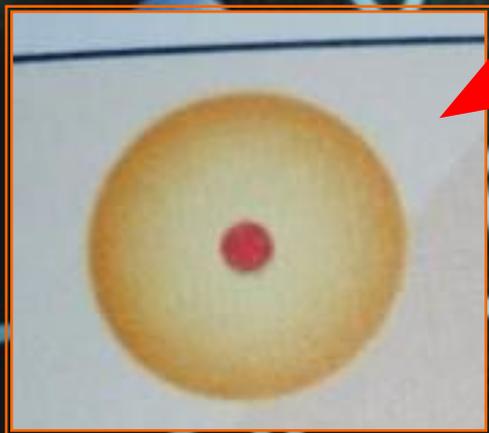
И т.д.

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 .

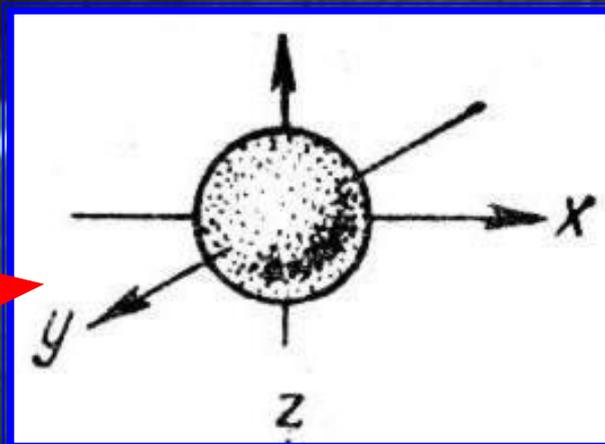
возможно $(2l+1)$ ориентаций АО в пространстве

