

Лекция № 2

Электронные конфигурации атомов.

Периодический Закон.

Периодическая система Д.И. Менделеева

Химическая связь

Распределение электронов по энергетическим уровням и подуровням изображают в виде

электронных формул

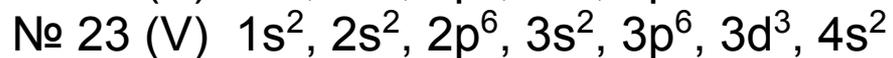
и энергетических ячеек так называемых **графических электронных формул**.



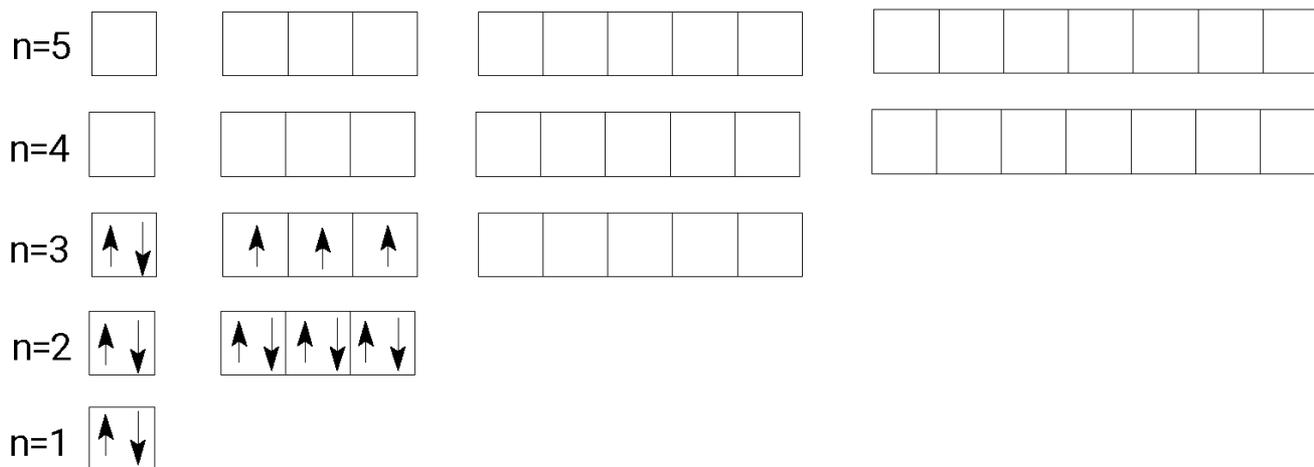
В графических электронных формулах

каждая орбиталь обозначается клеткой, стрелка – электрон, направление стрелки – направление спина, свободная клетка – свободная орбиталь.

Например, электронные формулы атомов элементов № 15 и № 23 имеют вид:



Для атома фосфора электронно-графическая схема:



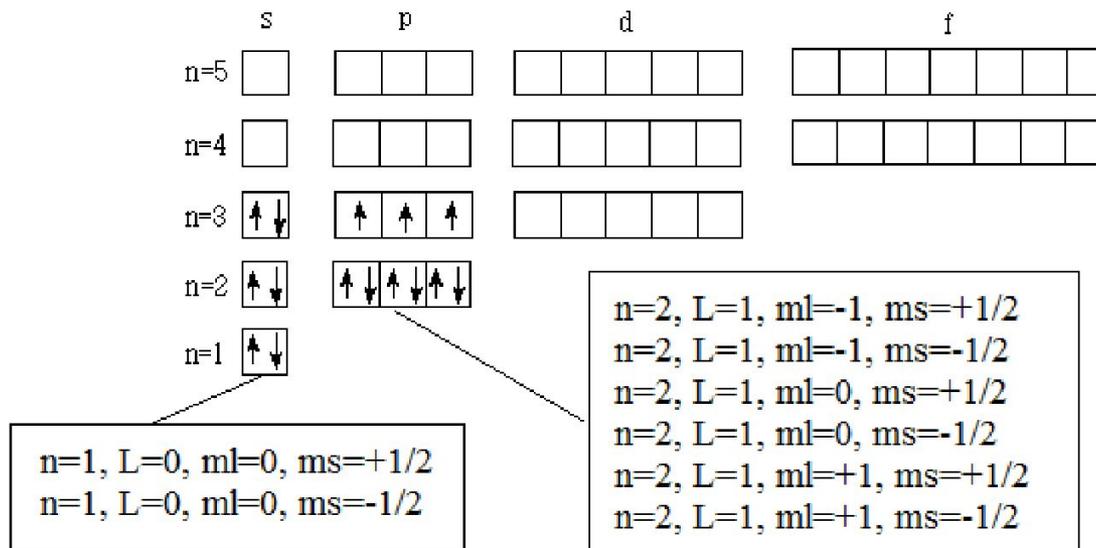
ПРАВИЛА ЗАПОЛНЕНИЯ УРОВНЕЙ И ПОДУРОВНЕЙ

1. Принцип Паули

В атоме не существует двух электронов с одинаковым набором квантовых чисел. Максимальное число электронов на энергетическом уровне определяется как $N = 2n^2$, а на подуровне – как $2(2L+1)$

Следствие:

на каждой орбитали может находиться не более 2-х электронов ($\downarrow\uparrow$).

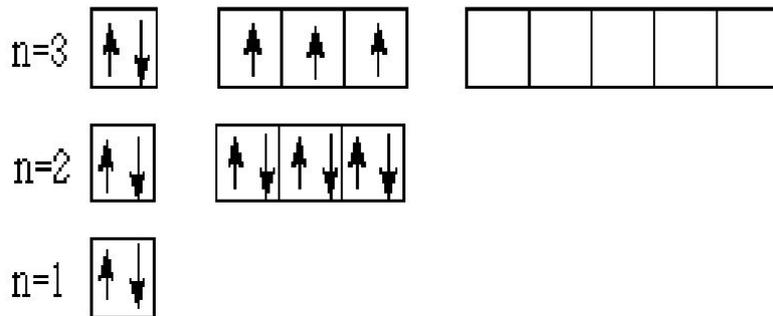


ПРАВИЛА ЗАПОЛНЕНИЯ УРОВНЕЙ И ПОДУРОВНЕЙ

2. Правило Хунда

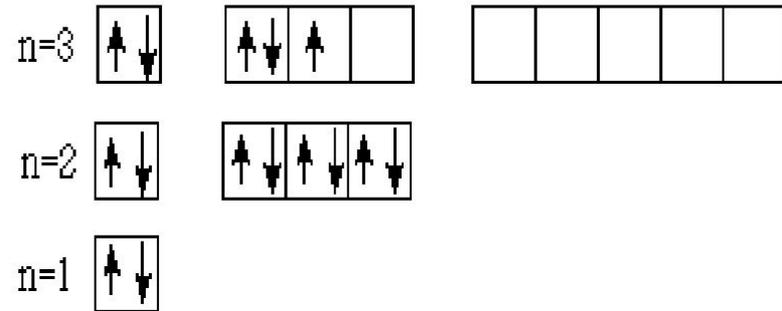
в пределах одного подуровня электроны располагаются по орбиталям таким образом, чтобы их суммарный спин был максимальным

