

# **Общая и неорганическая химия**

**Строение атома**

**Периодический закон**

# ***Литература***

- 1. **Общая химия , Глинка Н.Л.**
- 2. **Химия в центре наук, Браун, Лемей, том 1; 2**
- 3. **Неорганическая химия, Хьюи,**
- 4. **Неорганическая химия, Шрайвер, Эткинс, том 1; 2**
- 5. **Интернет – ресурсы**
- 6. **Чанышева А.Т. – материалы лекций**

- 1. Современная модель строения атома**
- 2. Характеристика энергии электрона и пространственное распределение вероятности его нахождения в атоме системой квантовых чисел**
- 3. Электронные конфигурации атомов**
- 4. Периодический Закон Д.И. Менделеева**
- 5. Теории химической связи  
( МВС и ММО)**

# Строение атома

- **Атом** (от греч. atomos - неделимый) - наименьшая химическая частица, состоящая из массивного положительно заряженного ядра и движущихся в электрическом поле ядра отрицательно заряженных электронов

# Атомные частицы и их свойства

**Атом** состоит из трёх видов частиц:

1. **Электрон – (e)** - заряд отрицательный,

$$q = -1,6 \cdot 10^{-19} \text{ Кл}$$

$$\text{Масса } m_e = 9,11 \cdot 10^{-31} \text{ кг}$$

2. **Протон – (p)** - заряд положительный

$$\text{Масса } m_p = 1836 \cdot m_e$$

3. **Нейтрон – (n)** - заряд нейтральный,

$$\text{Масса } m_n \approx m_p$$

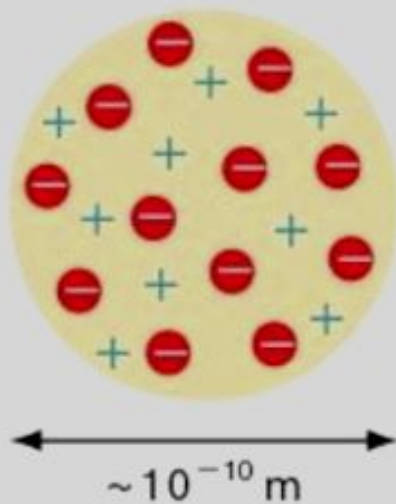
## Субатомные элементарные частицы

Частица	Заряд	Масса:	
		кг	а.е.м.
Протон	+1	$1,67 \cdot 10^{-27}$	1,00728
Нейтрон	0	$1,67 \cdot 10^{-27}$	1,00867
Электрон	-1	$9,11 \cdot 10^{-31}$	0,000549

## Модель атома Томсона

Джозеф Томсон (1903 г.): атом – положительно заряженный шар размером  $\sim 10^{-10}$  м, внутри которого около своих положений равновесия колеблются электроны.

Thomson's atomic model



**Эрнст Резерфорд** открыл  $\alpha$ - и  $\beta$ -излучение короткоживущих изотопов радона и множество других изотопов.

Объяснил радиоактивность тория, открыл и объяснил радиоактивное превращение химических элементов, создал теорию радиоактивного распада, обнаружил протон. Доказал, что  $\alpha$ -частица — ядро гелия.

Поставив опыт по рассеянию  $\alpha$ -частиц на металлической фольге, сделал вывод о существовании в атоме массивного ядра.

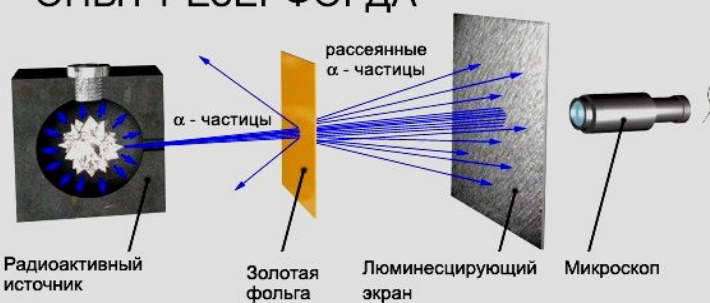
Предложил планетарную модель атома.

Открыл образование новых химических элементов при распаде тяжелых радиоактивных элементов.



Эрнст Резерфорд (1871-1937)

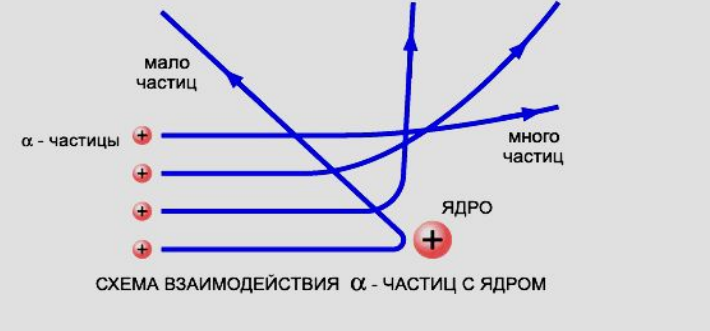
**ОПЫТ РЕЗЕРФОРДА**



The diagram illustrates the experimental setup. On the left, a 'Радиоактивный источник' (Radioactive source) emits 'α - частицы' (alpha particles). These particles pass through a thin 'Золотая фольга' (Gold foil). Most particles pass straight through to a 'Люминесцирующий экран' (Luminescent screen), but some are deflected at large angles, labeled as 'рассеянные α - частицы' (scattered alpha particles). A 'Микроскоп' (Microscope) is used to observe the screen. To the right, two photographs of the luminescent screen are shown: the top one is taken without the foil, showing a central cluster of spots, and the bottom one is taken with the foil, showing a central cluster and scattered spots.

Радиоактивный источник    α - частицы    Золотая фольга    рассеянные α - частицы    Люминесцирующий экран    Микроскоп

Фотграфии люминесцирующего экрана при отсутствии золотой фольги в потоке α - частиц и при ее внесении в поток



This schematic shows the interaction between alpha particles and a nucleus. On the left, a 'ядро' (nucleus) is represented by a red circle with a '+' sign. Four horizontal blue lines represent 'α - частицы' (alpha particles) moving from left to right. One particle is deflected upwards, another downwards, and two are deflected significantly. Labels include 'мало частиц' (few particles) for the deflected paths and 'много частиц' (many particles) for the straight-through path. The text 'СХЕМА ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ α - ЧАСТИЦ С ЯДРОМ' (Scheme of interaction of alpha particles with a nucleus) is at the bottom.

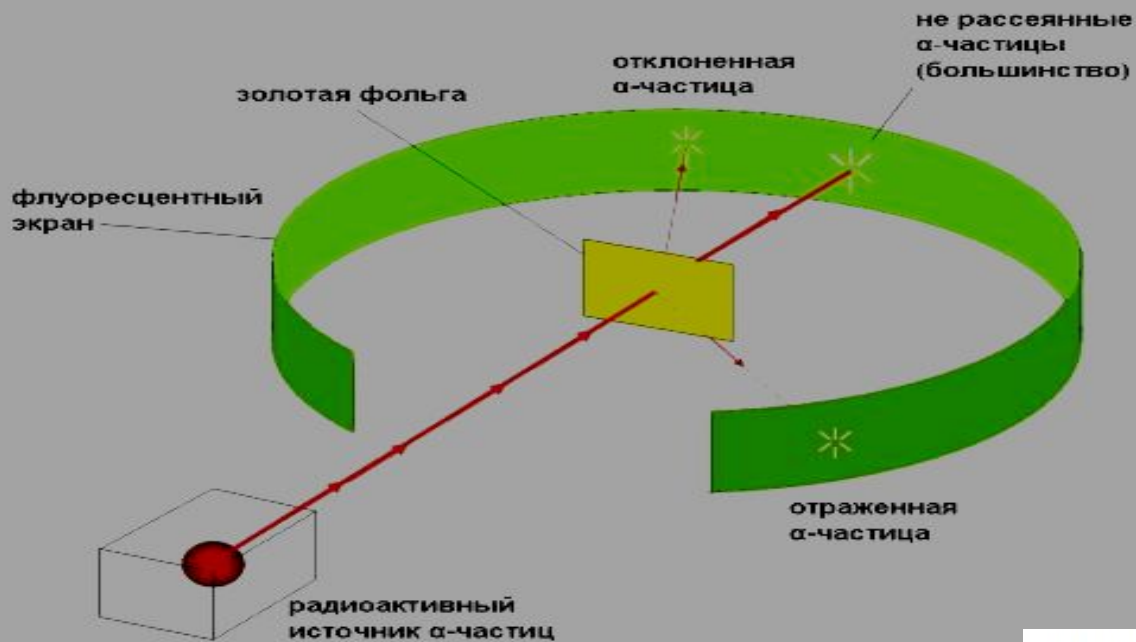
мало частиц    α - частицы    много частиц    ЯДРО