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

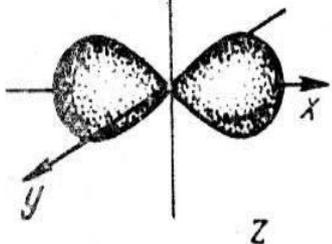
$m=0$



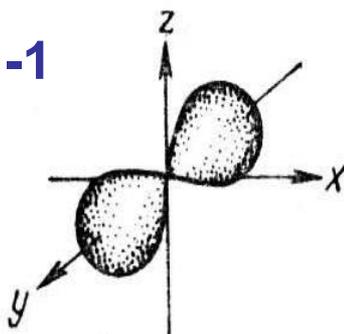
$l=1$, p-АО

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

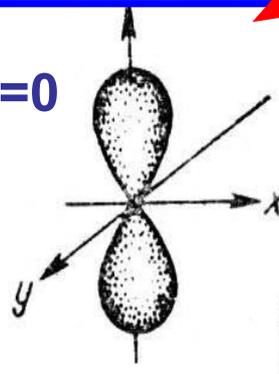
$m=1$



$m= -1$



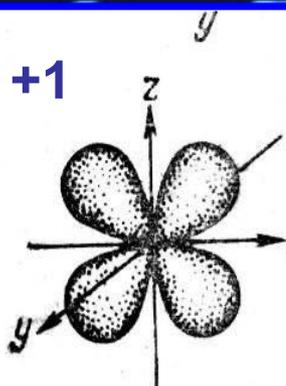
$m=0$



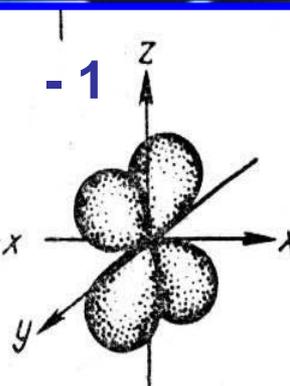
$l=2$, d-АО

Кол-во $m=5$
5 ориентаций

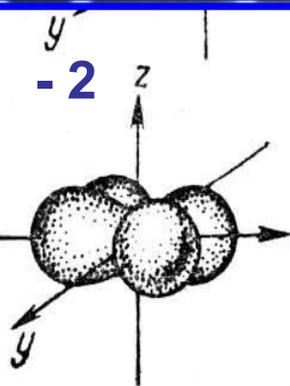
+1



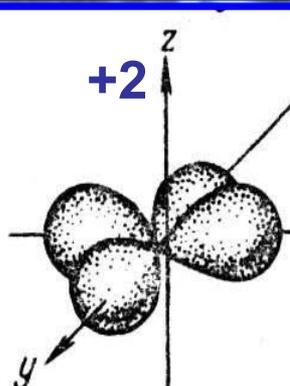
-1



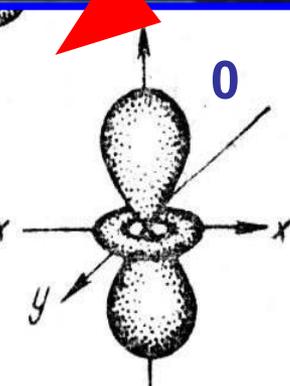
-2



+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

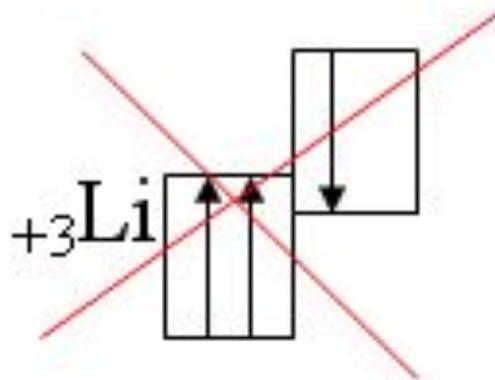
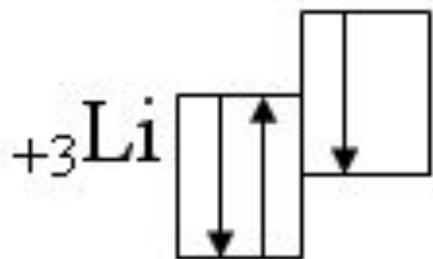


притягиваются

Т. Судакова, СамГТУ

ПРАВИЛА РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ЭЛЕКТРОНОВ В АТОМАХ

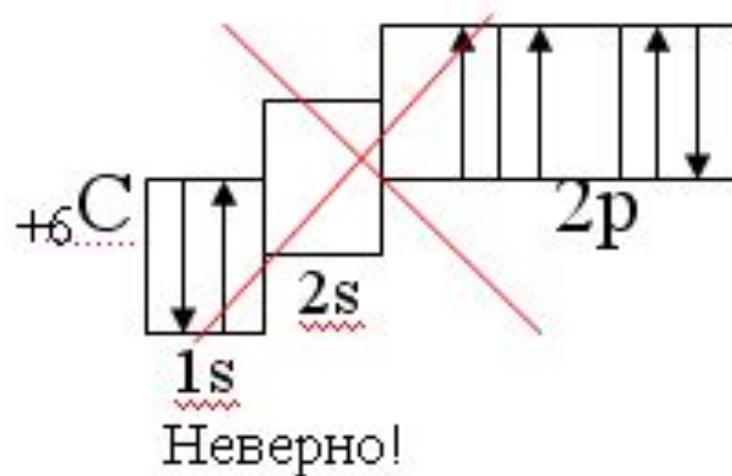
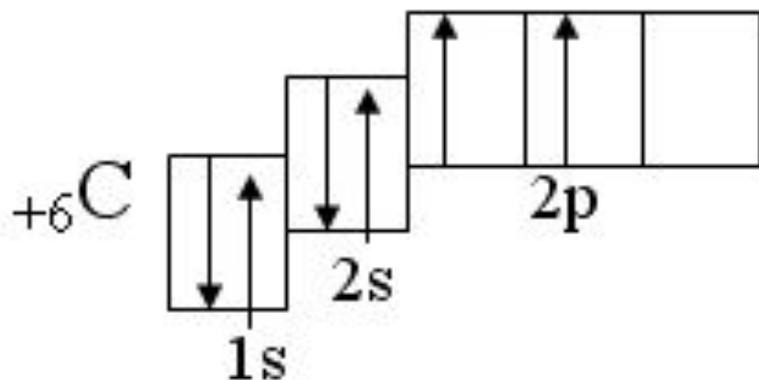
1. Принцип запрета Вольфганга Паули - в атоме не может быть двух электронов с одинаковыми значениями всех 4-х квантовых чисел.