$$+1/2+1/2+1/2=1,5$$



правильно

$$+1/2-1/2+1/2=1,0$$



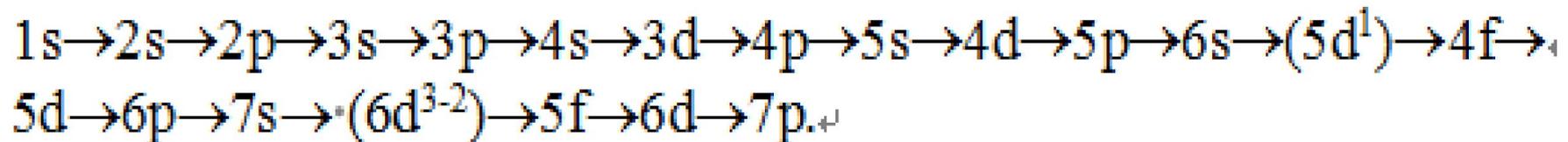
неправильно

ПРАВИЛА ЗАПОЛНЕНИЯ УРОВНЕЙ И ПОДУРОВНЕЙ

3. Принцип наименьшей энергии

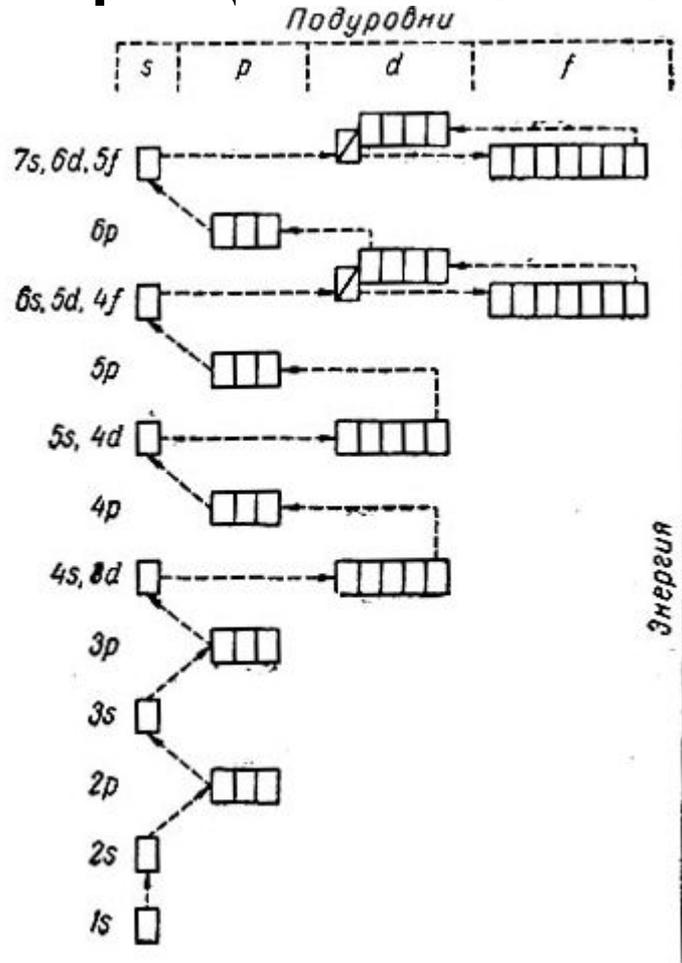
электроны заполняют орбитали в порядке возрастания энергии орбиталей.

Принцип реализован в правиле Клечковского. Клечковский показал, что из двух данных состояний меньшей энергии электрона отвечает состояние, которое характеризуется меньшей суммой $n+L$. Например, из двух состояний **3d** и **4s** – состояние **4s** отвечает меньшей энергии электрона в атоме, т. к. для **4s** ($4+0$) = **4** меньше чем для **3d** ($3+2=5$). В случае если для двух состояний одинакова, меньшей энергии отвечает состояние, характеризующееся меньшим значением n . В соответствии с этим заполнение электронами орбиталей происходит согласно ряду Клечковского:

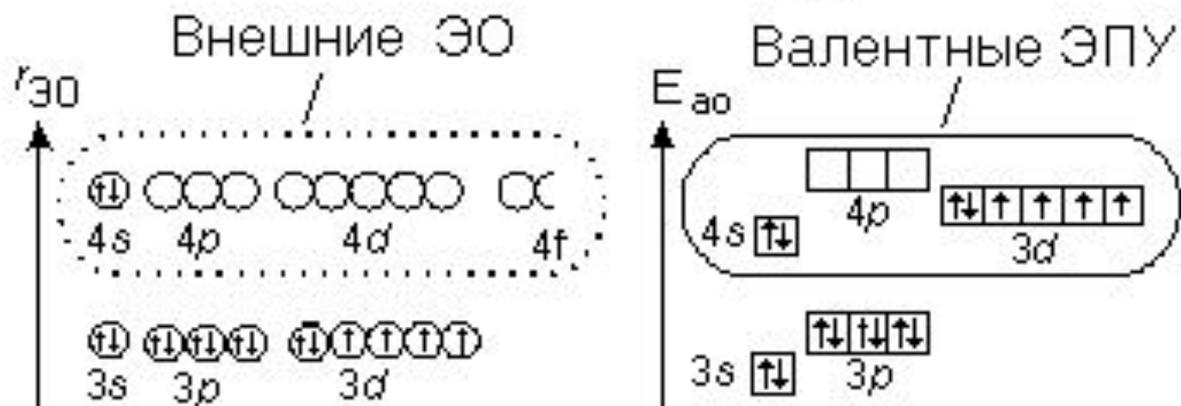
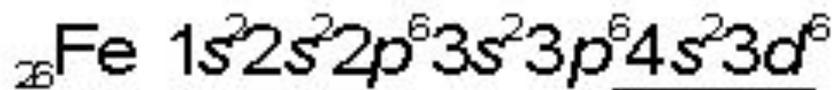
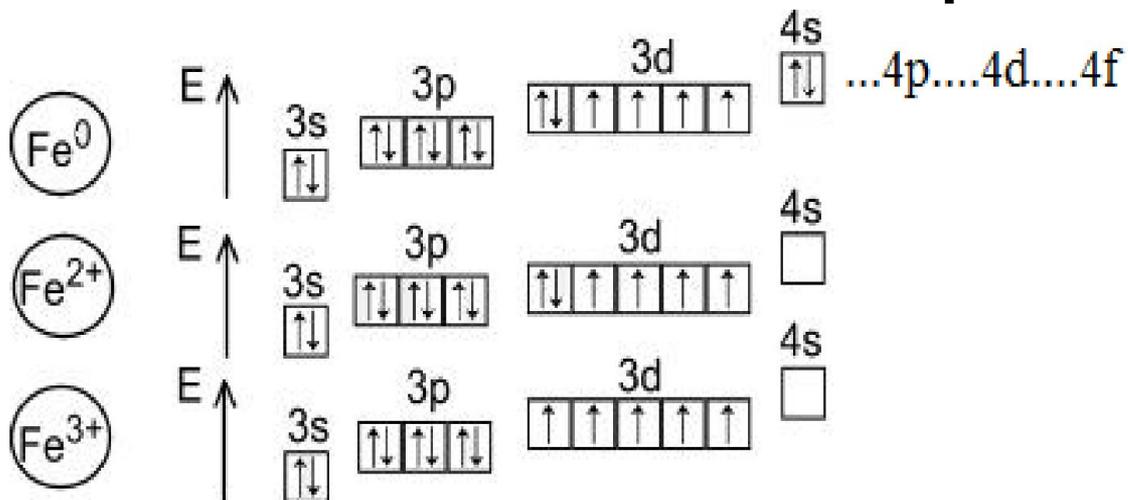


ПРАВИЛА ЗАПОЛНЕНИЯ УРОВНЕЙ И ПОДУРОВНЕЙ

3. Принцип наименьшей энергии



Валентные и внешние электроны



Периодичность в изменении основных атомных характеристик

«свойства химических элементов (т.е. свойства и форма образуемых ими соединений) находятся в периодической зависимости от заряда ядра атомов химических элементов»