СХЕМА ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ α - ЧАСТИЦ С ЯДРОМ

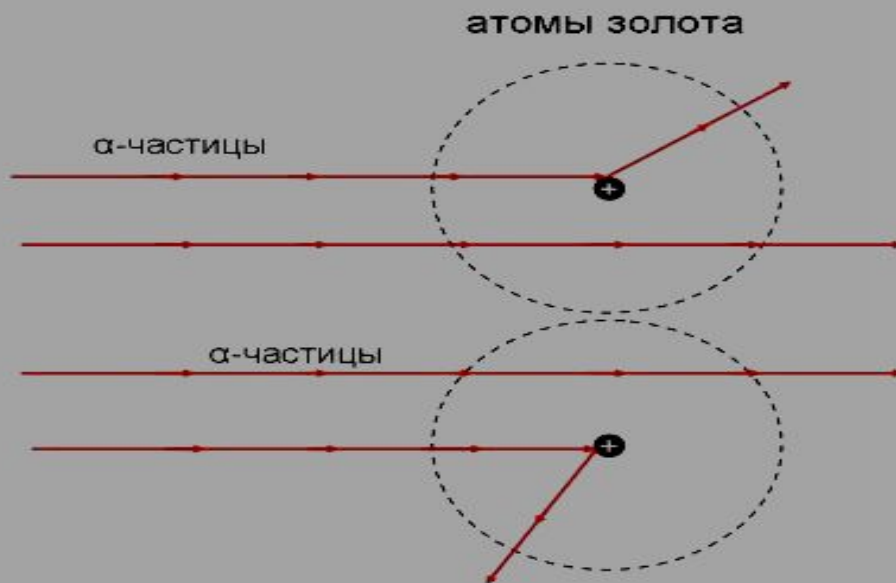
ДОПОЛНИТЕЛЬНЫЕ СВЕДЕНИЯ

Каждая вспышка вызывается ударом α - частицы об экран





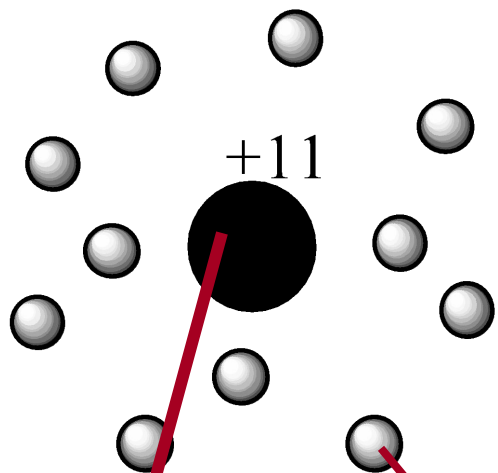
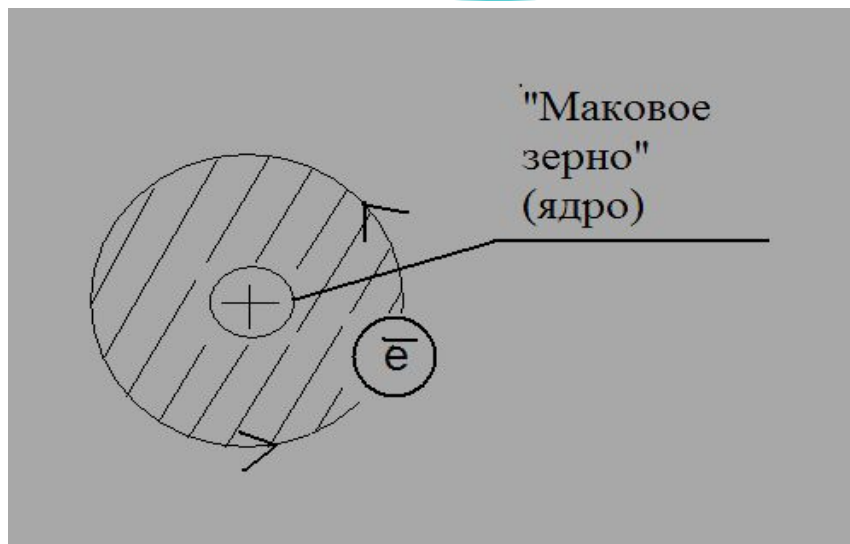
## Эксперимент Резерфорда (1908-1911)



Опыт Э. Резерфорда. Поток альфа-частиц проникает сквозь тонкую золотую фольгу толщиной приблизительно 10000 атомов. Пройдя сквозь золото, альфа-частицы вызывают вспышку при ударе об экран. По вспышкам на экране можно видеть отклонения части альфа-частиц от прямолинейной траектории.

# Как устроен атом?

1911 г. Э. Резерфорд



Подобную модель называют  
**ядерной или планетарной**

Электрон ( в 1867 раз легче ядра,  
 $v = 10^8$  м/с)

Ядро ( $1,67 \cdot 10^{-27}$  кг)

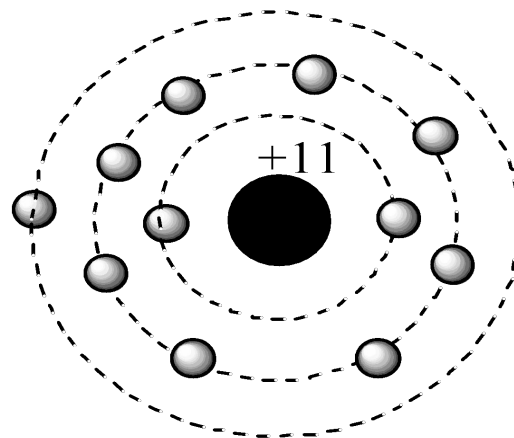
В 1913 г. **Нильс Бор** опубликовал серию статей «О строении атомов и молекул», открывших путь к атомной квантовой механике.



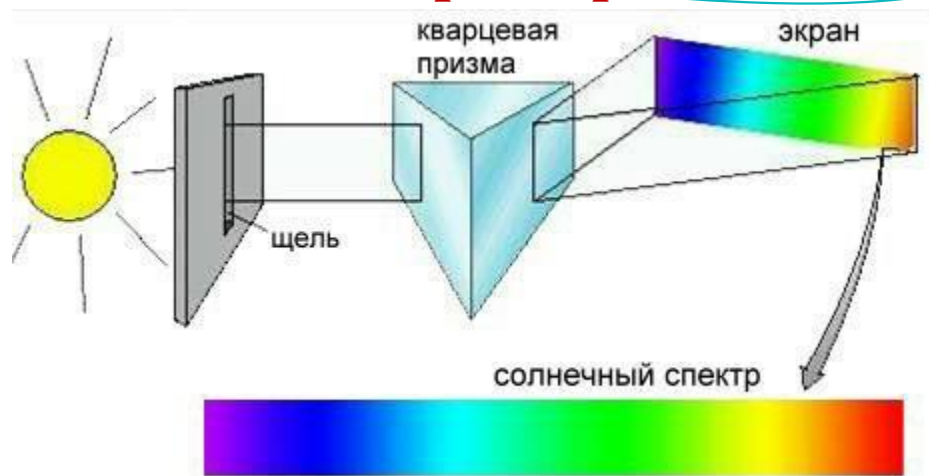
В **1913 г** *Нильс Бор* (Дания) предположил, что

- 1) электрон движется не по любым, а лишь по строго определённым («разрешённым», «стационарным») орбитам;
- 2) при этом не излучая и не поглощая энергии;
- 3) излучение происходит при перескоке с одной стационарной орбиты на другую порциями - квантами

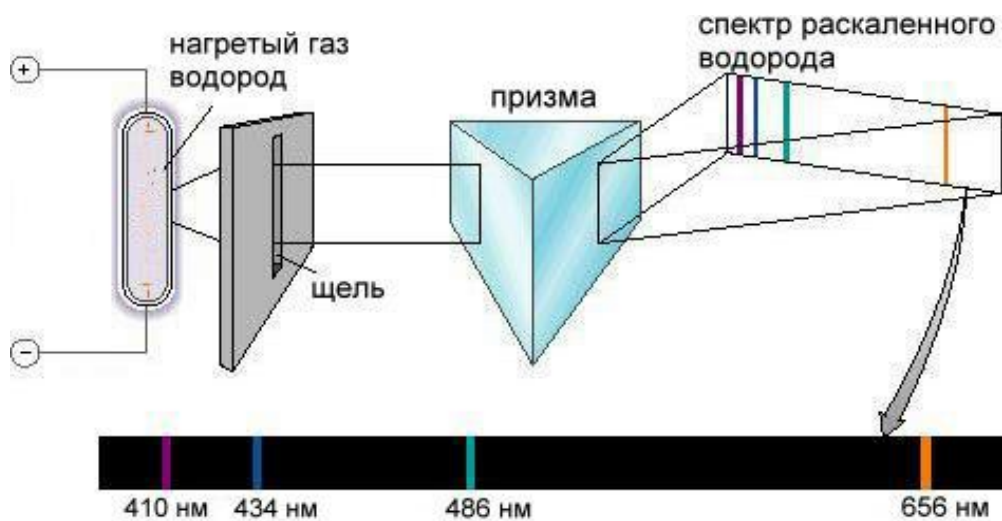
Нильс Бор (1885-1962)



# Спектр солнечного излучения, полученный с помощью простейшего спектрометра

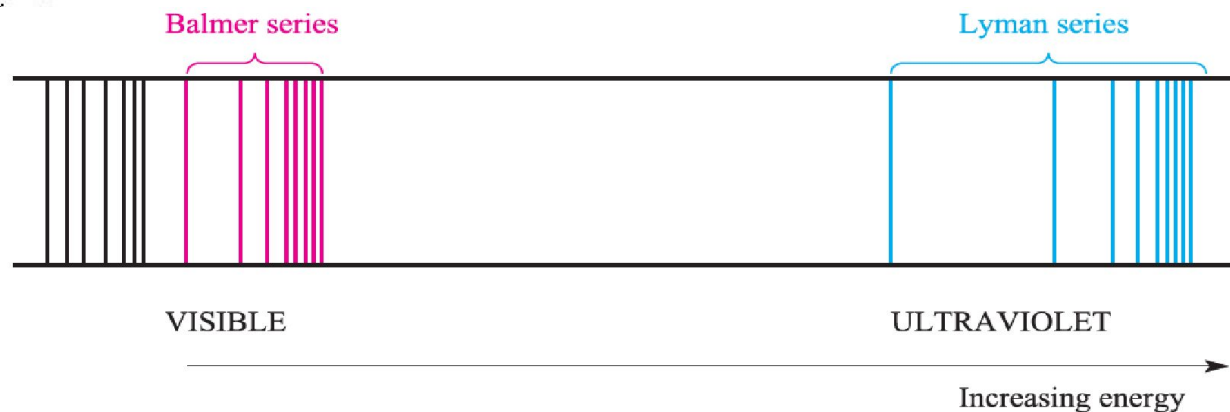
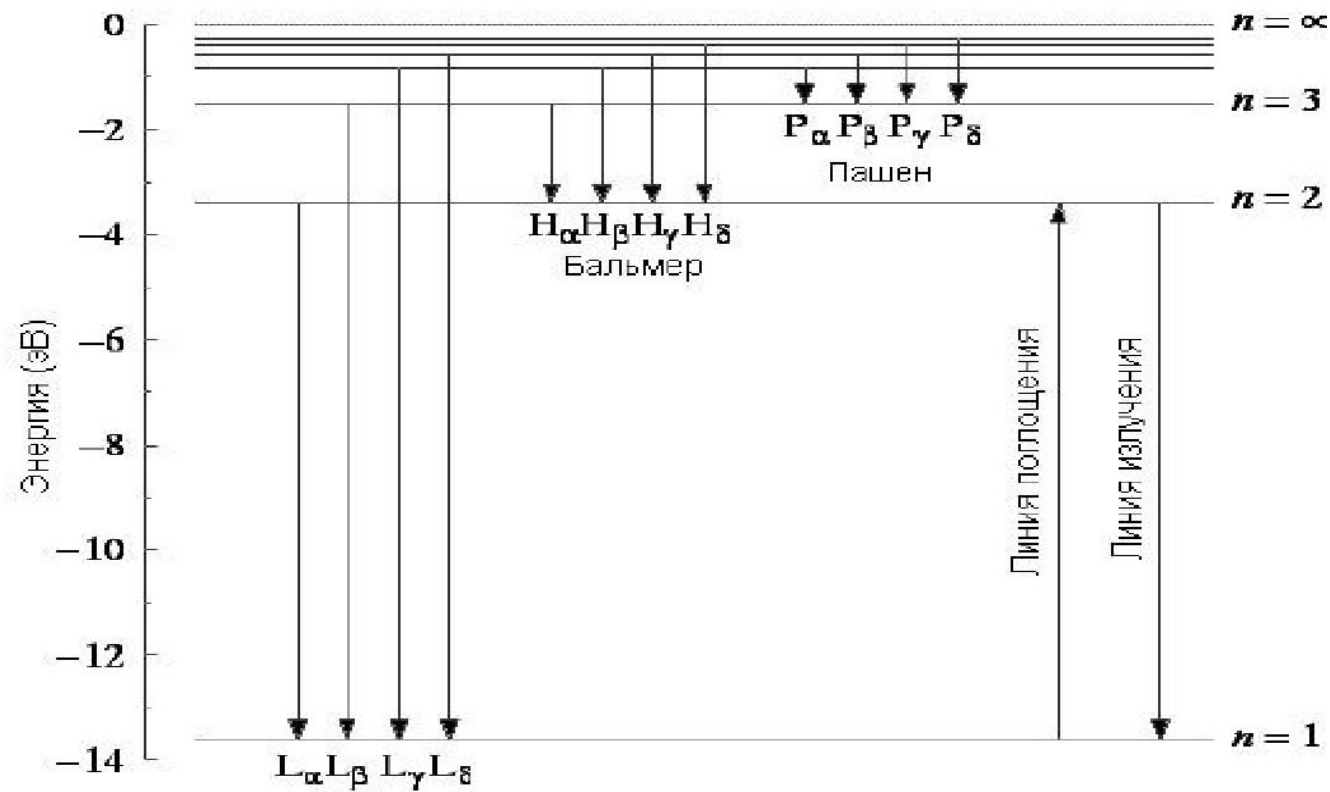


