



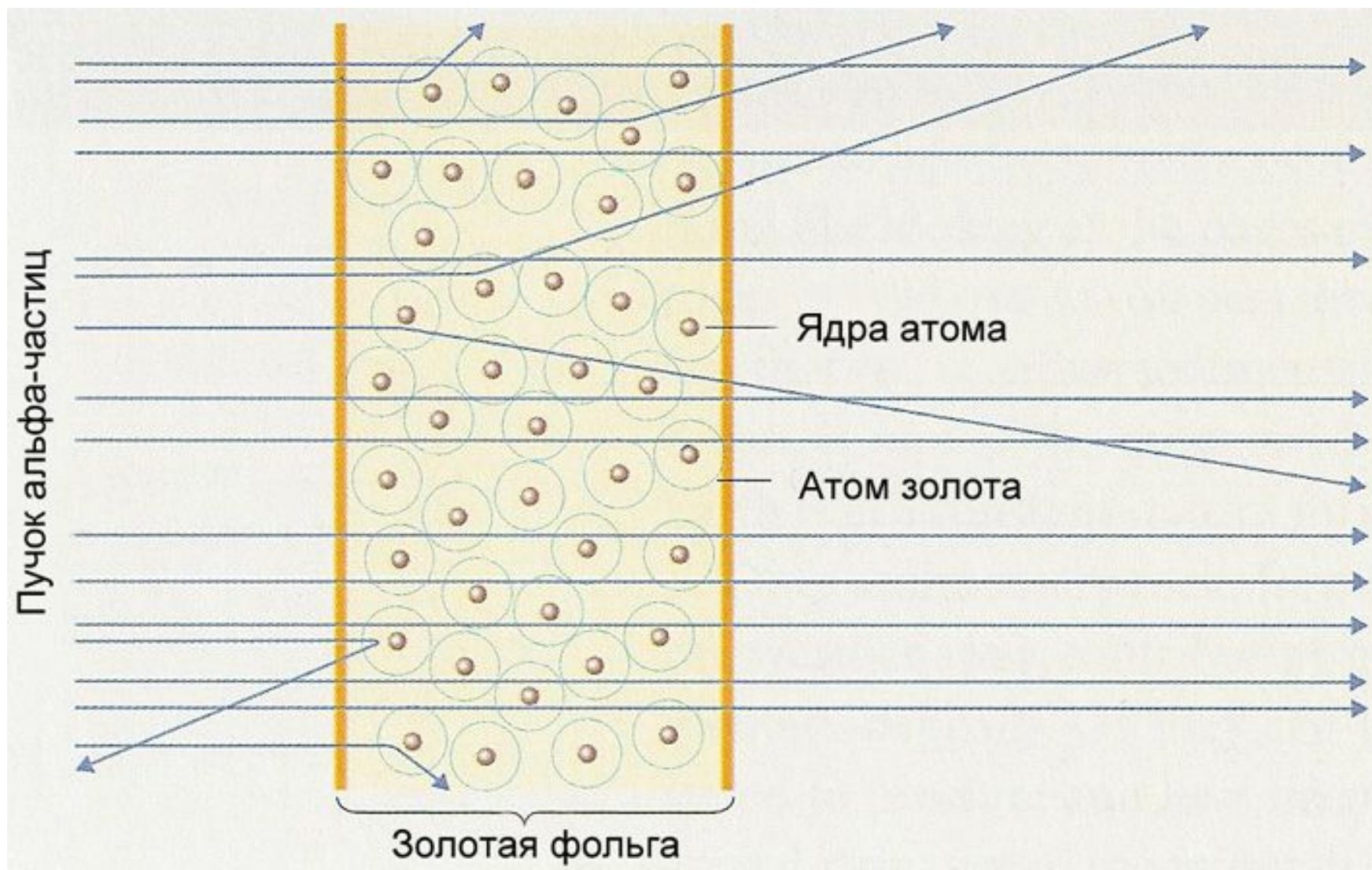
# Лекция 2

## Строение атома



# СУРГУТСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

Опыт Эрнеста Резерфорда, 1911 г.)