ПЕРИОДИЧЕСКАЯ СИСТЕМА ХИМИЧЕСКИХ ЭЛЕМЕНТОВ Д. И. МЕНДЕЛЕЕВА

ПЕРИОДЫ	Г Р У П П Ы Э Л Е М Е Н Т О В																			
	A I	II A	III A	IV A	V A	VI A	VII A	A VIII	B											
1	(H)							H 1.00794 Водород	He 4.002602 Гелий											
2	Li 6.941 Литий	Be 9.0122 Бериллий	B 10.811 Бор	C 12.011 Углерод	N 14.007 Азот	O 15.999 Кислород	F 18.998 Фтор	Ne 20.179 Неон												
3	Na 22.99 Натрий	Mg 24.305 Магний	Al 26.9815 Алюминий	Si 28.086 Кремний	P 30.974 Фосфор	S 32.06 Сера	Cl 35.453 Хлор	Ar 39.948 Аргон												
4	K 39.098 Калий	Ca 40.08 Кальций	Sc 44.956 Скандий	Ti 47.88 Титан	V 50.941 Ванадий	Cr 51.996 Хром	Mn 54.938 Марганец	Fe 55.847 Железо	Co 58.933 Кобальт	Ni 58.71 Никель										
5	Rb 85.468 Рубидий	Sr 87.62 Стронций	Y 88.906 Иттрий	Zr 91.22 Цирконий	Nb 92.906 Нобий	Mo 95.94 Молибден	Tc 97.91 Технеций	Ru 101.07 Рутений	Rh 102.905 Родий	Pd 106.4 Палладий										
6	Cs 132.905 Цезий	Ba 137.33 Барий	La* 138.905 Лантан	Hf 178.49 Гафний	Ta 180.947 Тантал	W 183.85 Вольфрам	Re 186.207 Рений	Os 190.2 Осний	Ir 192.22 Иридий	Pt 195.08 Платина										
7	Fr [223] Франций	Ra [226] Радий	Ac** [227] Актиний	Rf [261] Рифторбий	Db [262] Дубний	Sg [263] Сейборгий	Bh [264] Бергвий	Hs [265] Хассий	Mt [266] Миттербий											
	R ₂ O		RO	R ₂ O ₃	RO ₂	R ₂ O ₅	RO ₃	R ₂ O ₇	RO ₄											
ЛАНТАНОИДЫ*	Ce 140.12 Цезий	Pr 140.907 Прометий	Nd 144.24 Неодимий	Pm [145] Прометий	Sm 150.36 Самарий	Eu 151.96 Европий	Gd 157.25 Гадолиний	Tb 158.925 Тербий	Dy 162.5 Диспрозий	Ho 164.93 Гольмий	Er 167.26 Ербий	Tm 168.93 Термий	Yb 173.04 Иттербий	Lu 174.967 Лютеций						
АКТИНОИДЫ**	Th 232.037 Торий	Pa 231.04 Протактиний	U 238.03 Уран	Np [237] Нептуний	Pu [244] Плутоний	Am [243] Америций	Cm [247] Кюрий	Bk [247] Беркелий	Cf [251] Калيفорний	Es [252] Эйнштейний	Fm [257] Фермий	Md [288] Менделеев	No [289] Нобелий	Lr [260] Лоренций						

Водород и гелий.

Водород H (1e): Начинается заполнение первого электронного слоя, оболочка – 1s.



У гелия He (2e) на эту оболочку приходит второй электрон, и она полностью заполнена:

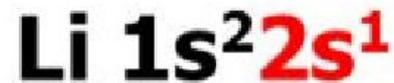


**ПЕРВЫЙ ЭЛЕКТРОННЫЙ СЛОЙ
ЗАПОЛНЕН.**

Литий, бериллий, бор

Переходим к **литу** (3e). У него начинается заполняться **второй слой**, у лития 2 электрона на первом слое и 1 электрон на втором.

Второй слой тоже начинается с **s-оболочки**:



У **бериллия** (4e) на этот **s-подуровень** приходит второй электрон.

Затем у **бора** (5e) начинается заполнение следующего подуровня второго слоя: **2p-подуровня**:



Углерод – неон.

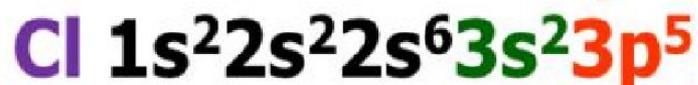
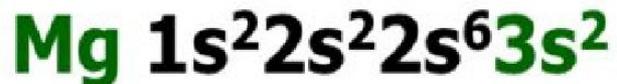
У следующих за бором пяти атомов продолжается заполнение **2p-оболочки**, вплоть до **неона (10e)**:



**ВТОРОЙ ЭЛЕКТРОННЫЙ УРОВЕНЬ
ПОЛНОСТЬЮ ЗАВЕРШЕН.**

Третий период

Начинается третий период – сначала происходит заполнение **3s-оболочки** у натрия (**11e**) и магния (**12e**) (это s-элементы), а потом заполняется **3p-оболочка** у шести следующих p-элементов: от алюминия (**13e**) до аргона (**18 e**).



У аргона - инертного газа на внешнем слое 8 электронов.

При этом третий электронный уровень ещё заполнен НЕ ДО КОНЦА: в нём есть ещё 3d-оболочка (подуровень).

Четвертый период.

Атом № 19 – калий является первым элементом 4 периода, у него идёт заполнение **4s- оболочки** (подуровня).

Калий - это **s-элемент.**

3d-подуровень пока остаётся незаполненным:

K $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 (3d^0) 4s^1$
(пустую орбиталь обычно не пишут)

Кальций и скандий.

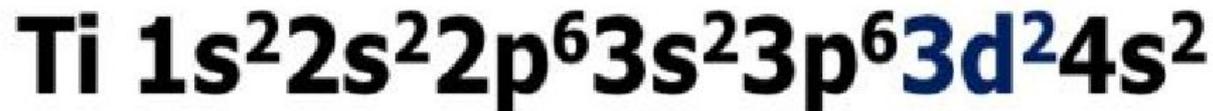
- 4s-оболочка заполняется и у **кальция - элемента № 20**. Он тоже **s-элемент**:



И вот **ТОЛЬКО** у следующих **10 элементов (от скандия до цинка)** происходит заполнение **3d-оболочки** (подуровня). Это **d-элементы**.



Титан и ванадий.



У титана 2 электрона на **3d-оболочке**, и 2e на 4s.

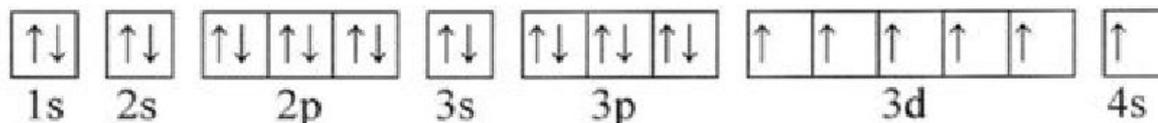


У ванадия на **3d-оболочке** 3 электрона, на 4s - 2 электрона.

Хром – провал электрона!

Казалось бы, у хрома должно получиться: **Cr 3d⁴4s²**

Однако у хрома происходит переход одного электрона с s-оболочки на d-оболочку:



Это явление называется ПРОВАЛ ЭЛЕКТРОНА, причина такого явления - более выгодная по энергии полузаполненная d-оболочка.

Соответственно, хром имеет 6 неспаренных электронов

Марганец -никель

У марганца (№25) снова происходит "возвращение" электрона на **4s-подуровень**:



У атомов с №26 (железо) до № 28 (никель) происходит дальнейшее заполнение **3d-оболочки**.

Медь – провал электрона!

У никеля на **d-оболочке** 8 электронов, на **4s** - 2 электрона. Казалось бы, что у меди должно получиться: **Cu ... 3d⁹4s²**

Однако у меди вновь происходит переход одного электрона с s-оболочки на d-оболочку:



Это снова **ПРОВАЛ ЭЛЕКТРОНА**, причина которого - более выгодная по энергии полностью заполненная d-оболочка.

Цинк

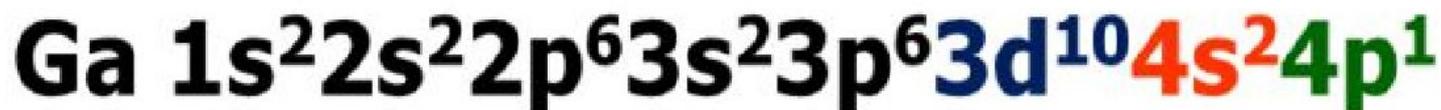
Цинк завершает d-элементы 4 периода:



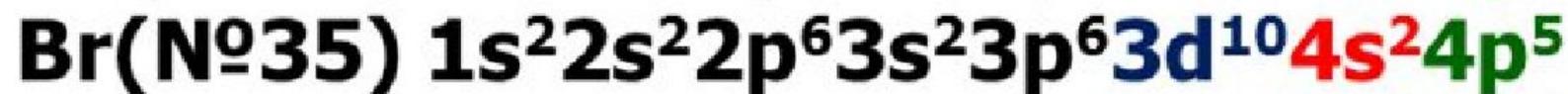
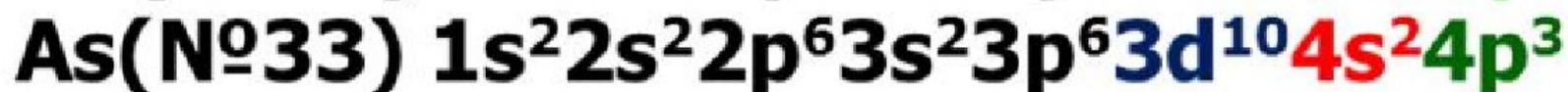
**ТРЕТИЙ ЭЛЕКТРОННЫЙ УРОВЕНЬ
ЗАВЕРШЕН – на нем теперь 18
электронов.**

Галлий

Со следующего элемента 4 периода – **галлия (№31)** вновь начинается заполнение **внешнего (четвертого) электронного слоя**, теперь уже **4p-оболочки**.