## Спектр испускания раскаленного атомарного водорода.

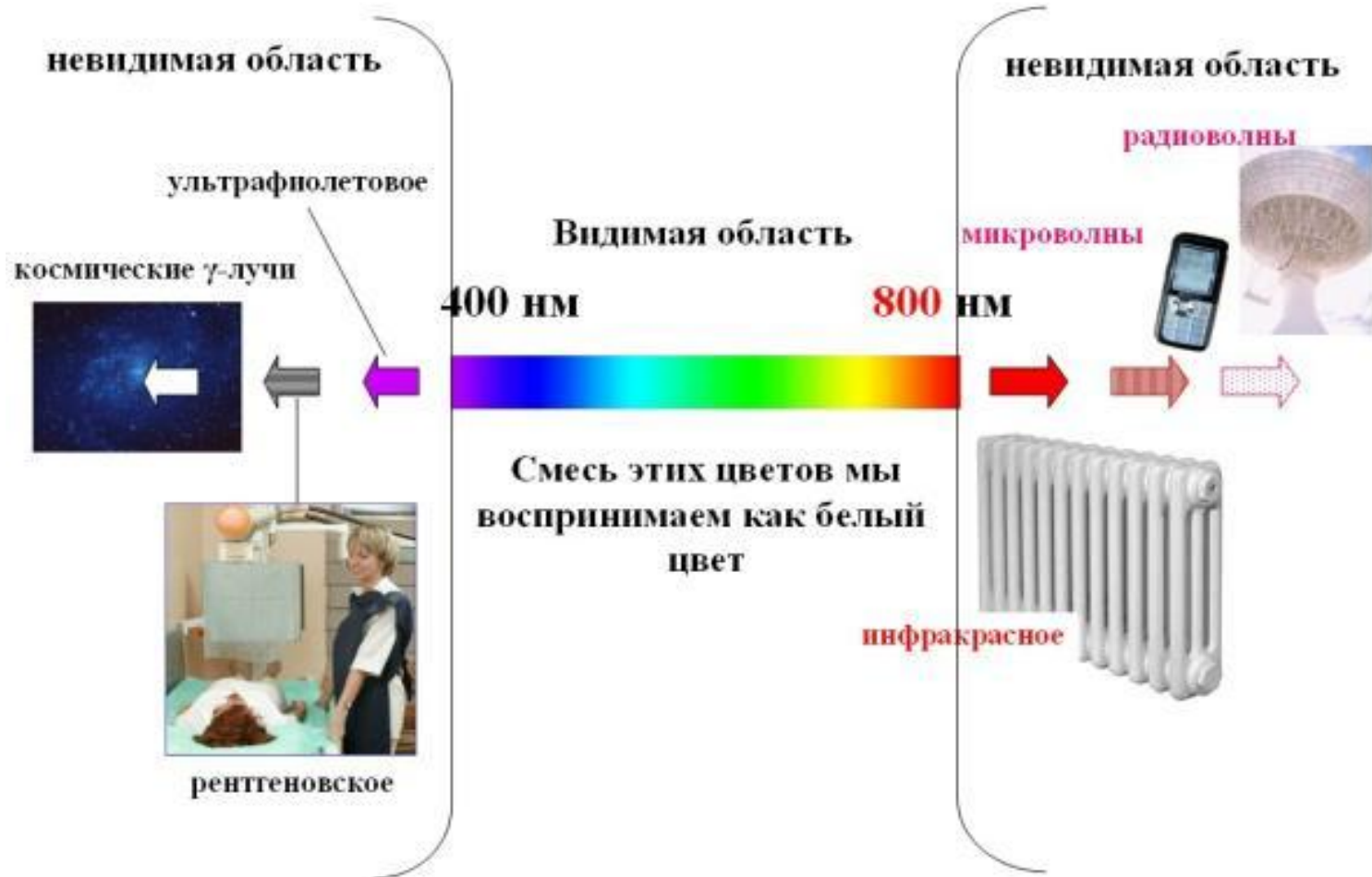


Водород в так называемой водородной лампе разогревается сильным электрическим разрядом. Испускаемый атомами водорода свет, пройдя через призму, дает спектр, состоящий из отдельных линий. На рисунке показана только видимая область спектра. Позже, с совершенствованием спектрометров, были открыты серии линий в ультрафиолетовой и в инфракрасной области.

# Водородоподобные атомы. Спектральные переходы

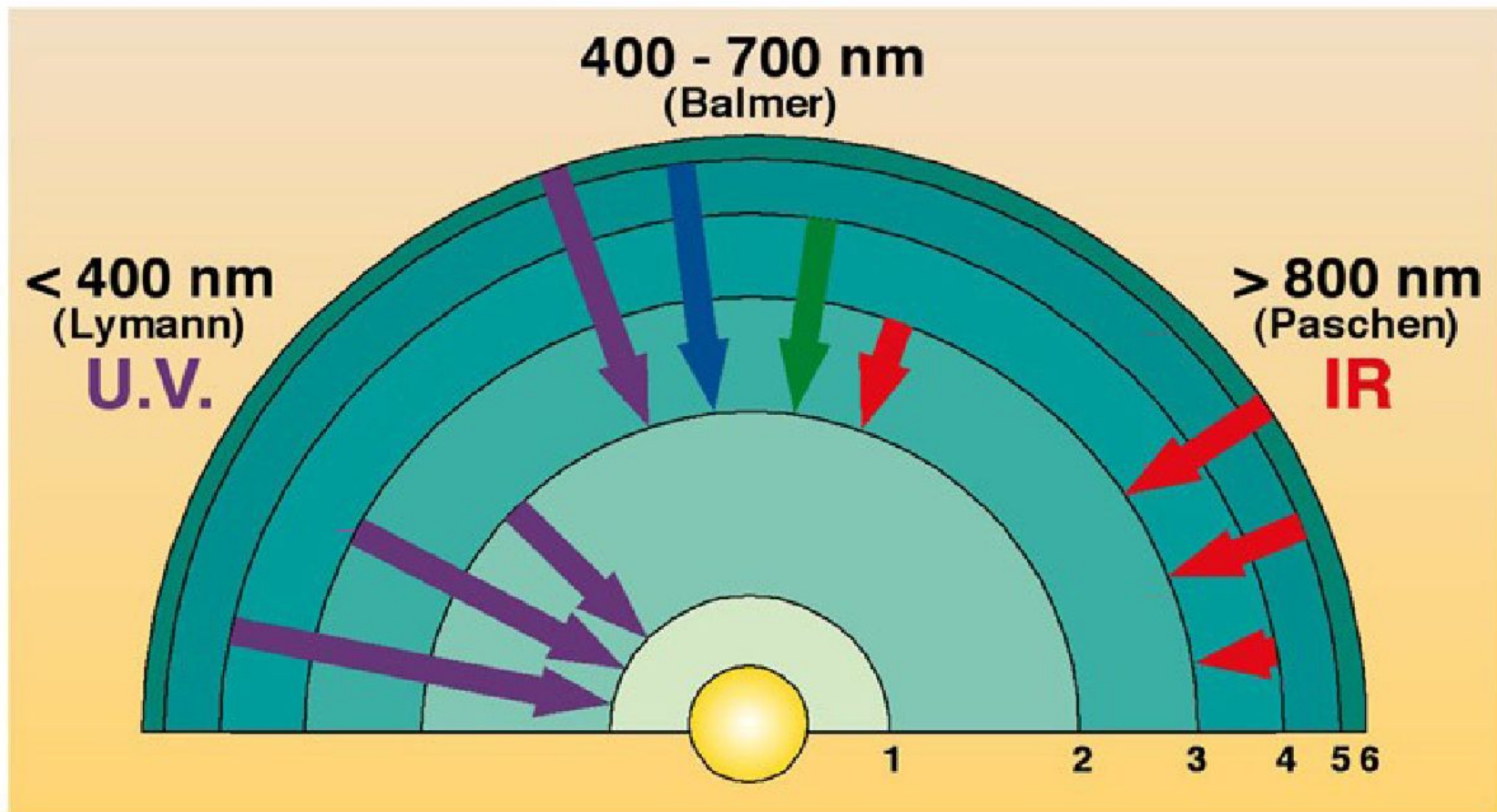


# Длины волн и названия некоторых видимых и невидимых областей солнечного спектра





# Спектр атома водорода



# Создатели квантовой механики



- Вернер Карл **Гейзенберг** (1901-1976)
- В 1925 г. разработал матричную
- механику – первый вариант
- квантовой механики.



- Эрвин **Шредингер** (1887-1961)
- В 1926 г. опубликовал новый подход
- динамического описания микрочастиц
- (уравнение Шредингера)



# 1-е Положение Квантовой Механики – Дуализм электронов

Французский ученый *Луи де Бройль* (1892—1987), развивая представления о двойственной корпускулярно-волновой природе света, выдвинул в 1923 году гипотезу об ее универсальности.

Он предположил, что не только фотоны, но и электроны и любые другие частицы материи наряду с корпускулярными обладают также волновыми свойствами.

Согласно де Бройлю, с каждым микрообъектом связываются, с одной стороны, корпускулярные характеристики — **энергия  $E$**  и **импульс  $P$** , а с другой стороны — волновые характеристики — **частота  $\gamma$**  и **длина волны  $\lambda$** .