Неверно!

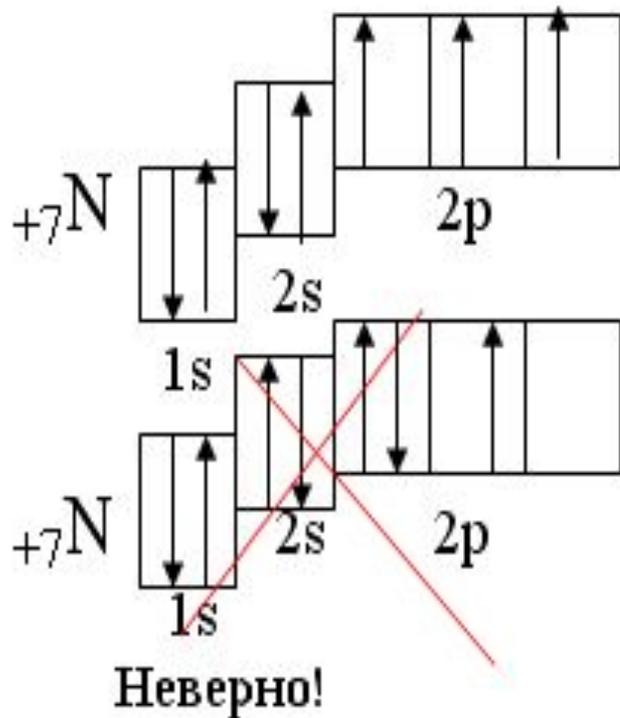
На любой АО могут находиться только 2 \bar{e} с антипараллельными спинами (одинаковы только 3 квантовых числа – n, l, m !)

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.



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

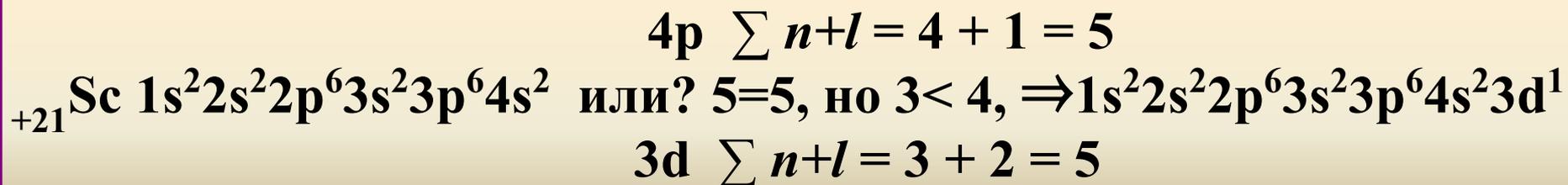
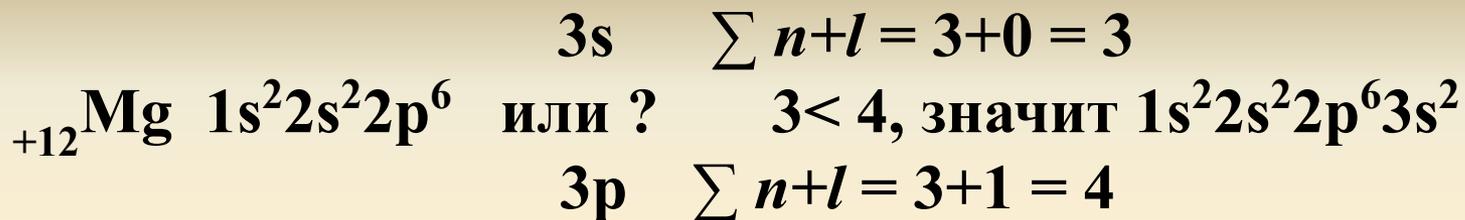
$$\sum s = +1/2 - 1/2 + 1/2 = 1/2 = 0,5$$