р-элементы четвертого периода



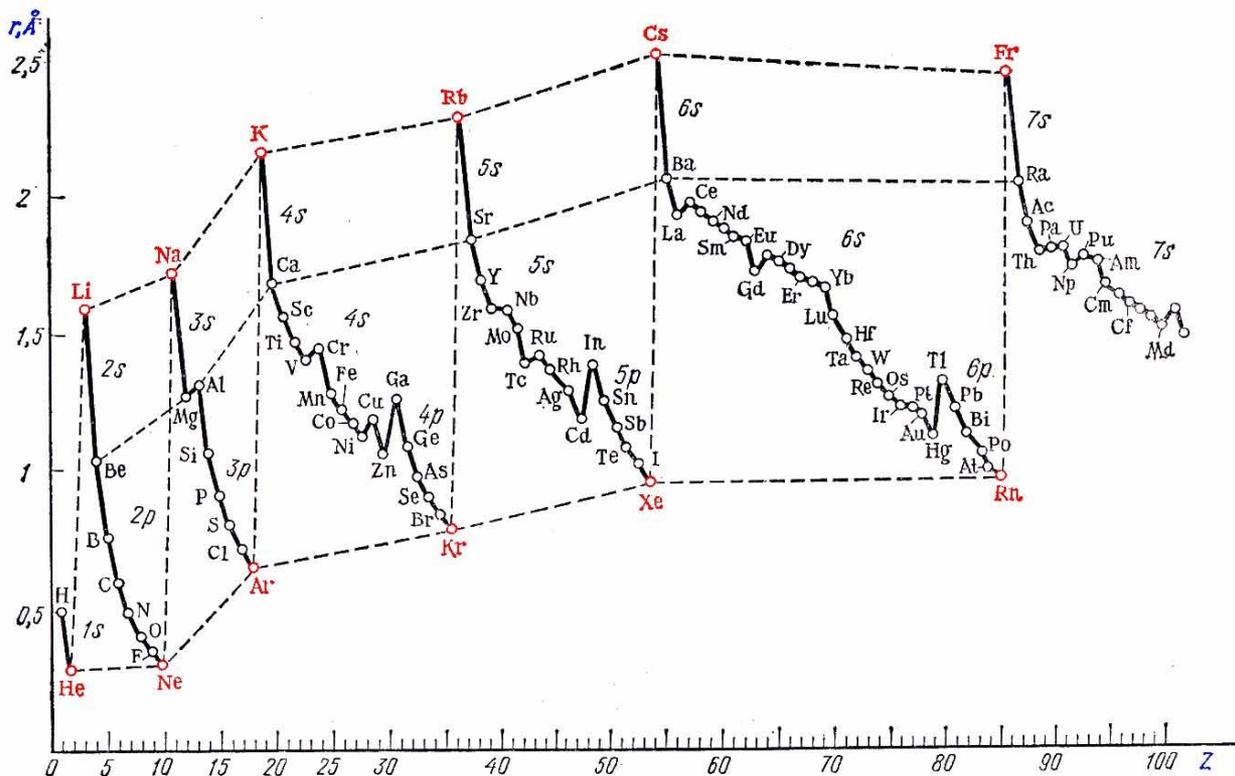
Таким образом, мы научились составлять электронные формулы атомов первых 4 периодов.

ПЕРИОД	Г Р У П П Ы Э Л Е М Е Н Т О В																															
	IA	IIA	IIIB	С Е М Е Й С Т В А										IVB	VB	VIB	VIB	VIIIB	IB	IVB	IIIA	IVA	VA	VIA	VIA	VIIA	VIIA					
1																			1	2												
																			H	He												
2	3	4																5	6	7	8	9	10									
	Li	Be																B	C	N	O	F	Ne									
3	11	12																13	14	15	16	17	18									
	Na	Mg																Al	Si	P	S	Cl	Ar									
4	19	20	21														22	23	24	25	26	27	28	29	30	31	32	33	34	35	36	
	K	Ca	Sc														Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr	
5	37	38	39														40	41	42	43	44	45	46	47	48	49	50	51	52	53	54	
	Rb	Sr	Y														Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe	
6	55	56	57	58	59	60	61	62	63	64	65	66	67	68	69	70	71	72	73	74	75	76	77	78	79	80	81	82	83	84	85	86
	Cs	Ba	La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
7	87	88	89	90	91	92	93	94	95	96	97	98	99	100	101	102	103	104	105	106	107	108	109	110	111	112	113	114	115	116	117	118
	Fr	Ra	Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	(No)	(Lr)	Ku														
	s^1	s^2	d^1	f^2	f^3	f^4	f^5	f^6	f^7	f^7d^1	f^8	f^{10}	f^{11}	f^{12}	f^{13}	f^{14}	f^4d^1	d^2	d^3	d^4	d^5	d^6	d^7	d^8	d^9	d^{10}	p^1	p^2	p^3	p^4	p^5	p^6
	s		d	f													d										p					

Размеры атомов и ионов

эффективный радиус атома, за который принимается половина расстояния между атомами, находящимися на минимальном расстоянии друг от друга. $r=L / 2$

Сu $L=2,56 \text{ \AA}$ -межядерное расстояние в кристаллах меди, тогда радиус атома Сu=1,28.



Зависимость орбитальных радиусов атомов от порядкового номера элемента.

Энергия ионизации

Как потеря, так и присоединение атомами электронов сопровождается энергетическим эффектом. Количество энергии, которое необходимо затратить для отрыва электрона от атома и удаления его из сферы влияния ядра, называется **энергией ионизации**

Энергия сродства к электрону

Атомы не только могут отдавать электроны, но и присоединять их. Энергия, выделяющаяся при присоединении электрона к свободному атому, называется **сродством атома к электрону** (E).

Электроотрицательность

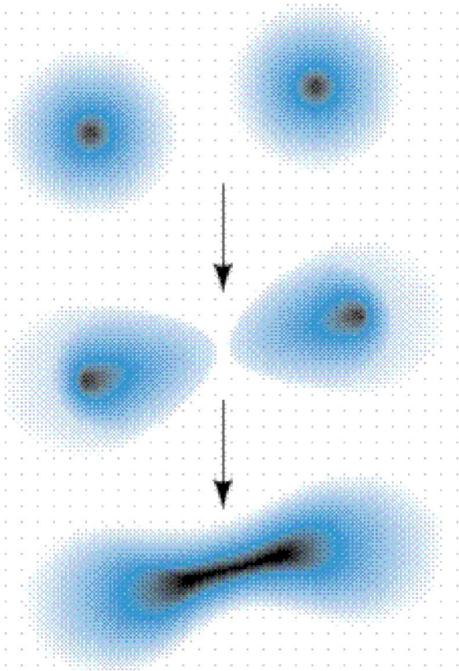
Для сравнительной оценки этой способности присоединения электрона введена характеристика, названная **электроотрицательностью** (ЭО)

Химическая связь

Сильные химические взаимодействия, т. е. ядерноэлектронные взаимодействия в молекуле (кристалле), которые обеспечивают устойчивость молекулы (кристалла) как единого целого, описываются словами: «**химическая связь**».