Таким образом, для атомного объекта существует возможность проявлять себя, в зависимости от внешних условий, либо как волна, либо как частица, либо промежуточным образом. Именно в этой возможности различных проявлений свойств, присущих микрообъекту, и состоит дуализм волна — частица.

$$\lambda = \frac{h}{mv} \quad \text{— уравнение волн материи Луи-де-Бройля}$$

## 2-е Положение Квантовой Механики - Принцип неопределенности Гейзенберга

1. **Невозможно** с высокой степенью точности установить координаты местоположения и величину скорости движения микрочастицы для которой присущи корпускулярно-волновые свойства, т.е. для электрона.

$$\Delta x \cdot \Delta v_x = \frac{h}{m_e} - \text{принцип неопределенности}$$

2. Применительно к электрону в атоме нельзя говорить о стационарном движении электрона по орбитам – **стационарных орбит нет.**

## 3-е Положение Квантовой Механики -

**В 1926г Шредингеру** удалось в одной форме отразить корпускулярные и волновые свойства атома, основываясь на постулатах Луи-де-Бройля и Принципе неопределенности Гейзенберга и точно решить **уравнение для простейшего атома водорода.**

Рассматривая волновое поведение движущегося электрона в атоме он применил математический аппарат, описывающий движение волны в трехмерном пространстве - **уравнение Шредингера.**

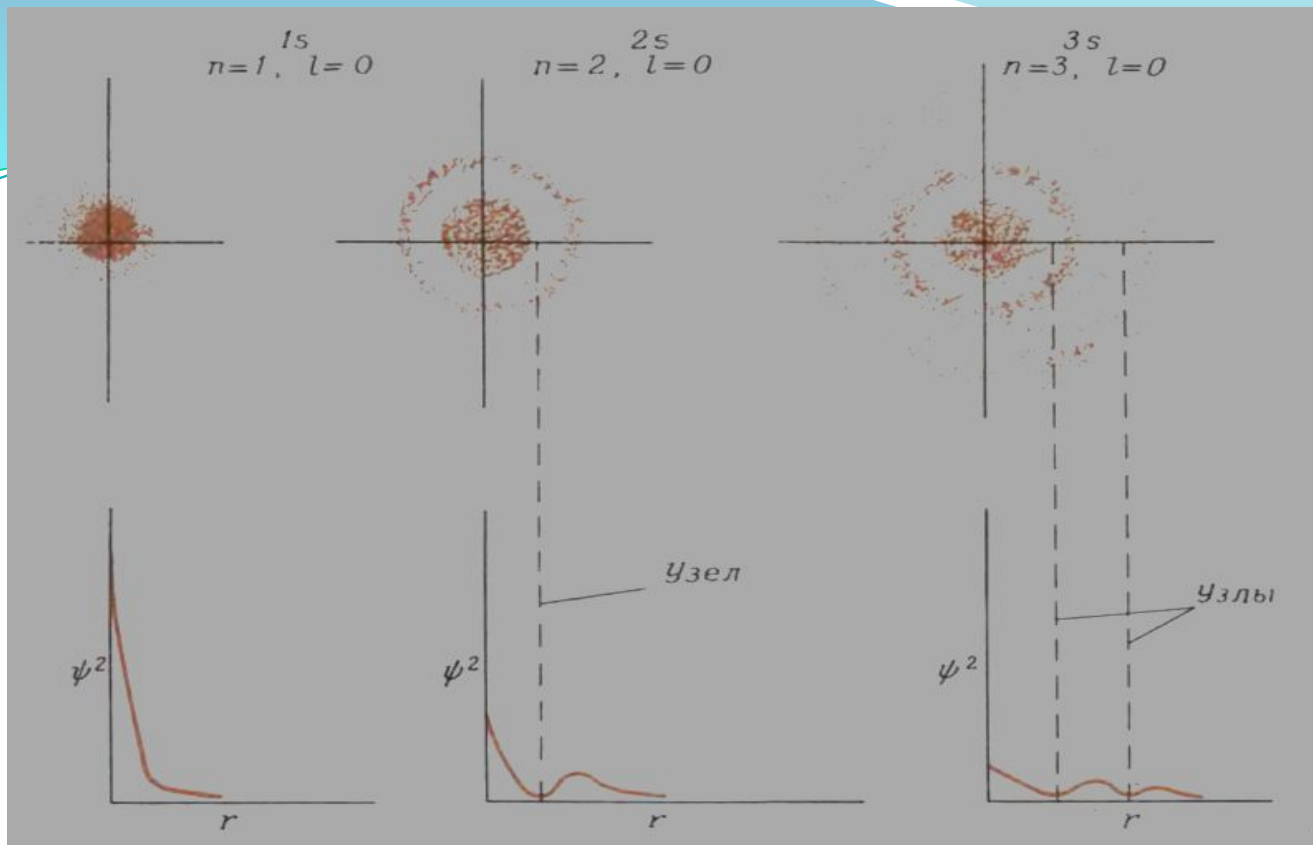
В 1926 году австрийский физик **Э. Шредингер** предложил уравнение, описывающее движение микрочастиц, проявляющих волновые свойства, которое связало энергию, координаты и волновую функцию  $\psi$ , квадрат которой пропорционален вероятности нахождения электрона в некотором объеме пространства, окружающего точку с координатами  $x$ ,  $y$  и  $z$ .

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{d^2\psi}{dy^2} + \frac{d^2\psi}{dz^2} + \frac{8\pi^2 m}{h} (E - U)\psi = 0$$

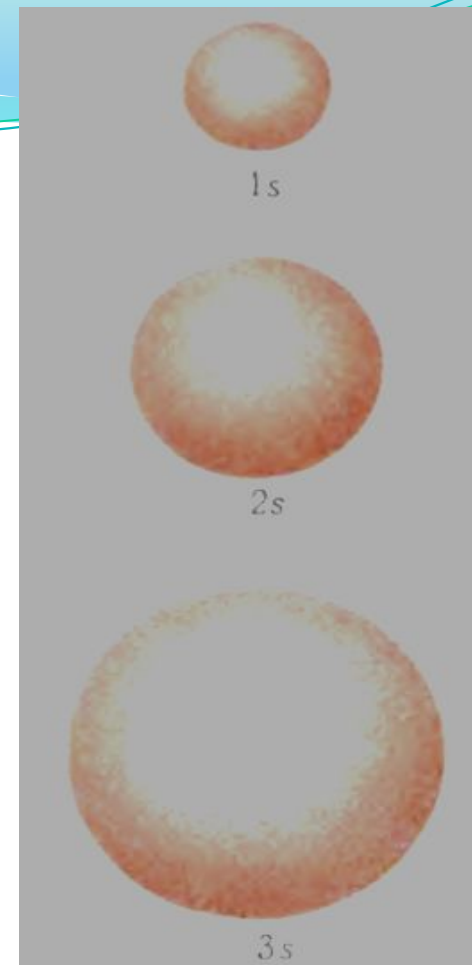
Решение уравнения Шредингера, т.е. математическое описание атомной орбитали (с указанием **трех** пространственных координат), возможно лишь при определенных значениях набора *трех целых чисел  $n$ ,  $l$ ,  $m_l$ , которые называют квантовыми*

Уравнение Шредингера точно решено только для атома водорода, т.е. для одного электрона в поле ядра.

Таким образом, энергия электрона имеет разные значения в зависимости от  $n$ , которое называется **главным квантовым числом**. Для водорода  $n = 1$ .

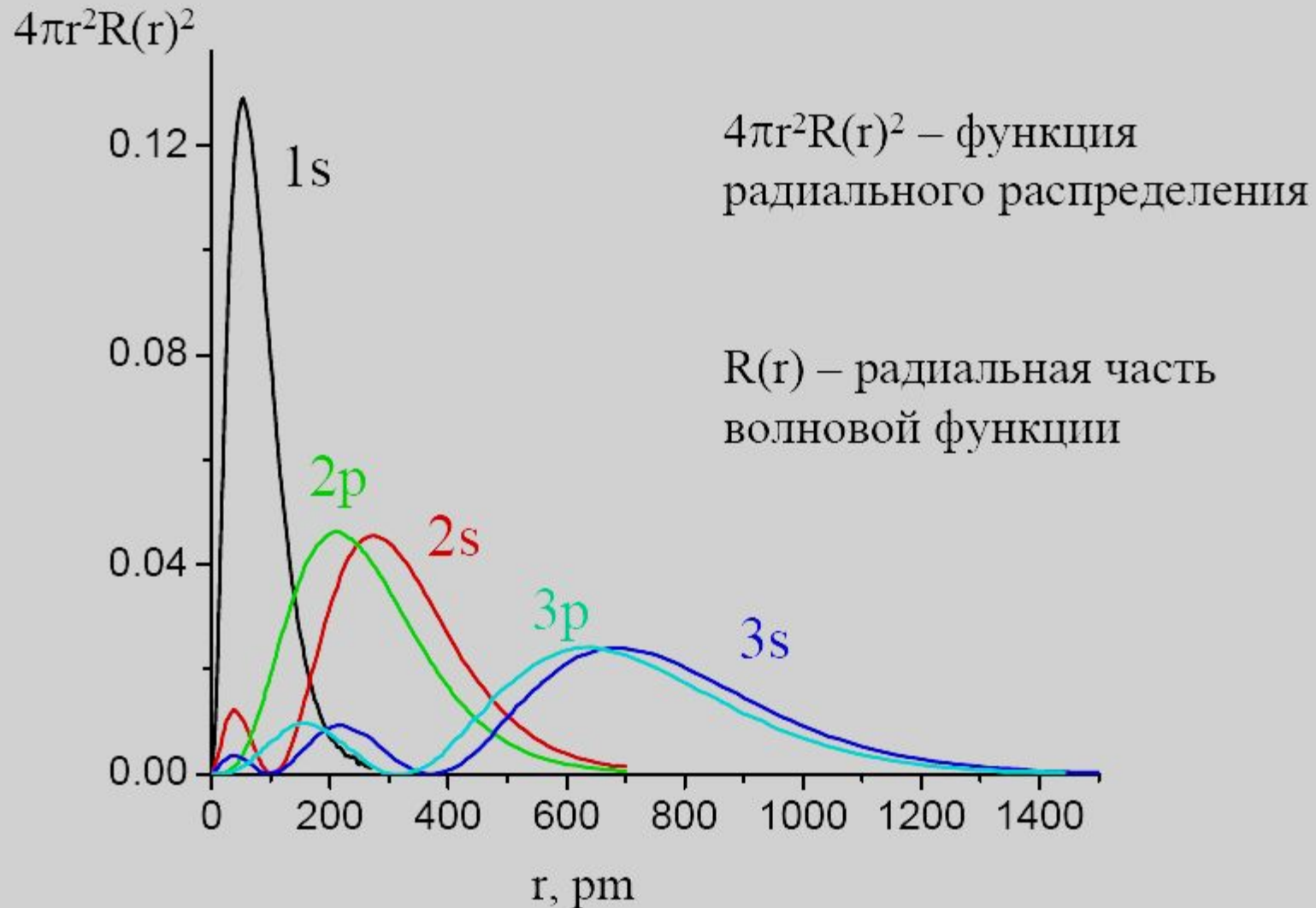


**Рис. 5.15.** Распределения электронной плотности для  $1s$ -,  $2s$ - и  $3s$ -орбиталей. В нижней части рисунка показана зависимость электронной плотности, представленной функцией  $\psi^2$ , от расстояния от ядра. Для  $2s$ - и  $3s$ -орбиталей функция электронной плотности принимает нулевые значения на определенных расстояниях от ядра. Окружающие ядро сферические поверхности, на которых функция  $\psi^2$  принимает нулевые значения, называются узлами (узловыми поверхностями).