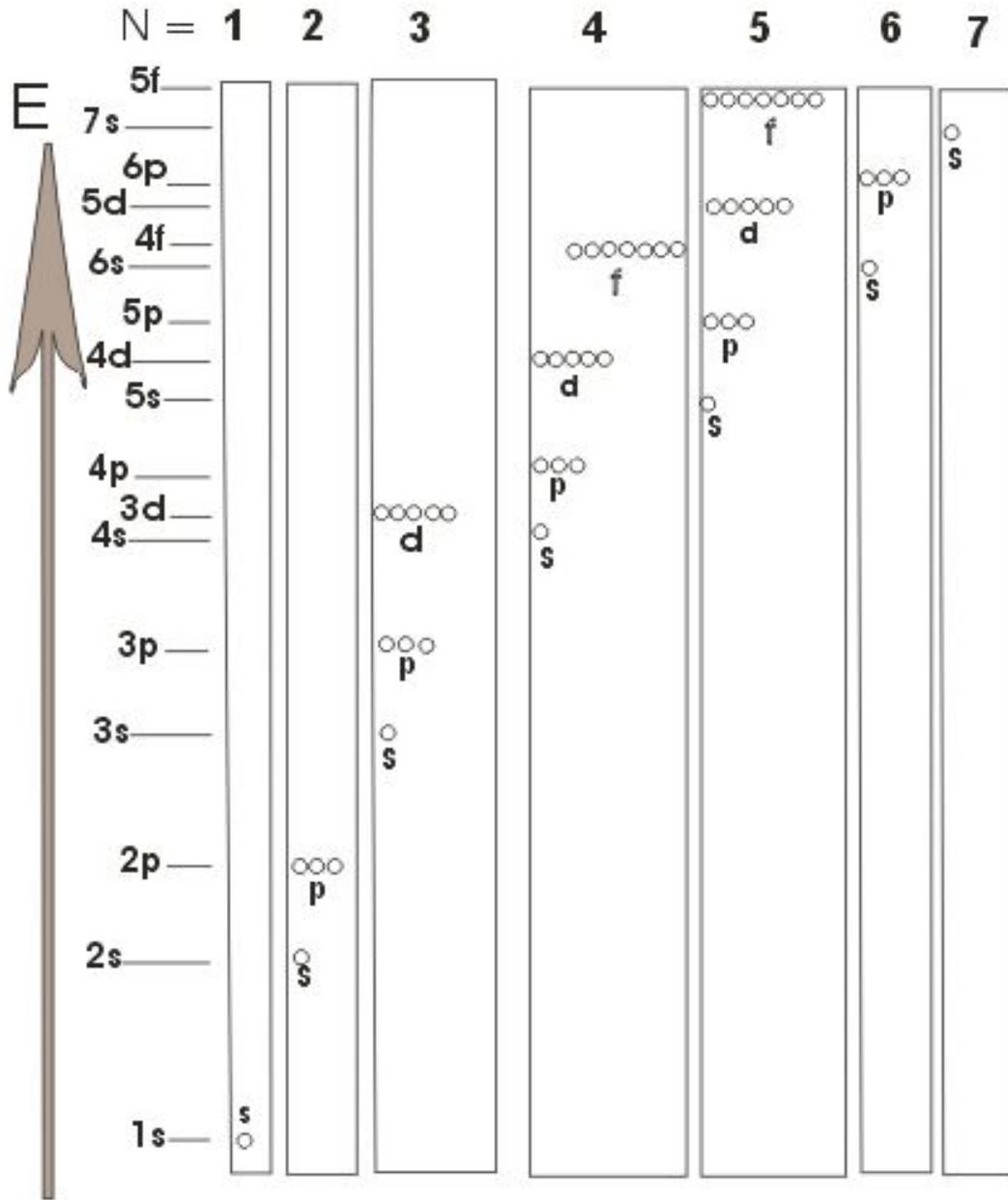
возрастает энергия кулоновского отталкивания электронов друг от друга и энергия атома в целом тоже возрастает.