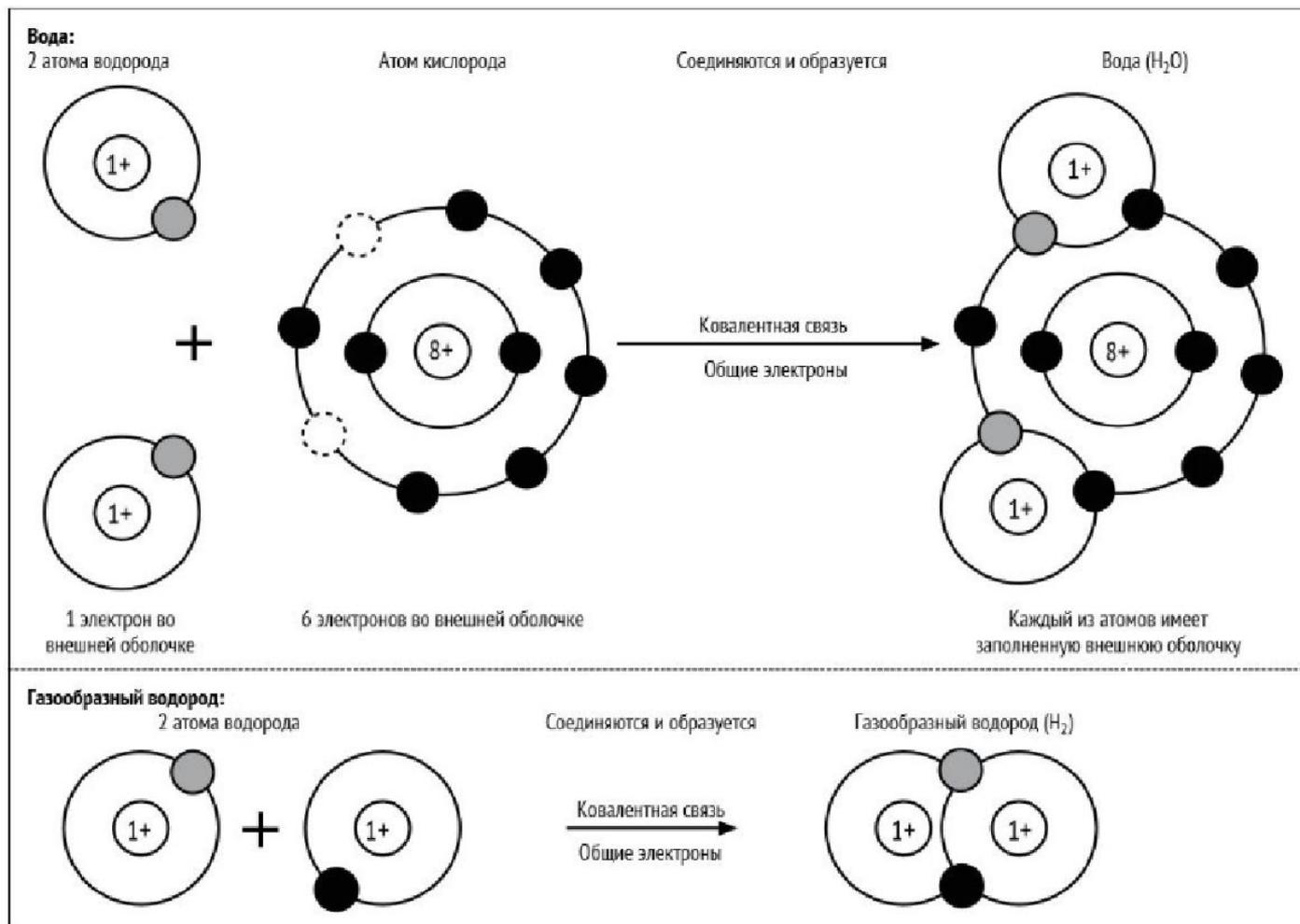
Результат взаимодействия - многоатомные частицы.

Молекула - мельчайшая частица вещества, сохраняющая его химические свойства, способная к химическим превращениям. Молекула - устойчивая электронейтральная система, состоящая из нескольких атомов.

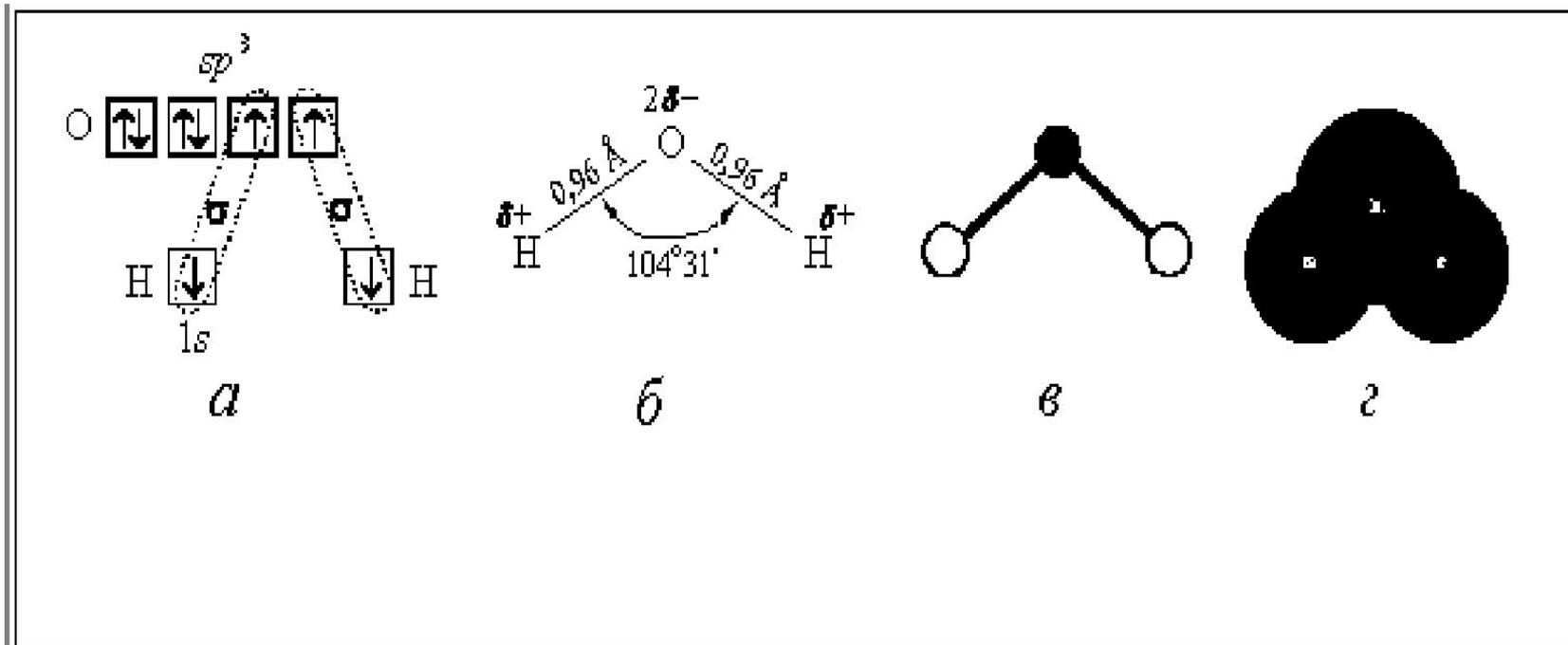


В настоящее время различают ковалентную, ионную и металлическую связь.

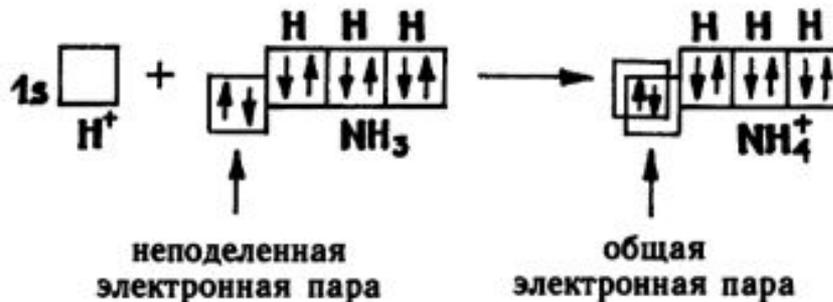
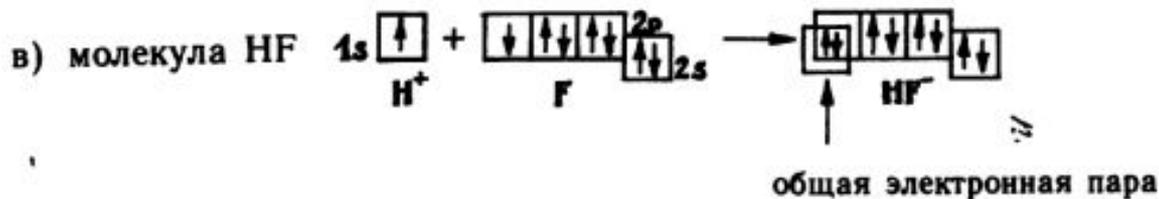
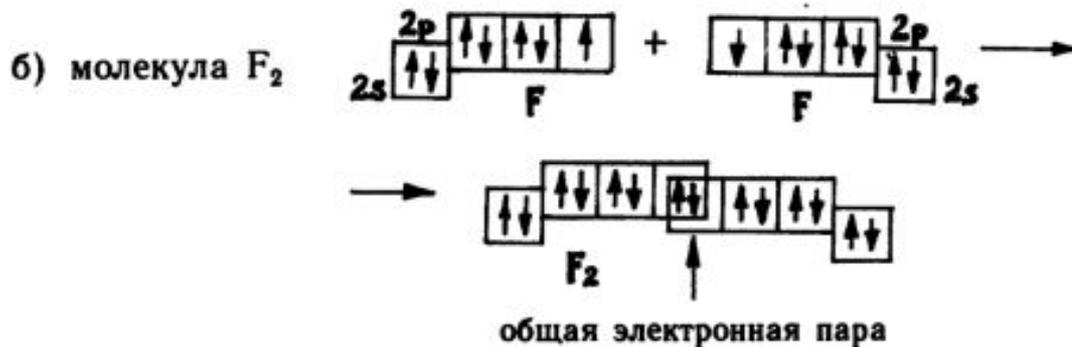
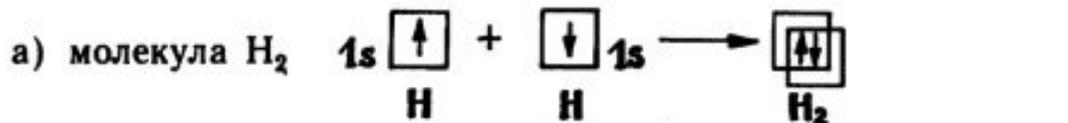
К о в а л е н т н а я с в я з ь -связь, образованная электронами, принадлежащими обоим атомам, образующим частицу.