**Рис. 5.16.** Контурные изображения  $1s$ -,  $2s$ - и  $3s$ -орбиталей. Сферические поверхности соединяют точки, в которых функция  $\psi^2$  принимает постоянное значение. Эти поверхности охватывают пространство, в котором заключено 90% суммарного значения функции  $\psi^2$  для каждой орбитали.

# Протяженность орбиталей



# Главное квантовое число $n$ – определяет...

Характеризует энергию электрона в атоме и размеры электронного облака

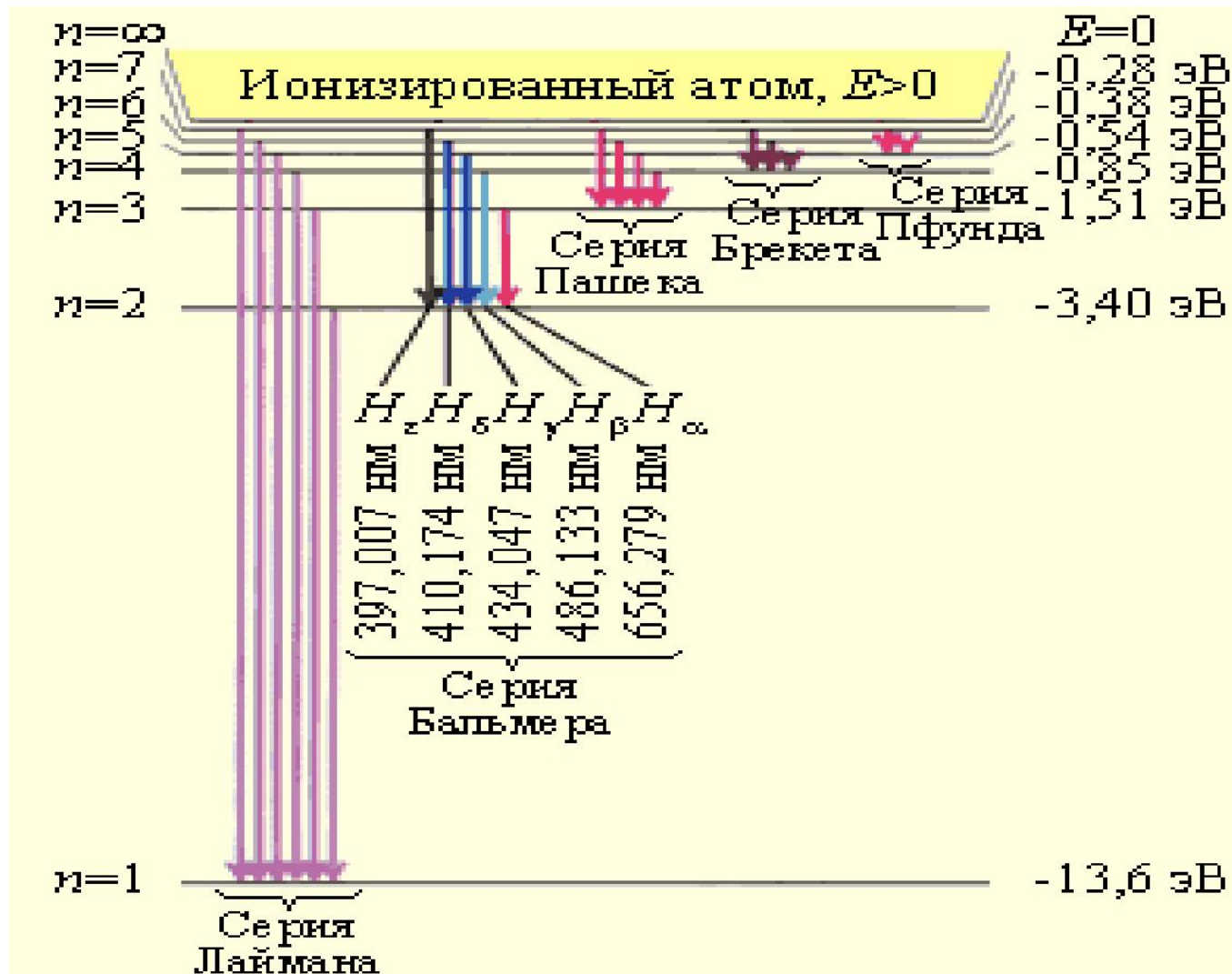
Принимает целочисленные значения **от 1 до  $\infty$**

Чем  $> n$ , тем большей энергией обладает электрон, и тем слабее он связан с ядром.....

<b><math>n =</math></b>	<b>1</b>	<b>2</b>	<b>3</b>	<b>4</b>	<b>5</b>	<b>6</b>	<b>7</b>
<b>Обозначение энергетического слоя</b>	<b>K</b>	<b>L</b>	<b>M</b>	<b>N</b>	<b>O</b>	<b>P</b>	<b>Q</b>

# Спектр атома водорода

Энергия излучения или поглощения  $= \Delta E = E_{\text{кон}} - E_{\text{нач}} = h\nu$ , эВ  
или кДж



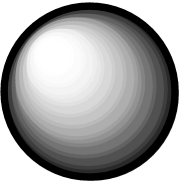

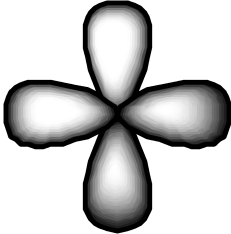


# Орбитальное (побочное) квантовое

число  $l$  – определяет форму электронного облака

Характеризует энергетический подуровень

Принимает целочисленные знач. от 0 до  $\infty$ ; всего  $(n-1)$  значений

$l$	0	1	2	3	4
Буквенное обозначение подуровня	s	p	d	f	g
Форма орбитали				СЛОЖН.	СЛОЖН.



## Атомные орбитали (АО)

Характеризуются **тремя** квантовыми числами и представляют собой **одноэлектронные** волновые функции  $\psi_{nlm}$

$l = 0$	1	2	3	4
<i>s</i>	<i>p</i>	<i>d</i>	<i>f</i>	<i>g</i>
резкий	главный	диффузный	фундаментальный	-
<i>sharp</i>	<i>principal</i>	<i>diffuse</i>	<i>fundamental</i>	-

**Число подуровней, на которые расщепляется энергетический уровень равно номеру уровня. Например,**

$n$	$l$	Обозначение подуровня
1	0 (одно значение)	1s
2	0;1 (два)	2s; 2p
3	0;1;2 (три)	3s; 3p; 3d

***Т.о., энергетический подуровень – это совокупность электронных состояний, характеризующихся определенным набором квантовых чисел  $n$  и  $l$***

# Магнитное квантовое число $m_l$

Характеризует различные ориентации электронных облаков в пространстве под действием внешнего магнитного поля

Принимает все целочисленные значения  
от  $-l$  до  $+l$

Например, при  $l=0$   $m_l = 0$ ;

при  $l=1$   $m_l = -1; 0; +1$ ;

при  $l=2$   $m_l = -2; -1; 0; +1; +2$ ;

Любому значению  $l$  соответствует  $(2l+1)$  возможных расположений электронного облака данного типа в пространстве. Именно,  $m_l = (2l+1)$

Следовательно, число значений  $m_l$  это число орбиталей с данным значением  $l$