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**

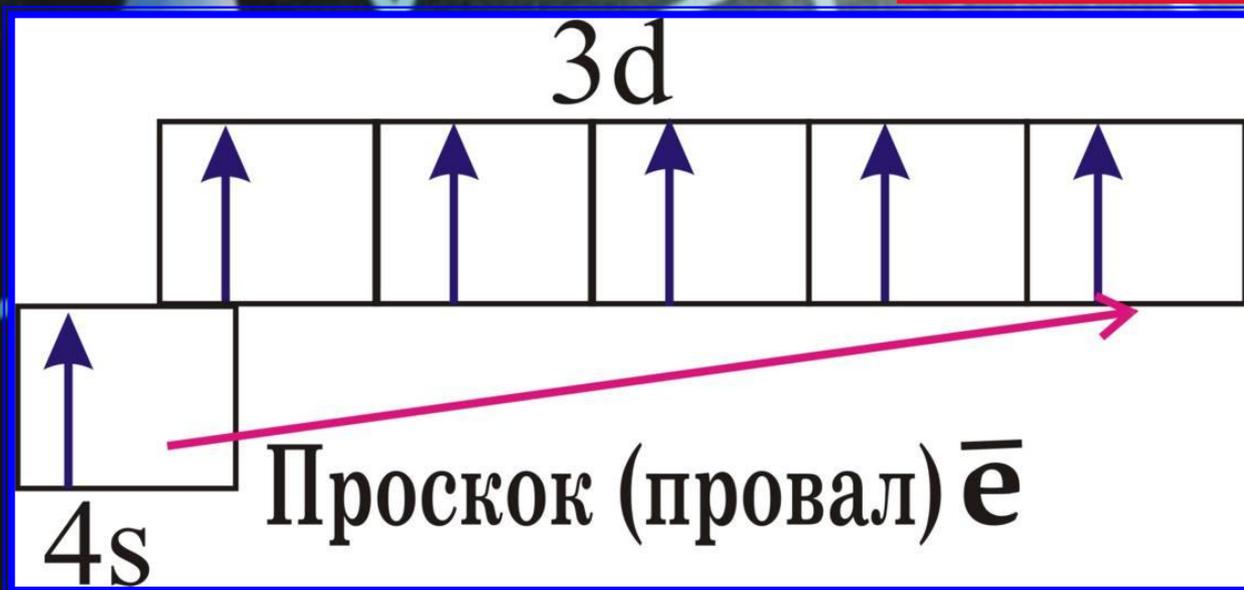
НО!

ИСКЛЮЧЕНИЯ ИЗ ПРАВИЛА:

По всем правилам:



Более вероятное:



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

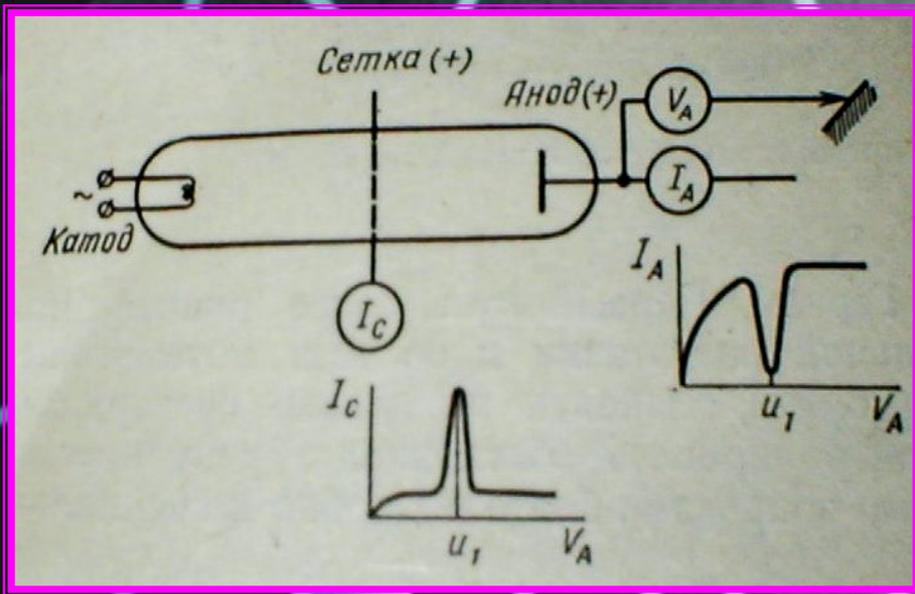


свойства атом

1) Потенциал (энергия) ионизации:



катион



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

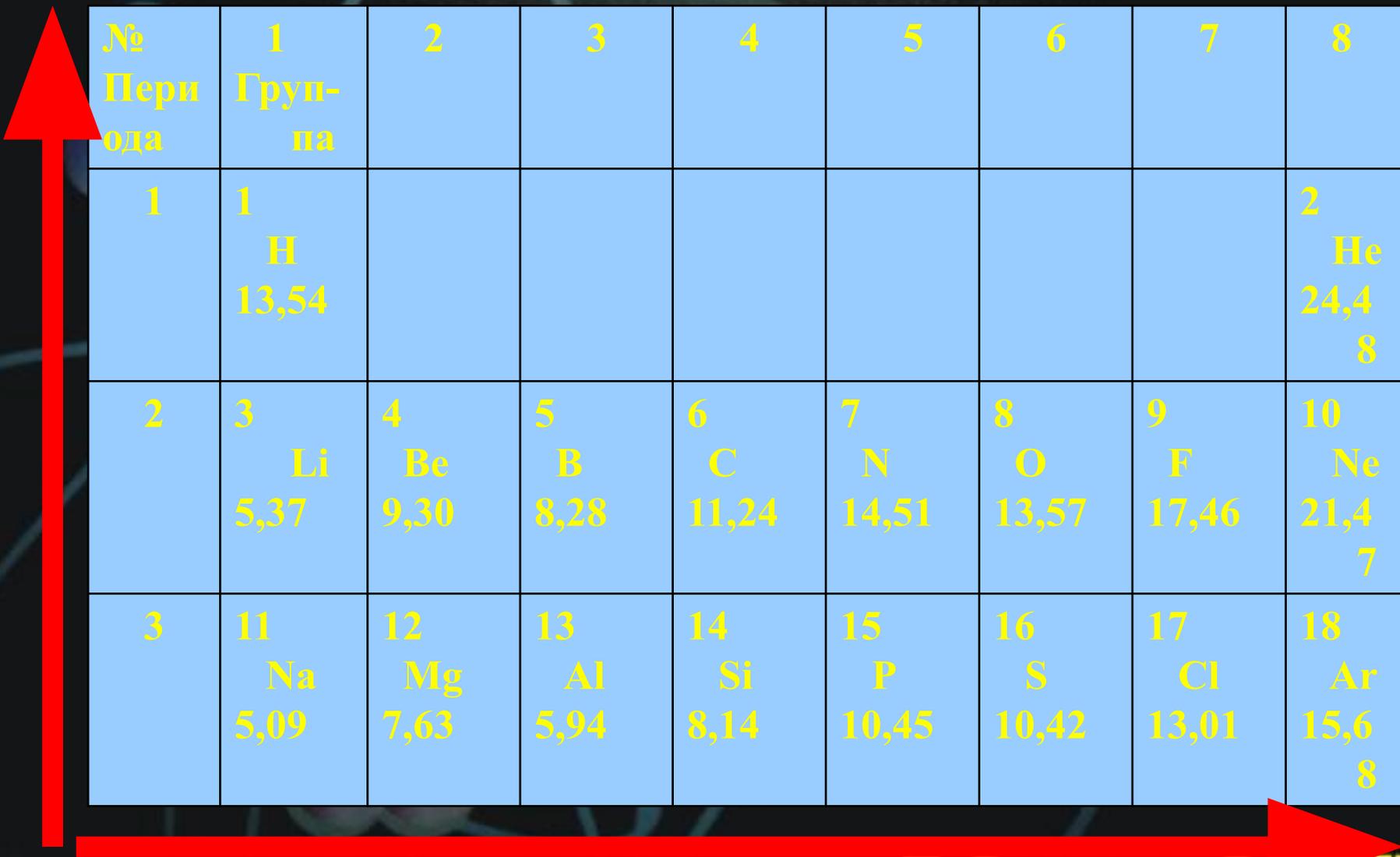
Отрыв n -го \bar{e} – n -й потенциал ионизации I_n

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

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							Kr
5	5	Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd							Xe
6	6	Cs	Ba	La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt							Rn
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

- В-элементы
- Р-элементы
- С-элементы
- Т-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