## Планетарная модель атома (Э. Резерфорд, 1911 г.)

1. В центре атома находится положительно заряженное ядро, занимающее ничтожную часть пространства внутри атома;
2. Весь положительный заряд и почти вся масса атом сосредоточены в ядре атома (масса электрона равна  $1/1823$  а.е.м.);
3. Вокруг ядра вращаются электроны. Их число равно положительному заряду ядра.



## Постулаты Бора

1. Из бесконечного числа орбит, допустимы лишь определенные, дискретные орбиты, по которым движутся электроны не излучая энергии;
2. Частота  $\nu$  (ню) поглощаемого или испускаемого атомом излучения при переходе из одного состояния с энергией  $E_1$  во второе с энергией  $E_2$  определяется отношением:

$$\Delta E = E_2 - E_1 = h \nu_{12}$$

где  $\nu$  – частота поглощаемого или испускаемого атомом излучения;

$h = 6,624 \cdot 10^{-34} \text{ Дж} \cdot \text{с}$  - постоянная Планка.





# СУРГУТСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ



## Современная, квантово-механическая теория строения атома

- Открытие дискретности (квантования) энергии (Планк, 1900 г.);
- Применение «старой квантовой теории» для описания строения и спектра атома водорода (Н. Бор, 1913 г.);
- «Волновая («волноподобная»?) природа материи (Л. де Бройль, 1924 г.);
- Построение квантовой и волновой механики (В. Гейзенберг, 1925 г.; Э. Шредингер, 1925-1926 гг.; учет теории относительности Эйнштейна, П. Дирак, 1928 г.);
- Принцип Паули для многоэлектронных систем (В. Паули, 1925 г.);
- Орбитальная модель многоэлектронных систем (Д. Хартри, 1928 г., В.А. Фок, 1930 г.);
- Компьютер для расчета строения атома (Д. Атанасов, 1943 г.).



# СУРГУТСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ



**Атом** — это частица, состоящая из ядра и, вращающихся вокруг него электронов.

Ядро состоит из протонов ( $p$ ) и нейтронов ( $n$ ), которые составляют основную массу атома:  $m_p = 1,0073 \text{ а.е.м.}$        $z_p = +1$

$$m_n = 1,0087 \text{ а.е.м.} \quad . z_n = 0$$

Сумма протонов и нейтронов составляет массу ядра и его заряд.

Электроны внешних слоев определяют реакционную способность вещества.



**Волновое уравнение Шредингера:  $\Psi H = \Psi E$ ,**

где  $\Psi$  - волновая функция (пси), определяющая амплитуду стоячей электронной волны;

$H$  - гаммильтониана;

$E$  - полная энергия.

**Волновая функция должна удовлетворять стандартным условиям:**

1. Волновая функция должна быть непрерывной, т.е. не приводить к исчезновению электрона;
2. Должна быть конечной, т.е. не должна быть бесконечной при определенных значениях аргумента;
3. Однозначной, т.е. для любой точки должно иметься одно значение;
4. Обращаться в ноль на бесконечности.



# СУРГУТСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ



Величина волновой функции  $\Psi$  (пси) была определена только для атома водорода, который содержит один электрон. Было установлено, что энергия электронов дискретна, т.е. характеризуется квантами, которые можно описать уравнением Планка:

$$E = \hbar \cdot \nu$$

$$\hbar = 6,62 \cdot 10^{-34} \text{ Дж} \cdot \text{с}$$

Тогда,

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{d^2 \psi}{dx^2} + \frac{d^2 \psi}{dy^2} + \frac{d^2 \psi}{dz^2} \right) + U(\Psi) = E(\Psi)$$

где  $m$  - масса частицы.





# СУРГУТСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} + \frac{d^2\Psi}{dy^2} + \frac{d^2\Psi}{dz^2} + \frac{4\pi^2\Psi}{\lambda} = 0$$

$$\lambda = \frac{\hbar}{m_0 v}$$

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} + \frac{d^2\Psi}{dy^2} + \frac{d^2\Psi}{dz^2} + \frac{m_0^2 v^2}{\hbar^2} \Psi = 0$$

$$E = U + \frac{m_0^2 v^2}{2}, \text{ следовательно } v^2 = \frac{2(E - U)}{m_0}, \text{ получаем}$$

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} + \frac{d^2\Psi}{dy^2} + \frac{d^2\Psi}{dz^2} + (E - U) \frac{2m_0}{\hbar^2} \Psi = 0$$

$$\nabla^2 \Psi + \frac{2m_0}{\hbar^2} (E - U) \Psi; \nabla^2 (\text{набла}) = \frac{d^2}{dx^2} + \frac{d^2}{dy^2} + \frac{d^2}{dz^2}$$



# СУРГУТСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} + \frac{d^2\Psi}{dy^2} + \frac{d^2\Psi}{dz^2} + \left( E + \frac{e^2}{r} \right) \frac{2m_0}{\hbar^2} \psi = 0$$

где

$\frac{e^2}{r}$  — потенциальная энергия;

$r$  — расстояние от электрона до ядра.

$$x = r \cdot \sin\theta \cdot \cos\varphi;$$

$$y = r \cdot \sin\theta \cdot \sin\varphi;$$

$$z = r \cdot \cos\theta;$$

$$\psi(r; \theta; \varphi) = R(r)\theta(\theta)\Phi(\varphi)$$



# СУРГУТСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ



Радиальная часть волновой функции  $R(r)$  содержит  $n$  и  $l$ ;

Угловая функция  $\theta(\theta)$  содержит  $l$  и  $m_l$ .

Угловая функция  $\Phi(\varphi)$  содержит  $m_l$ .

Безразмерные величины  $n$ ,  $l$ ,  $m_s$ ,  $m_l$  называют квантовыми числами.

При решении уравнения Шредингера на квантовые числа накладываются строгие граничные условия, которые принимают целочисленные значения.





## Физический смысл волновой функции:

1. Электрон может пребывать в любой области атомного пространства, только в различной вероятностью;
2. Величина ядра атома и количество электронов определяется порядковым номером элемента в периодической системе элементов Д.И. Менделеева.

Вероятность нахождения электрона в определенной области атомного пространства зависит от собственных функций – квантовых чисел:

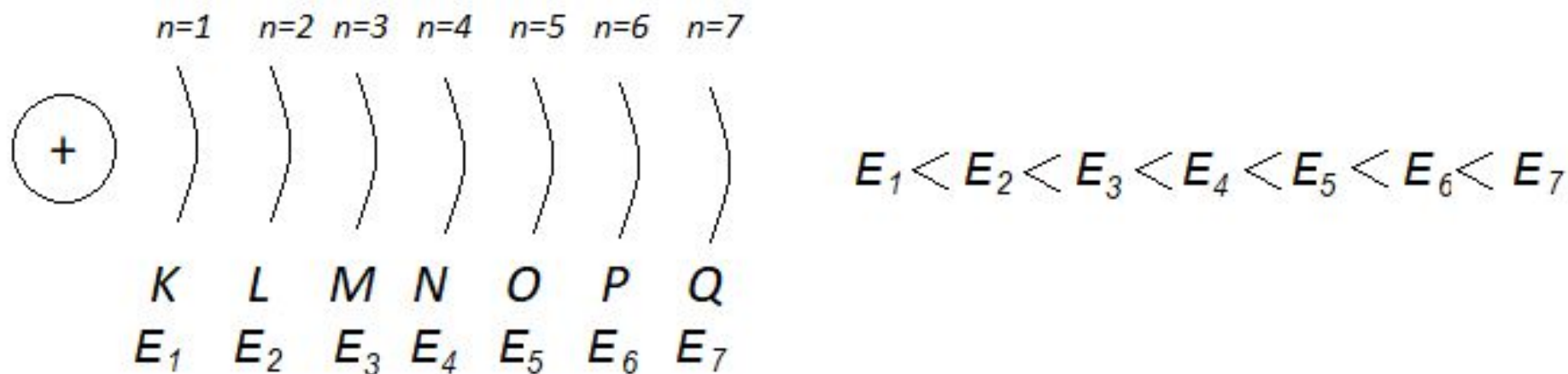
$$n, l, m_s, m_l$$





# СУРГУТСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

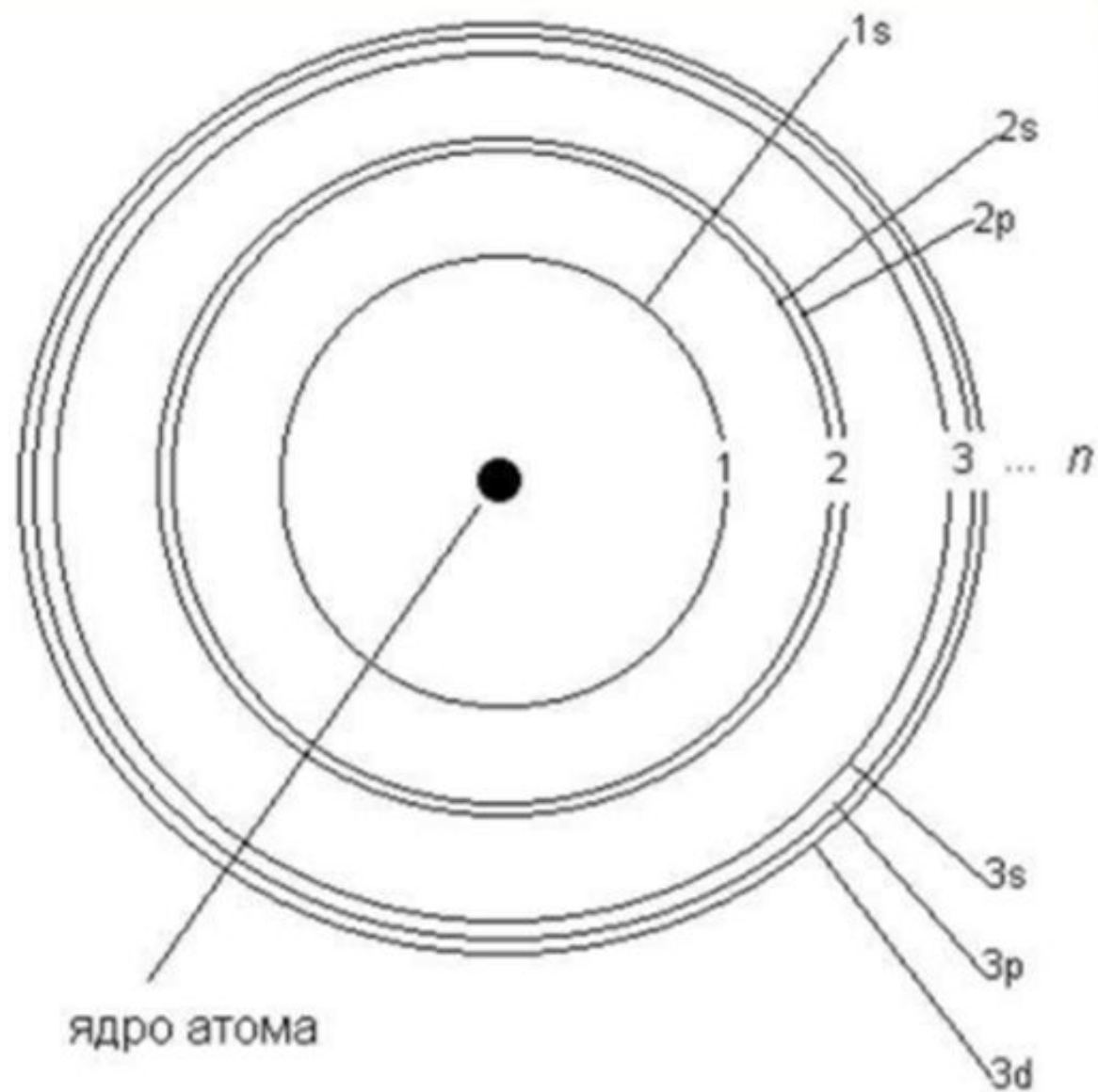
$n$  – главное квантовое число определяет область и уровень энергии в целом.  
Принимает значения простых целых чисел:  $n = 1 \div 7$



Совокупность электронов с одинаковым главным квантовым числом определяет квантовый или энергетический уровень.



# СУРГУТСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ





Орбитальное квантовое число (  $l$  ) определяет геометрическую форму орбитали.

**Орбиталь** – это область пространства в атоме, где вероятность нахождения электрона максимальна.

Совокупность электронов с одинаковым значением орбитального квантового числа образует квантовый или энергетический подуровень.

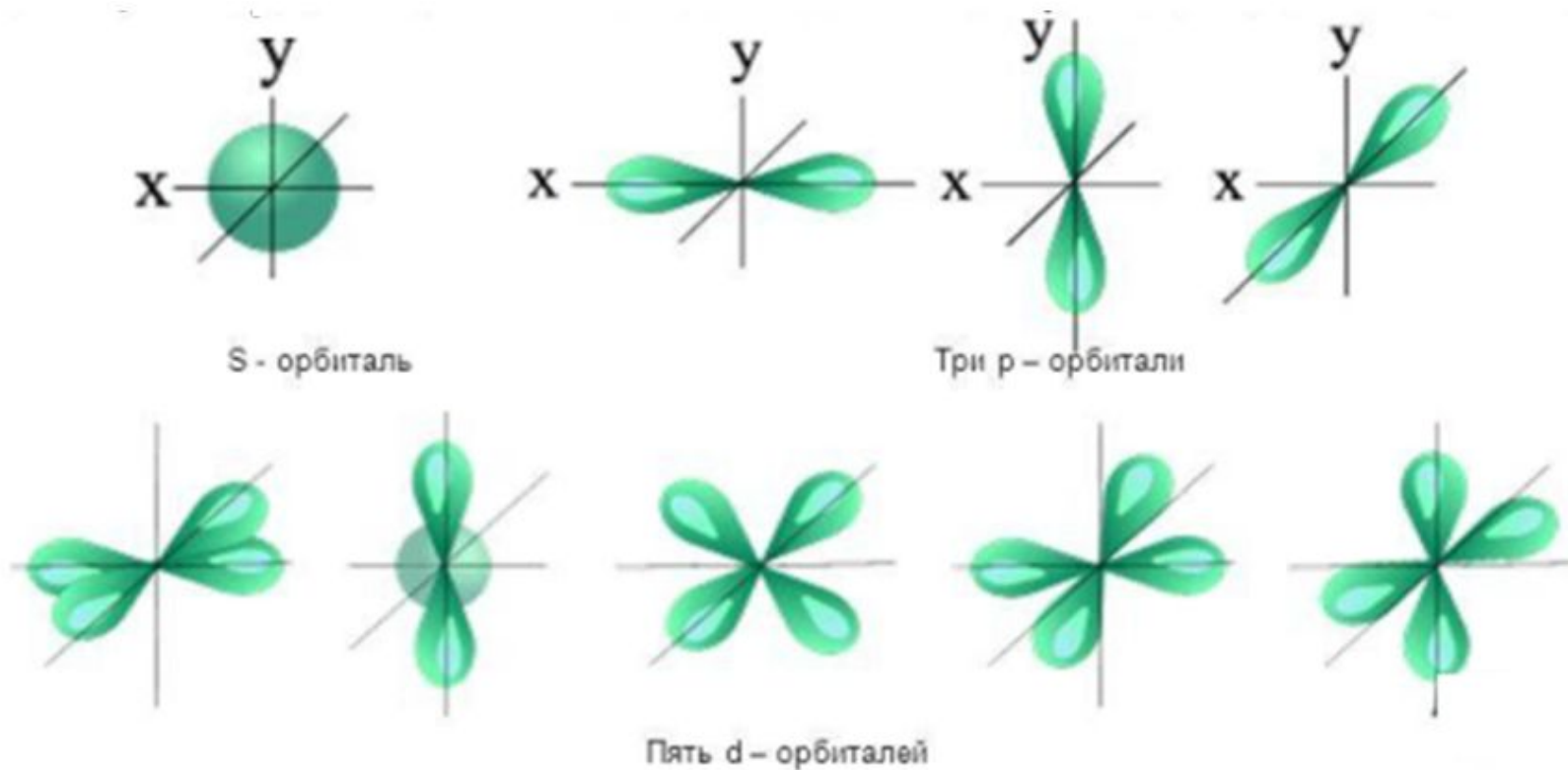
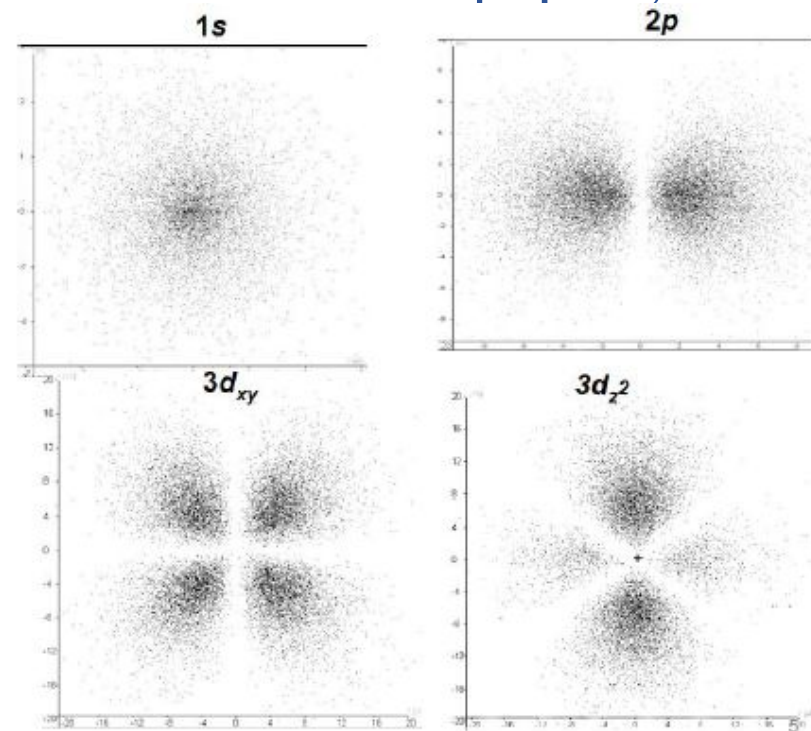
Орбитальное квантовое число принимает значения:  $l = n - 1$





# СУРГУТСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

- Если  $n = 1, l = 0$  – это s-подуровень, s-орбиталь, форма – сфера;
- Если  $n = 2, l = 1$  – это p-подуровень, p-орбиталь, форма – гантель;
- Если  $n = 3, l = 2$  – это d-подуровень, d-орбиталь, форма – более сложная;
- Если  $n = 4, l = 3$  – это f-подуровень, f-орбиталь, форма – еще более сложная форма;





Магнитное квантовое число  $m_l$  определяет ориентацию электронной орбитали в пространстве относительно осей  $x, y, z$  в магнитном поле. Магнитное квантовое число принимает значения  $m_l = \pm l$ , включая 0, всего  $2l + 1$  направлений. Это означает, что для каждой формы орбитали существует  $(2l + 1)$  энергетически равноценных ориентации в пространстве.

Для  $s$ -орбитали ( $l = 0$ ) такое положение одно и соответствует  $m_l = 0$ , поскольку сфера не может иметь разные ориентации в пространстве.

На  $p$ -подуровне ( $l = 1$ ) находятся три равноценные орбитали в пространстве ( $2l + 1 = 3$ ):  $m = -1; 0; +1$ .

На  $d$ -подуровне ( $l = 2$ ) находятся пять равноценных орбиталей в пространстве ( $2l + 1 = 5$ ):  $m = -2; -1; 0; +1; +2$ .

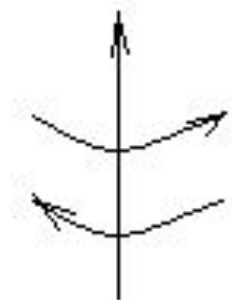
На  $f$ -подуровне ( $l = 3$ ) находятся семь равноценных орбиталей в пространстве ( $2l + 1 = 7$ ):  $m = -3; -2; -1; 0; +1; +2; +3$ .



# СУРГУТСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

Спиновое квантовое число  $(m_s)$  определяет направление движения электрона вокруг собственной оси. Эта величина векторная. Электрон в атоме занимает не любые, а строго определенные орбитали.

Спиновое квантовое число принимает только два значения  $m_s = \pm \frac{1}{2}$ , соответствующие противоположным направлениям движения электрона вокруг собственной оси.



Функция определена, если известны 3-и квантовых числа.



## Принципы формирования электронных орбиталей

- 1. Принцип Паули:** В атоме не может быть 2-х электронов с одинаковым набором (одинаковыми значениями) всех четырех квантовых чисел.

Например:  $1s^2$

$$n = 1$$

$$l = 0$$

$$m_l = 0$$

$$m_s = +\frac{1}{2}$$

$1s$

$$n = 1$$

$$l = 0$$

$$m_l = 0$$

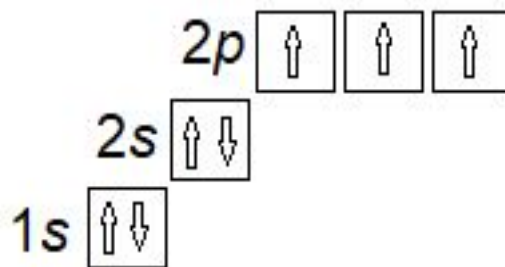
$$m_s = -\frac{1}{2}$$



## 2. Правило Хунда

В пределах квантового подуровня электроны стремятся распределиться таким образом, чтобы спин был максимальным

Например:  $1s^2 2s^2 2p^3$



$$\Sigma S = 3 \cdot \left( \pm \frac{1}{2} \right) = \pm 1,5$$

Суммарный спин – это число неспаренных электронов умноженное на спиновое квантовое число, т.е. на каждой орбитали могут максимально находиться 2-а электрона с противоположным спином.



## 3. Правило Клечковского (принцип наименьшей энергии)

Электроны в атоме стремятся занять наименьший по энергии энергетический (квантовый) уровень или подуровень:

$$1s < 2s < 2p < 3s < 3p < 4s < 3d < 4p < 5s = 4d < 5p < 6s = 4f = 5d < 6p < 7s = 5f = \underline{6d} < \underline{7p}$$

незавершенные

Максимальное число электронов равно:  $N = 2n^2$ , где

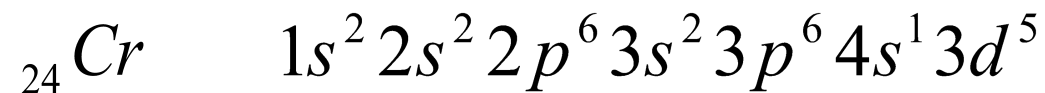
$n$  – номер уровня





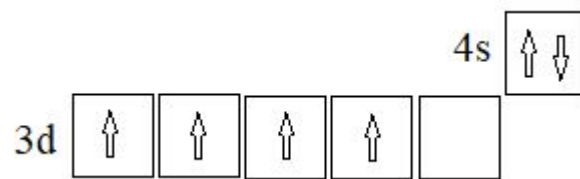
# СУРГУТСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

## Явление проскока

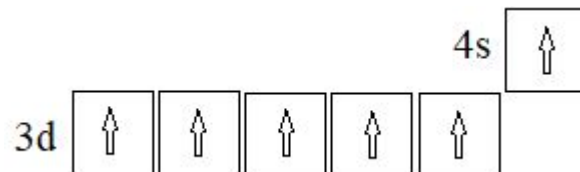


Почему такое распределение электронов?

Если  $4s^2 3d^4$ , то суммарный спин будет:  $\Sigma S = 4 \cdot \left(\pm \frac{1}{2}\right) = \pm 2$



Если  $4s^1 3d^5$ , то суммарный спин будет:  $\Sigma S = 6 \cdot \left(\pm \frac{1}{2}\right) = \pm 3$



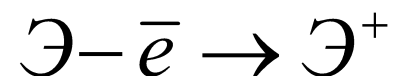


# СУРГУТСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ



## Прогнозирование свойств на основе структуры атома

1. Способность к ионизации:



**Ионизационный потенциал** – это энергия, которая необходима для отрыва наиболее слабо связанного электрона из атома в его нормальном состоянии (эВ).