**s** - состоянию соответствует одна орбиталь (одно значение  $m_l$ )

**p** - состоянию – три орбитали

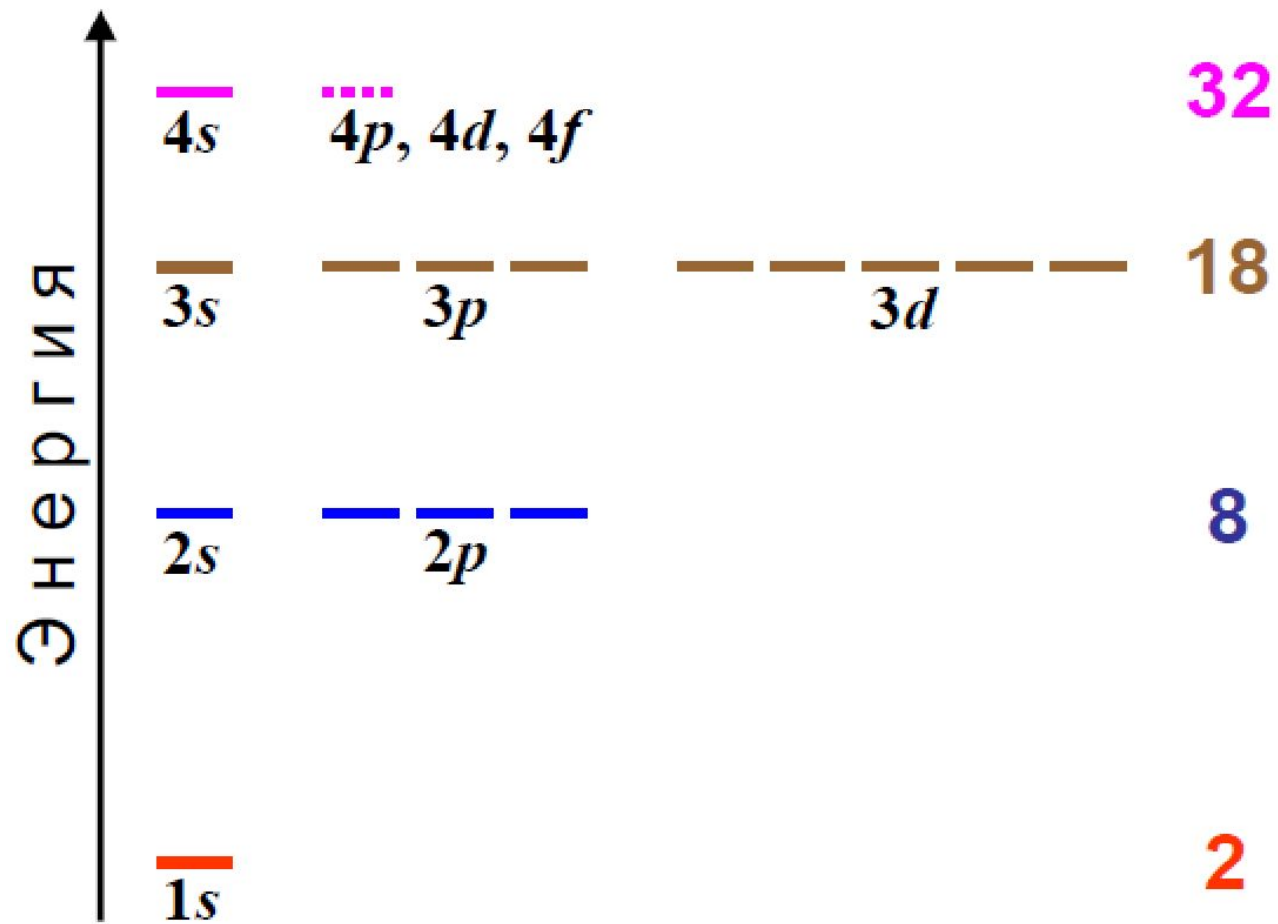
**d** - состоянию – пять орбиталей

**f** - состоянию – семь орбиталей

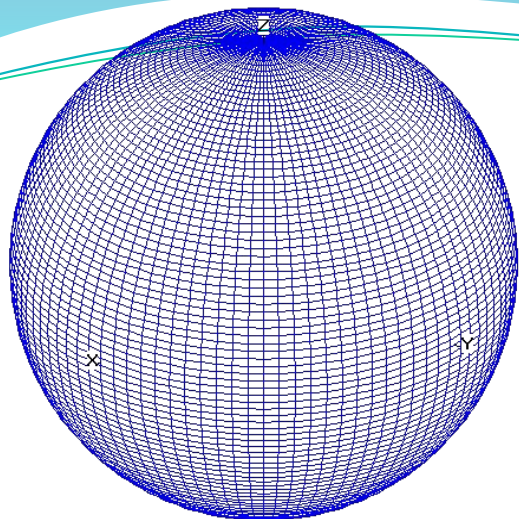
Число орбиталей на подуровне равно  $(2l+1)$ , а общее число орбиталей на энергетическом уровне равно  $n^2$

**Все орбитали, принадлежащие одному подуровню данного энергетического уровня, имеют одинаковую энергию в отсутствии магнитного поля (вырожденные)**

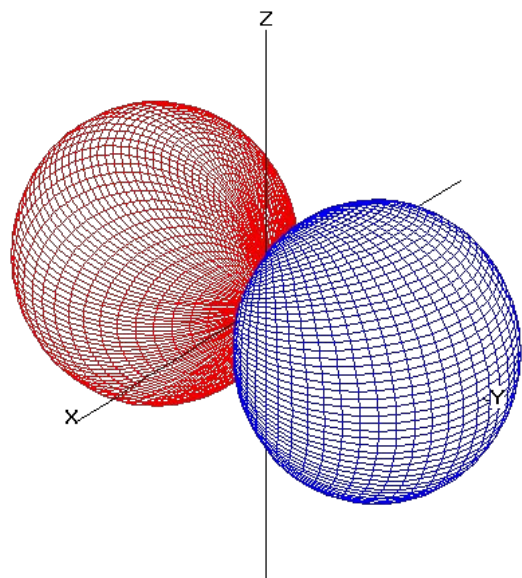
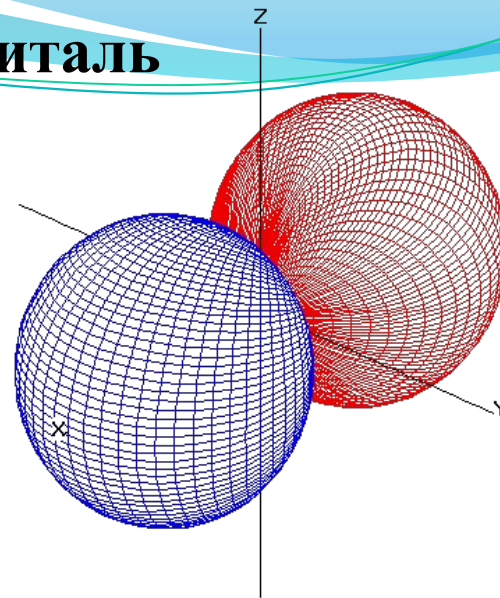
# Вырождение водородоподобных уровней



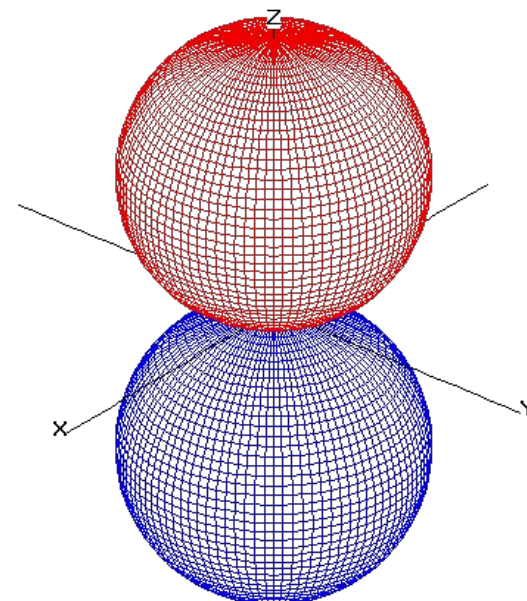
$p_x$  – орбиталь



$s$  – орбиталь

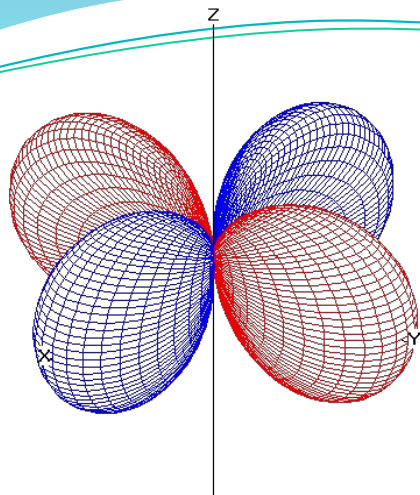


$p_y$  – орбиталь

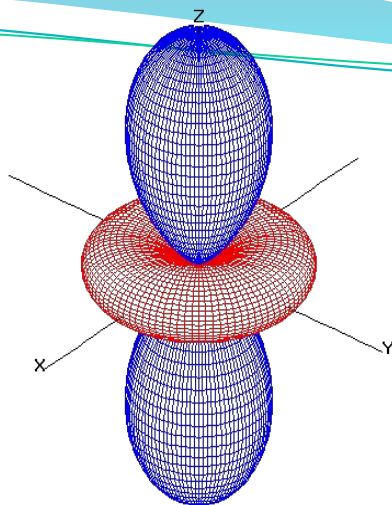


$p_z$  – орбиталь

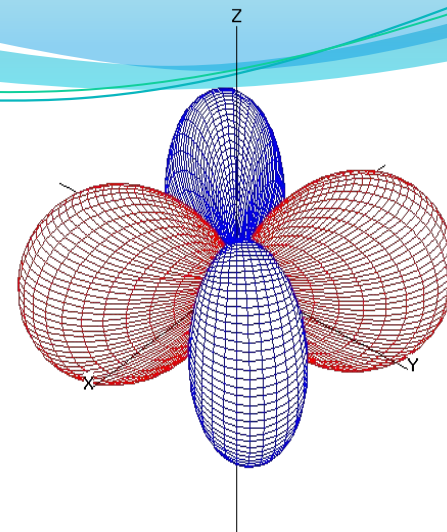




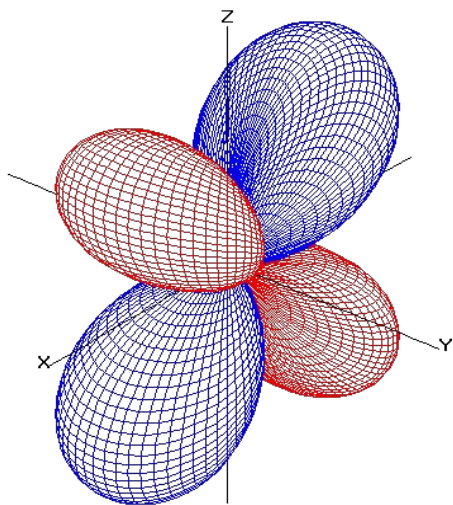
$d_{x^2-y^2}$  – орбиталь



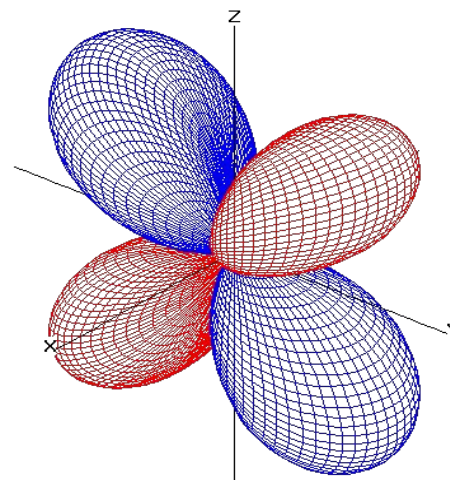
$d_{z^2}$  – орбиталь



$d_{xy}$  – орбиталь

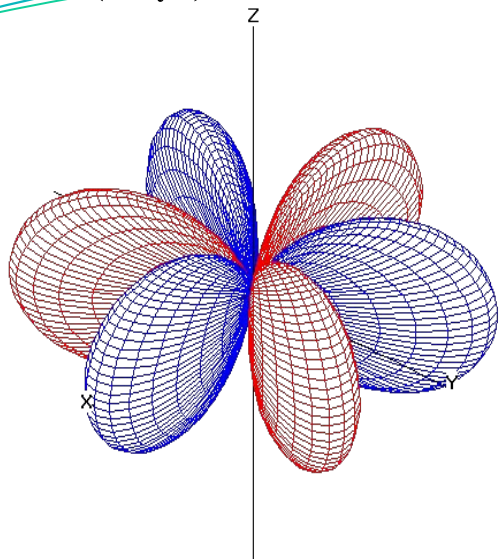


$d_{xz}$  – орбиталь

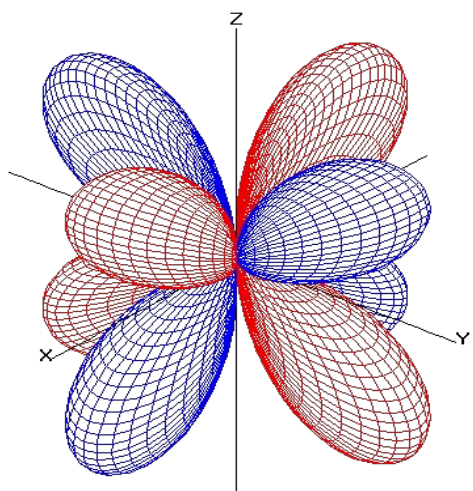
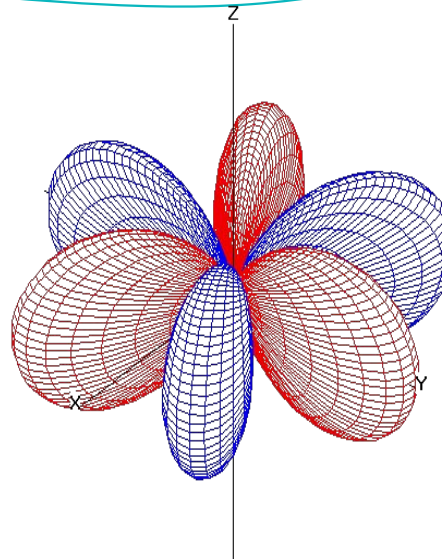