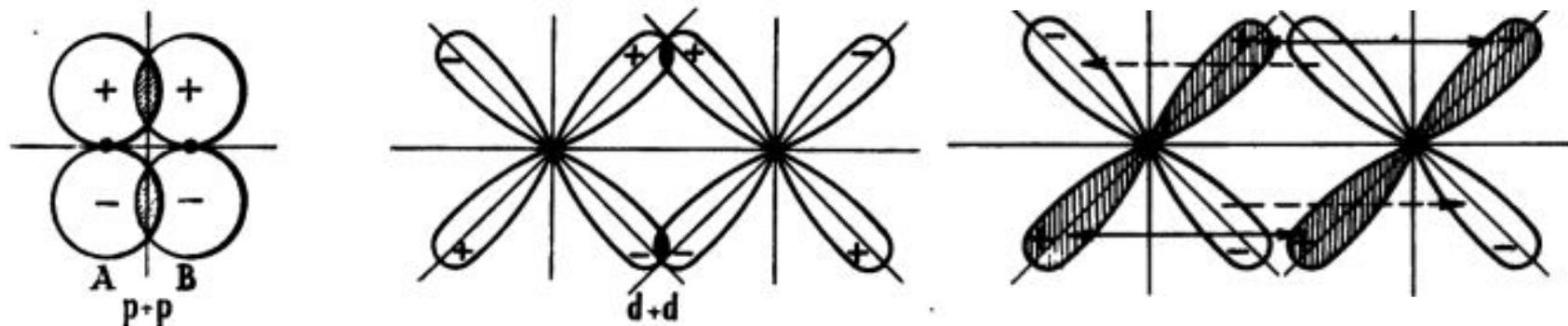
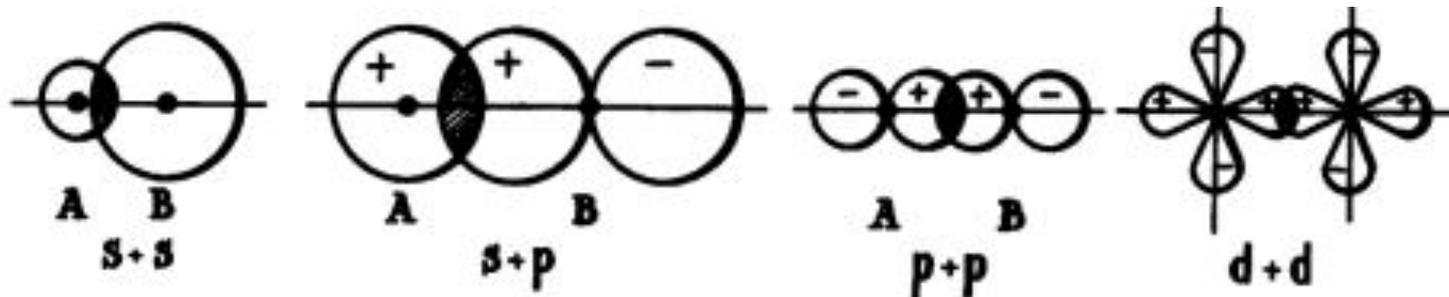
Ковалентная связь характеризуется следующими основными параметрами: энергия связи (E), длина связи, валентный угол



Основные механизмы образования ковалентной связи - обменный и донорно-акцепторный

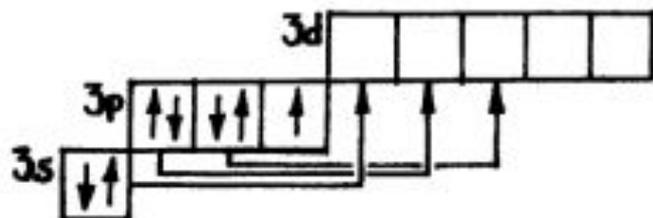


Типы ковалентных связей. Различают несколько типов ковалентной связи: σ -, π -, δ -связи

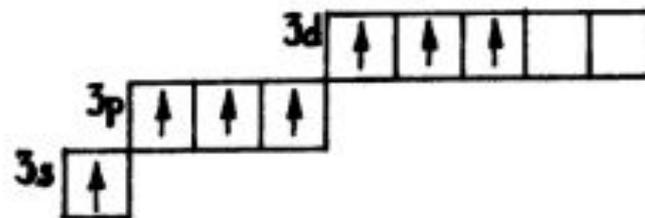


Характеристики ковалентной связи

Насыщаемость определяется конечной величиной числа неспаренных электронов.