$\text{ЭО}=2,2$

<

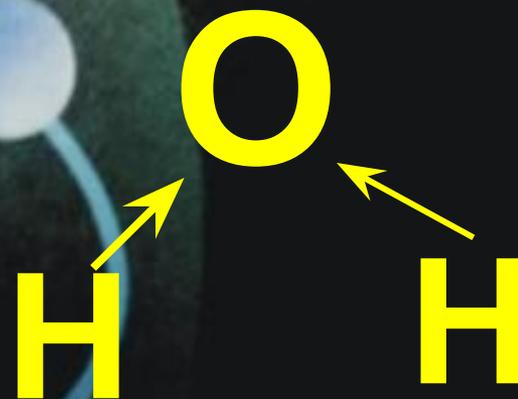
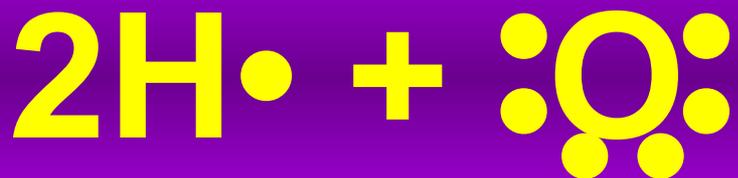
$\text{ЭО}=3,1$



$\text{ЭО}=2,2$

<

$\text{ЭО}=3,5$



Элементы (атомы)

H, O, P, S,

Na, Mg

Вещества

простые

сложные

H_2 , O_2 , O_3 , N_2 ,
Mg

H_2O , NH_3 , MgO

органические

неорганические

CCl_3 , C_2H_5OH ,
 CH_3COOH

P_2O_5 , NH_4OH ,
 $KMnO_4$, H_2SO_4

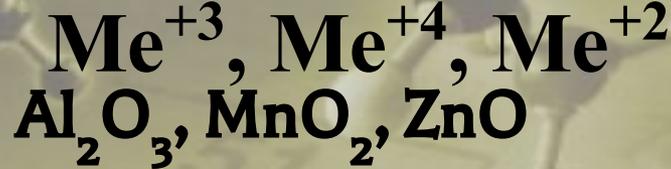
ОСНОВНЫЕ КЛАССЫ НЕОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ

Оксиды:

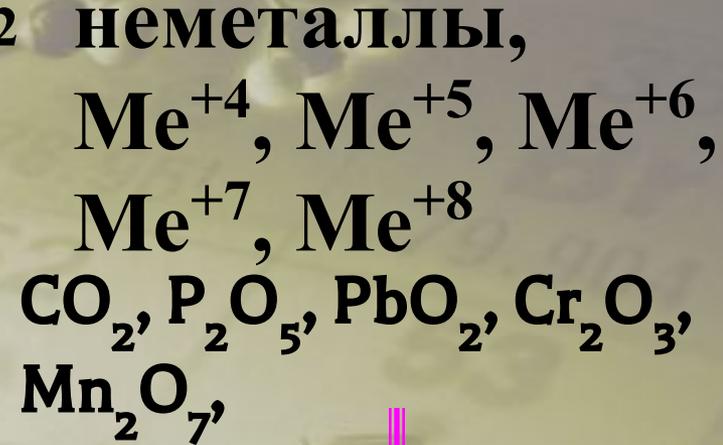
основные



амфотерные

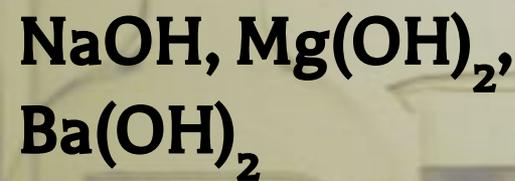


кислотные

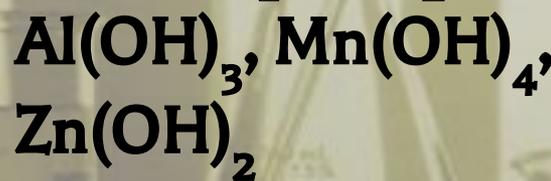


Гидроксиды:

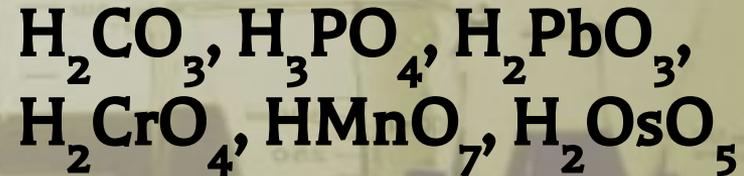
основные



амфотерные

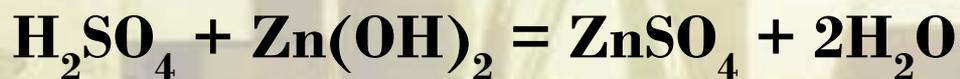
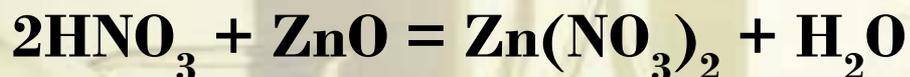
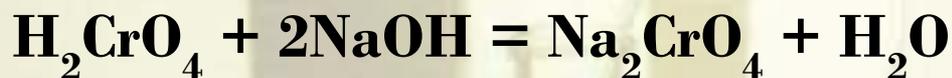
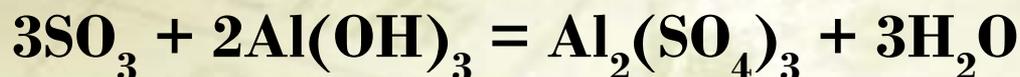
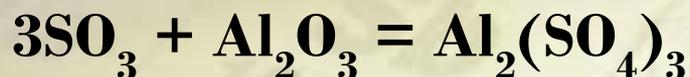


кислотные

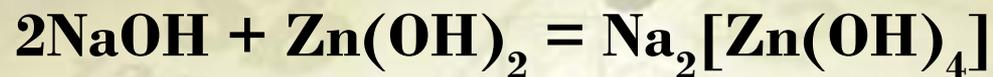
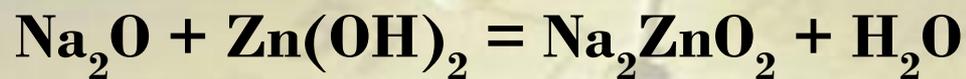
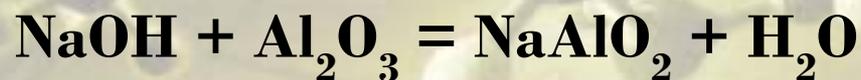


Химические свойства оксидов и гидроксидов

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 Na_2CO_3 , Na_2SO_4 , MgSO_4
карбонат сульфат

гидрокарбонат гидросульфат

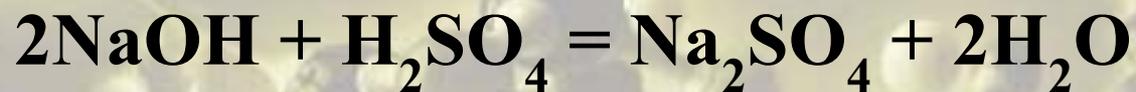
— кислые NaHCO_3 , NaHSO_4 , $\text{Mg}(\text{HSO}_4)_2$

гидроксосульфат гидроксокарбонат

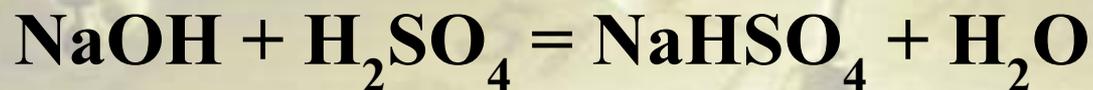
— основные $(\text{MgOH})_2\text{SO}_4$, $(\text{ZnOH})_2\text{CO}_3$, MgOHCl

гидроксохлорид

1) Образование средних солей:



2) Образование кислых солей:

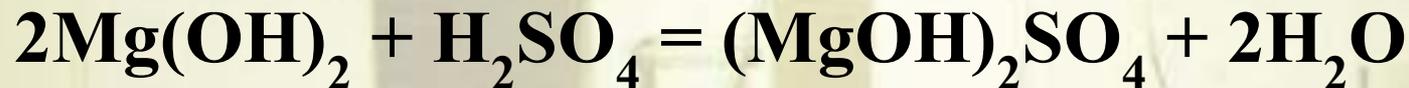


недостаток

избыток

Кислотный остаток - 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!