$d_{yz}$  – орбиталь

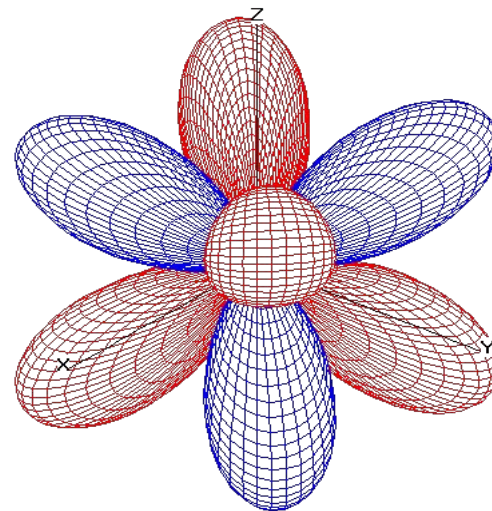
$f_{x(x^2-y^2)}$  – орбиталь



$f_{y(x^2-y^2)}$  – орбиталь

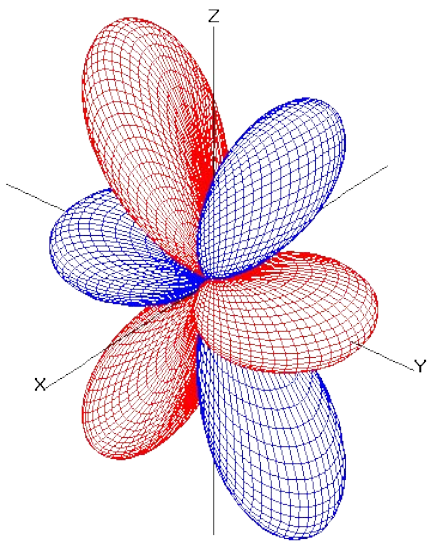


$f_{z(x^2-y^2)}$  – орбиталь

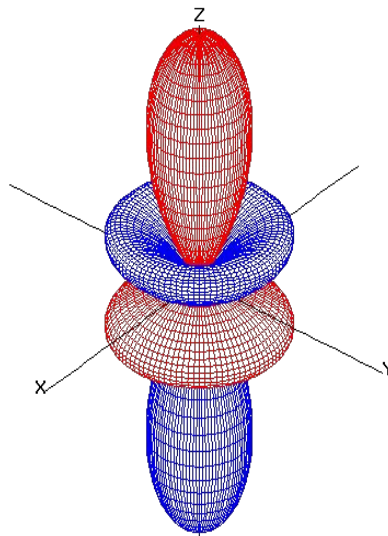


$f_{xyz}$  – орбиталь

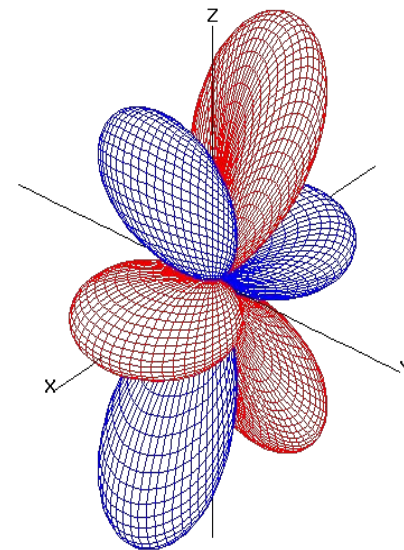




$f_{yz^2}$  – орбиталь

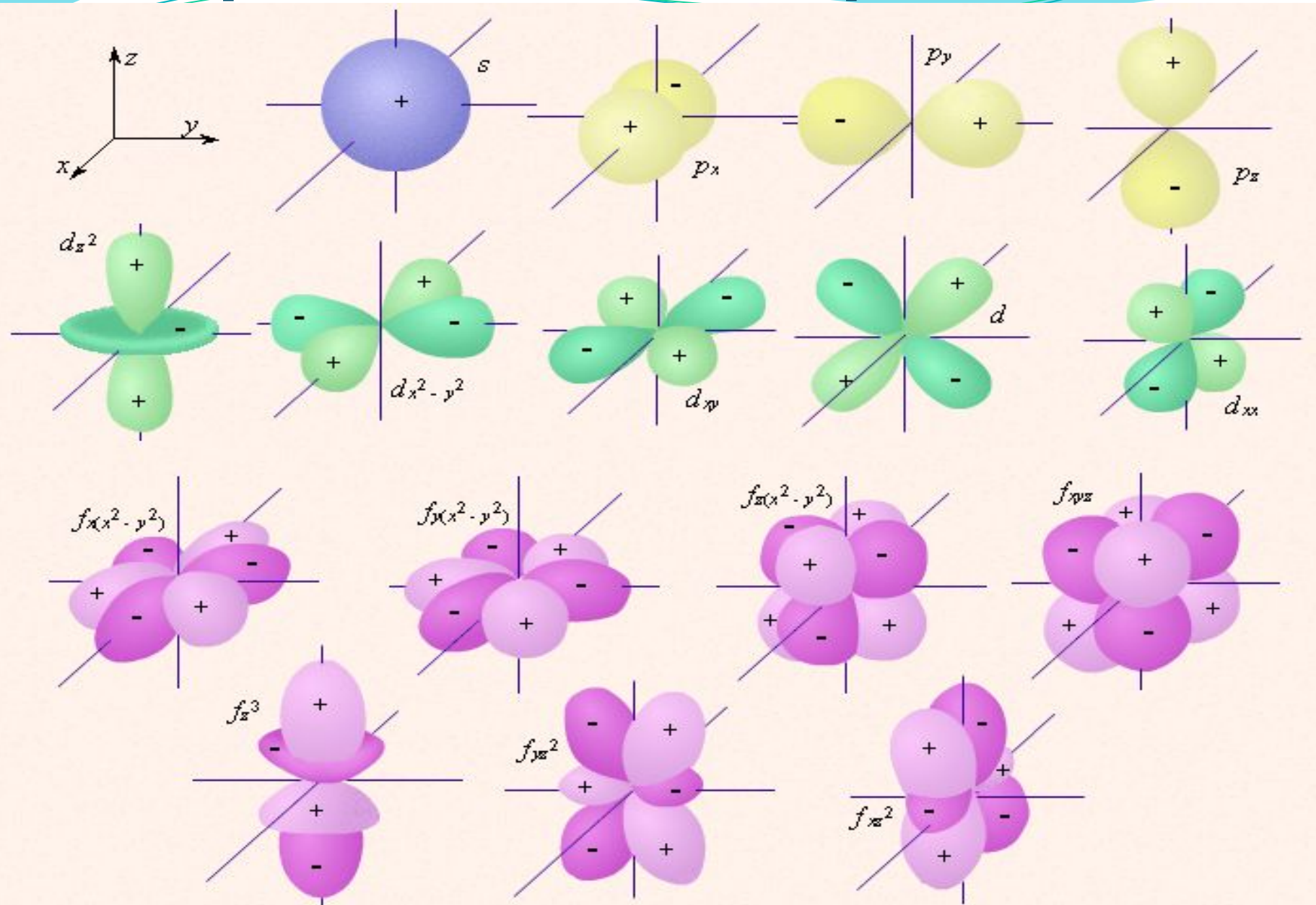


$f_{z^3}$  – орбиталь



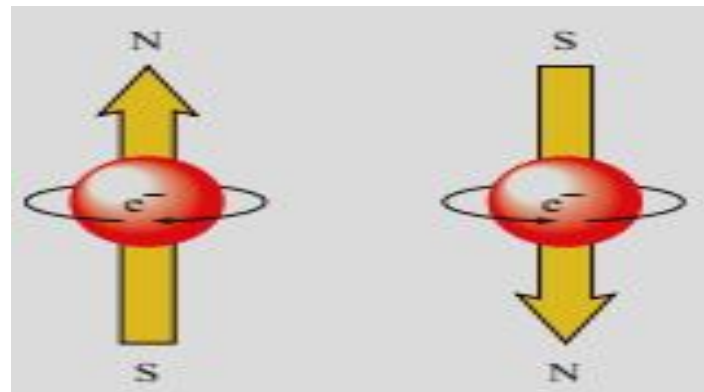
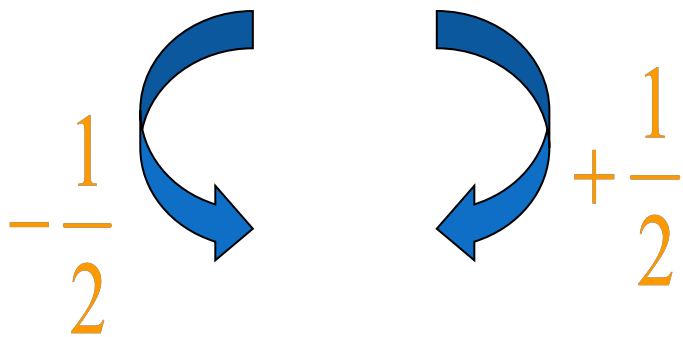
$f_{xz^2}$  – орбиталь

# Формы атомных орбиталей



# Спиновое квантовое число $m_s$

характеризует собственный магнитный момент электрона, связанный с вращением его вокруг своей оси - **по часовой стрелке и против часовой стрелки**. Спиновое квантовое число может принимать только два значения и в квантовой механике они приняты такими:  $\underline{m_s} = +1/2$  и  $\underline{m_s} = -1/2$