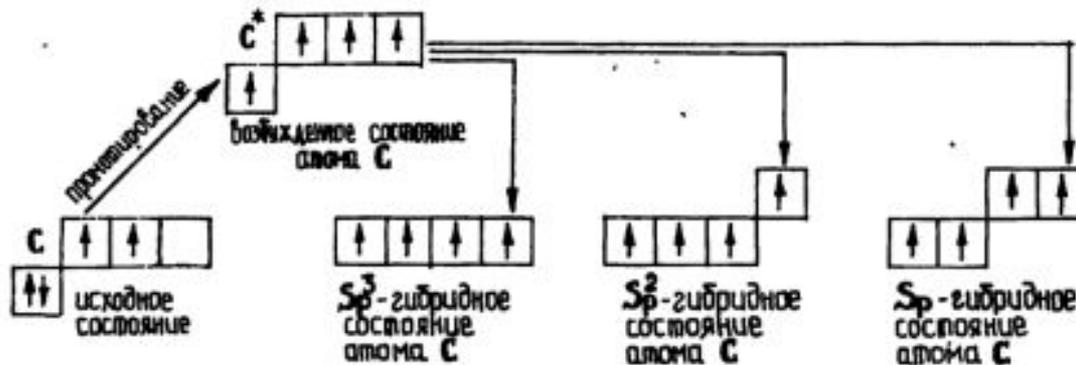


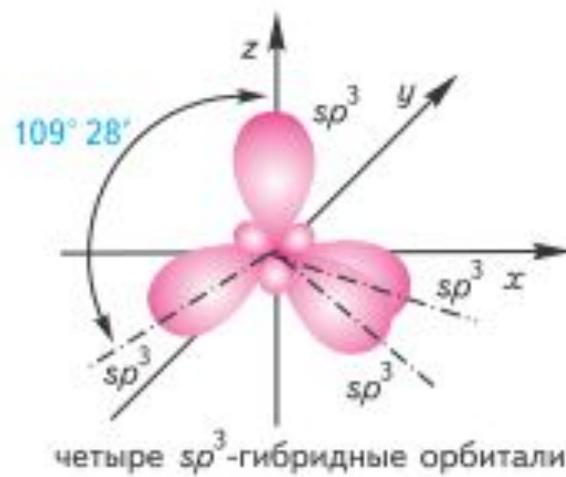
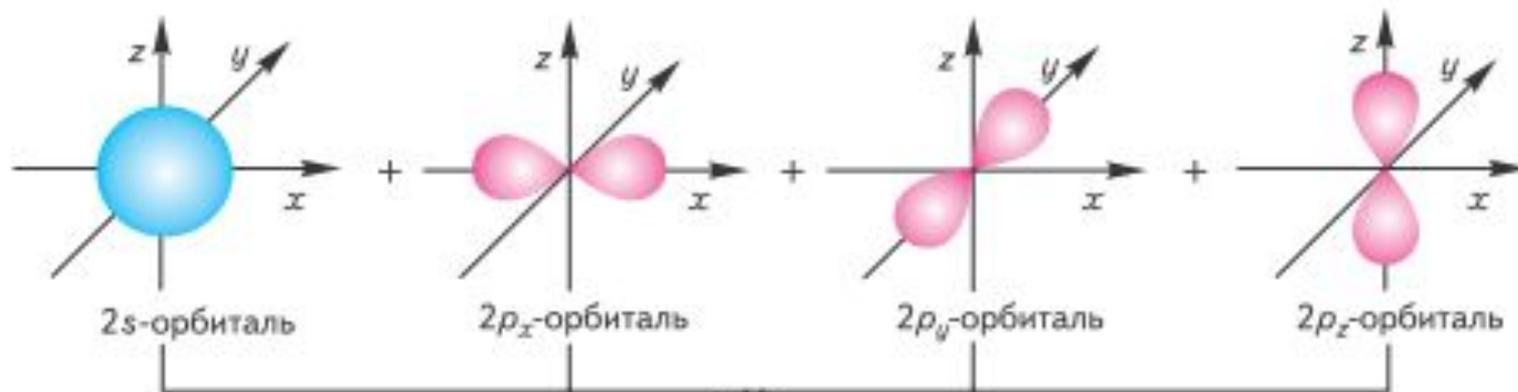
основное состояние атома хлора

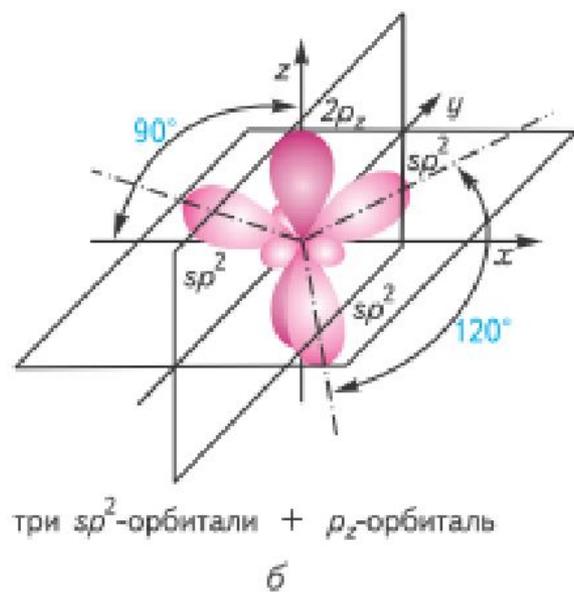
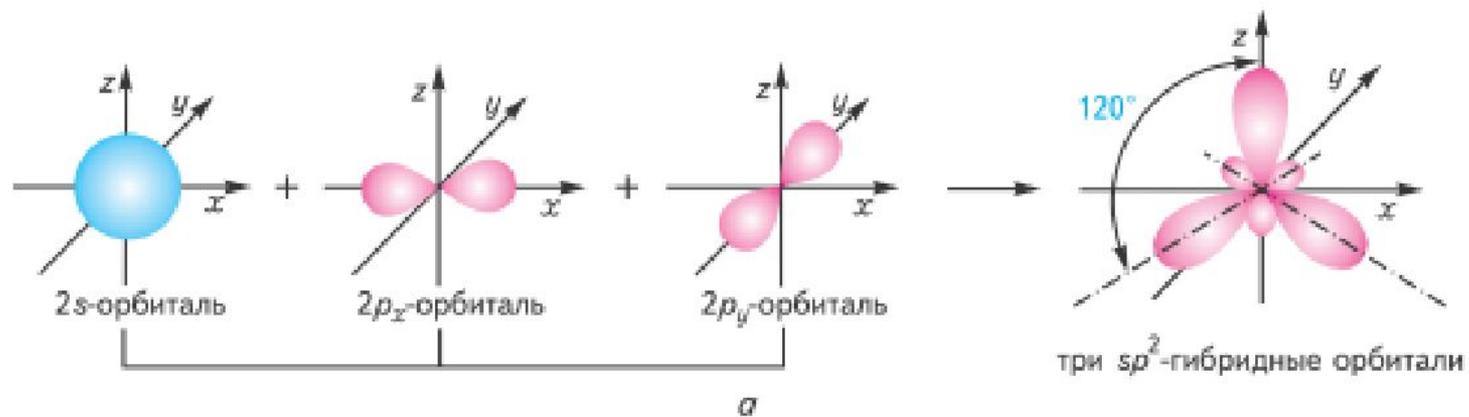


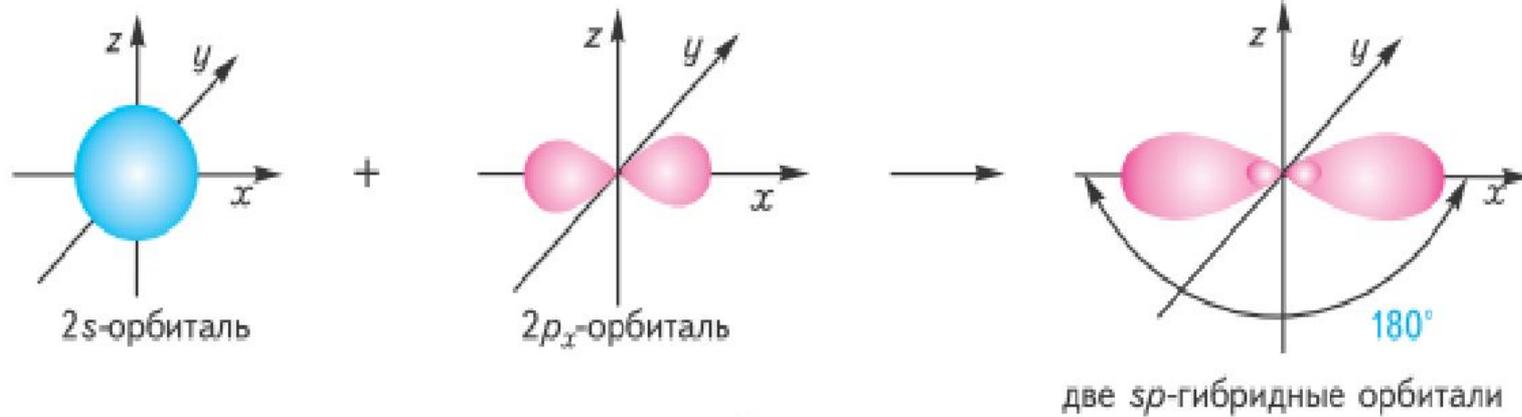
возбужденное состояние атома хлора

Ковалентная связь характеризуется **направленностью** в пространстве. Геометрия молекул связана с понятием гибридизации атомных орбиталей.