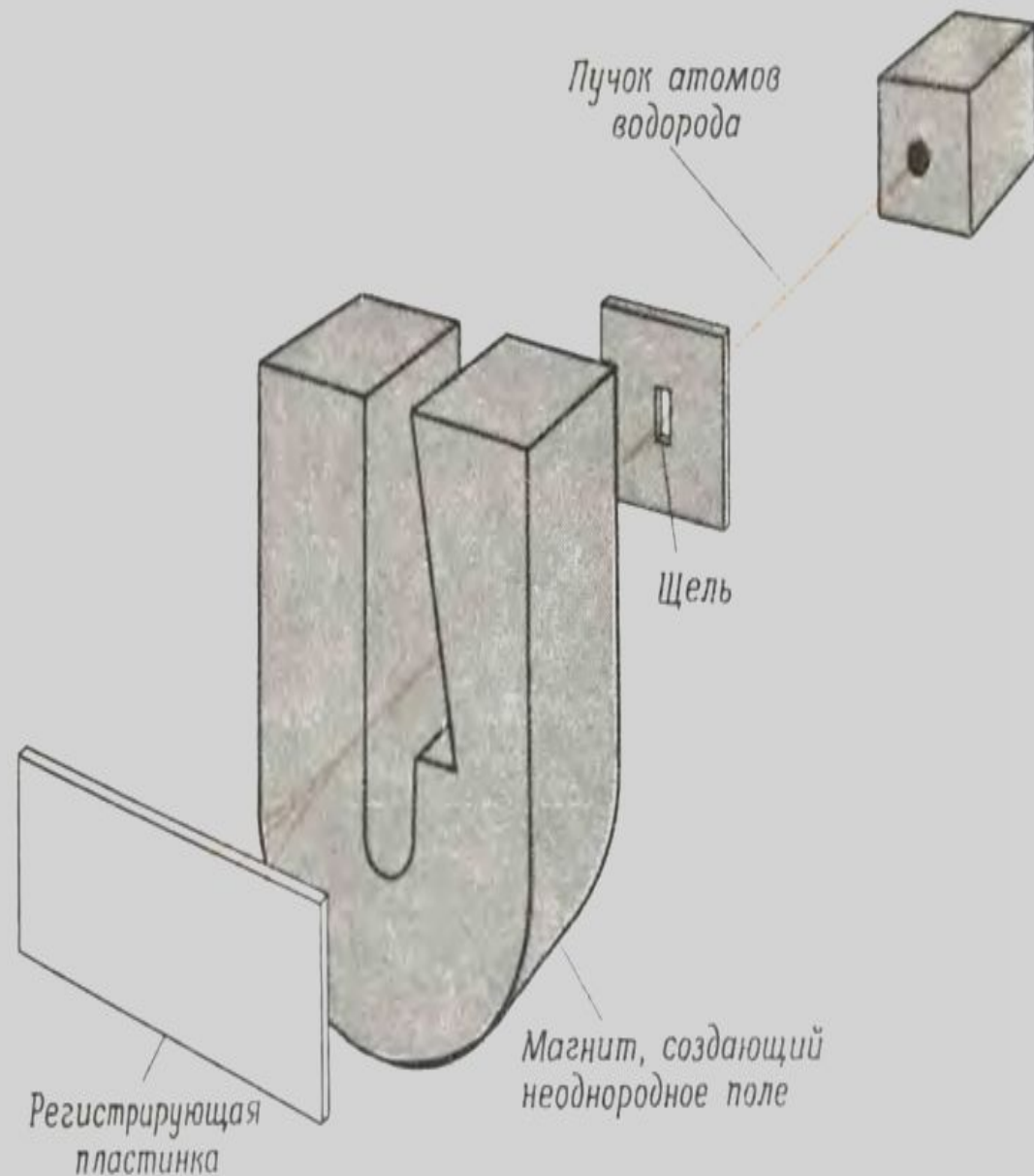


Рис. 6.3. Схема эксперимента Штерна–Герлаха. Пучок атомов водорода пропускают сквозь неоднородное магнитное поле. Атомы со спиновым квантовым числом  $m_s = +1/2$  отклоняются в одну сторону, а атомы со спиновым квантовым числом  $m_s = -1/2$  в противоположную сторону.

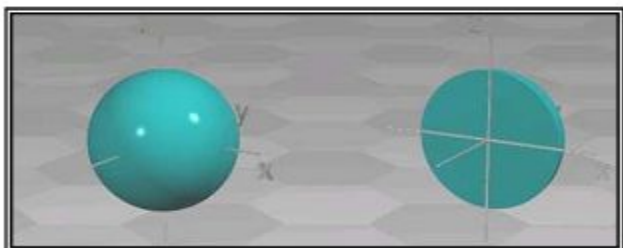


# Граничные поверхности $s$ - и $p$ -орбиталей

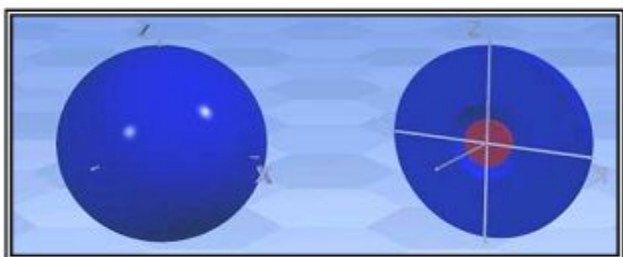
$n$

$ns$

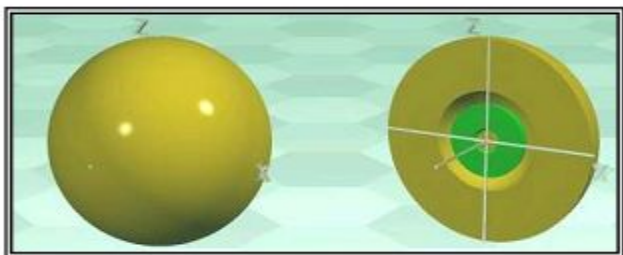
1



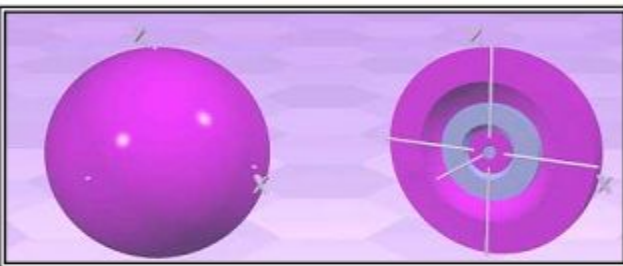
2



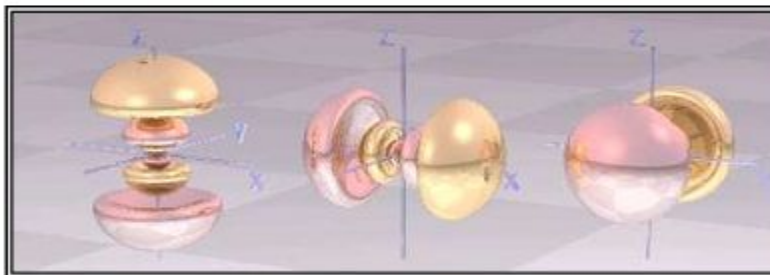
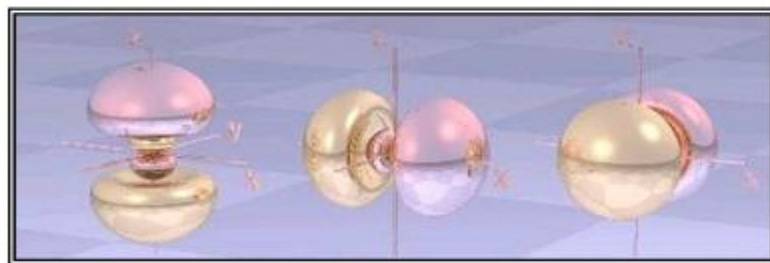
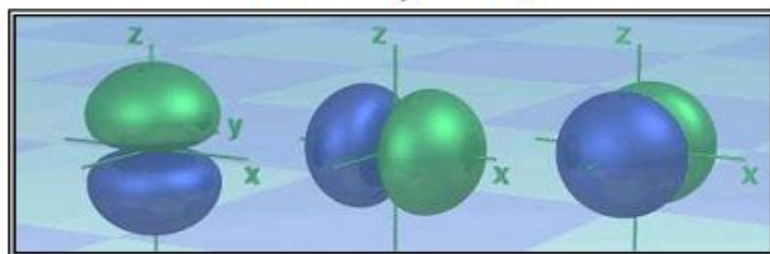
3



4



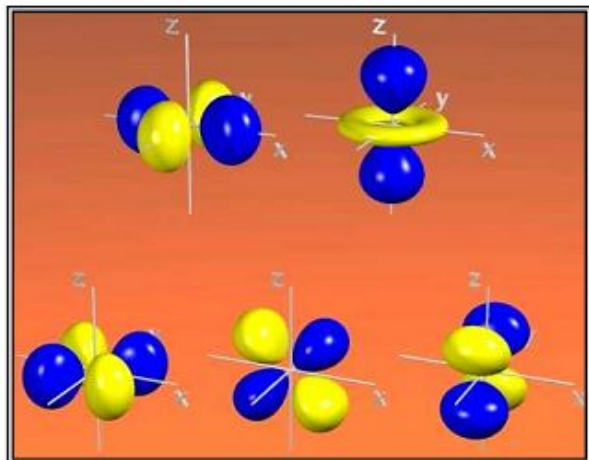
$np_x, np_y, np_z$



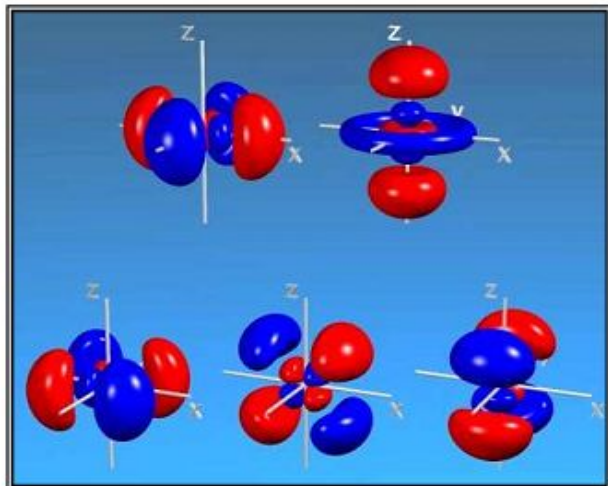
# Граничные поверхности $d$ - и $f$ -орбиталей

$nd_{x^2-y^2}, nd_{z^2}, nd_{xy}, nd_{xz}, nd_{yz}$

3



4



$4f_{y^3}, 4f_{x^3}, 4f_{z^3}, 4f_{x(z^2-y^2)}, 4f_{y(z^2-x^2)},$   
 $4f_{z(x^2-y^2)}, 4f_{xyz}$