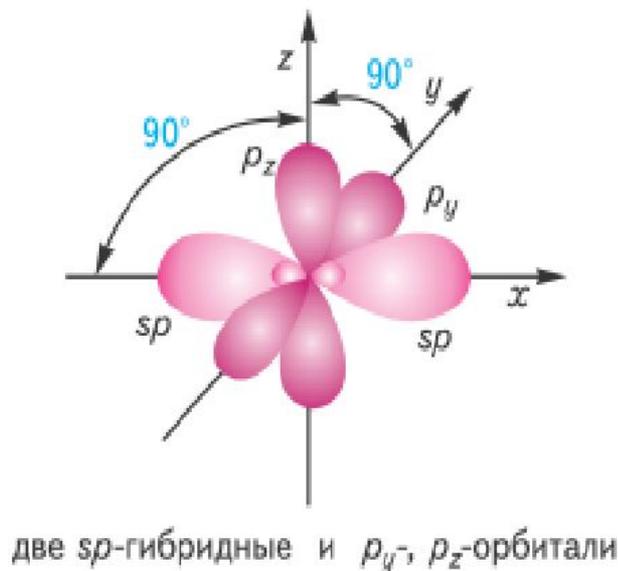






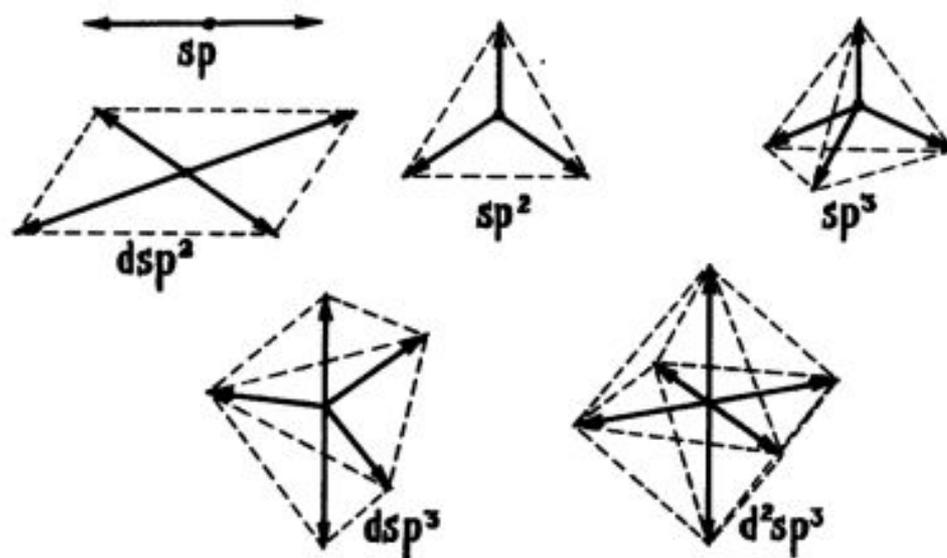


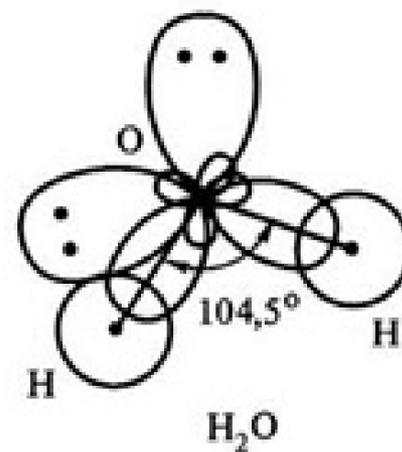
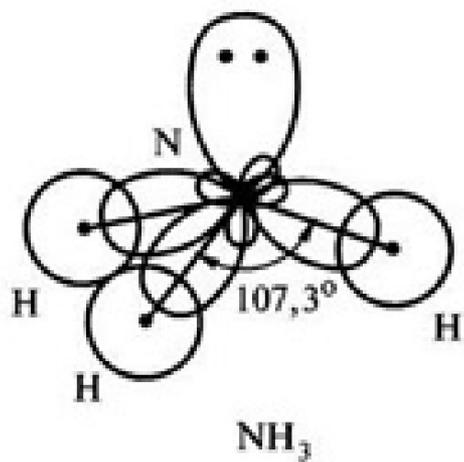
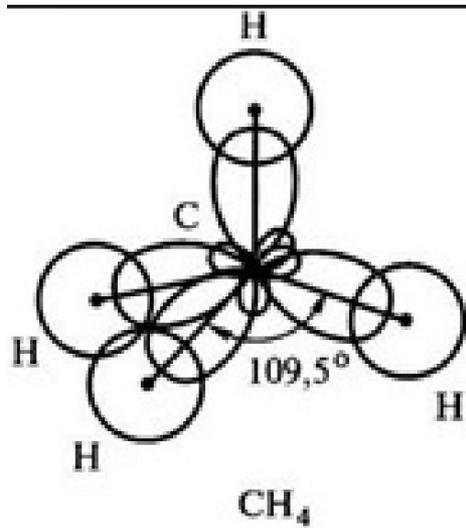
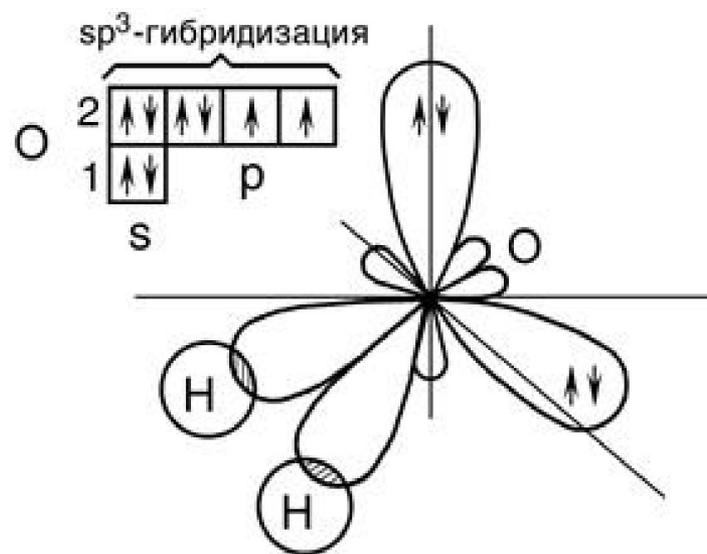
a



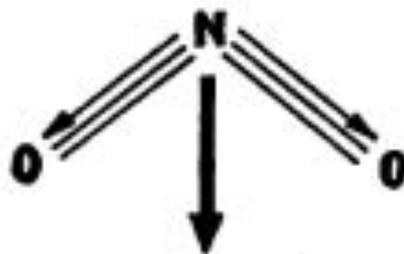
Зависимость между типом гибридных орбиталей и их взаимной ориентацией

Тип гибридизации	Орбитали, участвующие в гибридизации	Число гибридных орбиталей	Углы между гибридными орбиталями	Геометрическая форма молекулы
sp	$s, p (p_x, p_y, p_z)$	2	180°	Линейная
sp^2	s, p_x, p_y	3	120°	Равносторонний треугольник
sp^3	s, p_x, p_y, p_z	4	109.5°	Тетраэдр
dsp^2	$s, p_x, p_y, d_{x^2-y^2}$	4	90°	Плоский квадрат
dsp^3	$s, p_x, p_y, p_z, dz_{z^2}$	5	$90^\circ, 120^\circ$	Тригональная бипирамида
d^2sp^3	$s, p_x, p_y, p_z, dz_{z^2}, d_{x^2-y^2}$	6	90°	Октаэдр





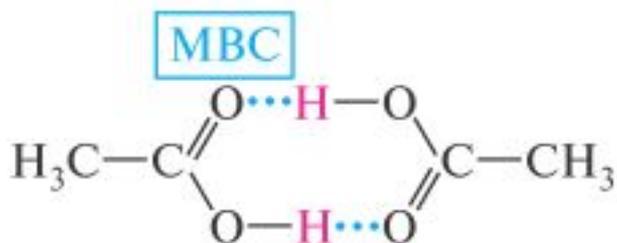
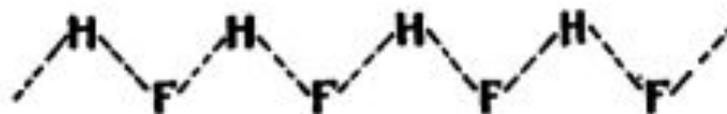
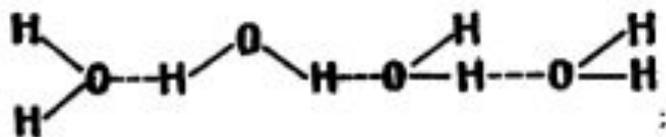
Если молекула образована различными атомами, то связь в такой молекуле будет полярной. Это означает, что центры тяжести положительного и отрицательного зарядов в молекуле не совпадают.



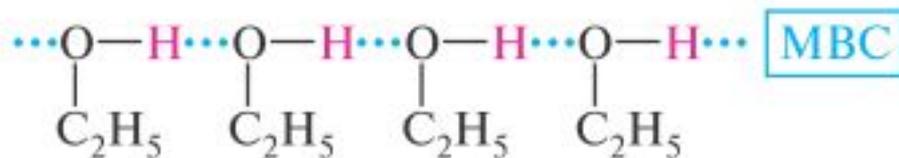
результатирующий момент

Нековалентные взаимодействия. Природа водородной связи

Водородная связь образуется в результате электростатического взаимодействия между активными атомами водорода в молекуле и атомами с неподеленной электронной парой ($-\ddot{\text{O}}-$, $-\ddot{\text{N}}-$, $-\ddot{\text{F}}:$, реже $-\ddot{\text{S}}-$, $-\ddot{\text{Cl}}:$) в этой же или в другой молекуле.



димер уксусной кислоты



ассоциат этилового спирта

Металлическая связь