Энергии ионизации отражают дискретность структуры электронных слоев и оболочек атомов химических элементов.

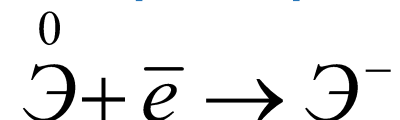
Чем больше заполнен энергетический (квантовый) уровень, тем меньше способность к ионизации.

Например: наименьшей величиной ионизации обладают щелочные металлы, что можно объяснить экранированием заряда ядра полностью завершенными электронными оболочками.





## 2. Сродство к электрону (электроотрицательность):



- это энергия, которая выделяется при присоединении электрона к нейтральному атому. Электроотрицательность измеряется в эВ.

Наибольшим сродством к электрону характеризуются р-элементы, наименьшим – атомы с конфигурацией  $ns^2$  и благородные газы.

Сродство к электрону определено не для всех элементов и выражается в относительных единицах в разных шкалах.

Например: шкала Полинга





# СУРГУТСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

## Шкала Полинга

| Группа |           |           |           |           |           |           |           |       |
|--------|-----------|-----------|-----------|-----------|-----------|-----------|-----------|-------|
| Период | Ia        | IIa       | IIIa      | IVa       | Va        | VIa       | VIIa      | VIIIa |
| 1      | (H)       |           |           |           |           |           | H<br>2,1  | He    |
| 2      | Li<br>1,0 | Be<br>1,6 | B<br>2,1  | C<br>2,6  | N<br>3,0  | O<br>3,4  | F<br>4,0  | Ne    |
| 3      | Na<br>0,9 | Mg<br>1,3 | Al<br>1,6 | Si<br>1,9 | P<br>2,2  | S<br>2,6  | Cl<br>3,0 | Ar    |
| 4      | K<br>0,8  | Ca<br>1,0 | Ga<br>1,8 | Ge<br>2,0 | As<br>2,2 | Se<br>2,4 | Br<br>2,8 | Kr    |
| 5      | Rb<br>0,8 | Sr<br>1,0 | In<br>1,8 | Sn<br>2,0 | Sb<br>2,1 | Te<br>2,1 | I<br>2,5  | Xe    |
| 6      | Cs<br>0,8 | Ba<br>0,9 | Tl<br>2,0 | Pb<br>2,3 | Bi<br>2,0 | Po<br>2,0 | At<br>2,2 | Rn    |
| 7      | Fr<br>0,9 | Ra<br>0,9 |           |           |           |           |           |       |



# СУРГУТСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ



**Степень окисления элемента** – это воображаемый заряд атома в соединении, рассчитанный из предположения ионного строения вещества или полного смещения электронов к более электроотрицательному атому.

Номер группы в ПС указывает на высшую положительную степень окисления, которую может иметь элементы данной группы в соединениях.

Исключения: O; F; металлы семейства Fe; подгруппы Cu.

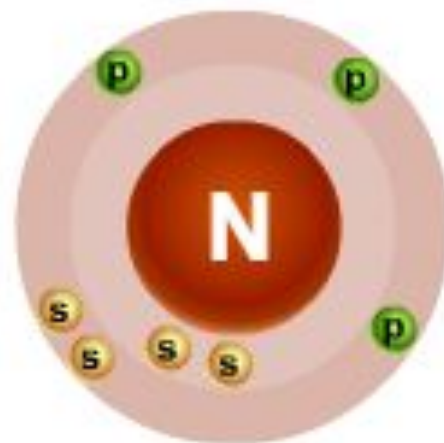




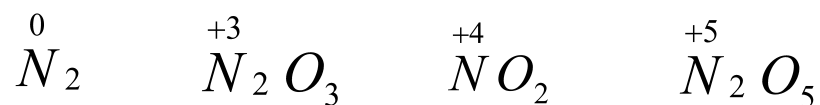
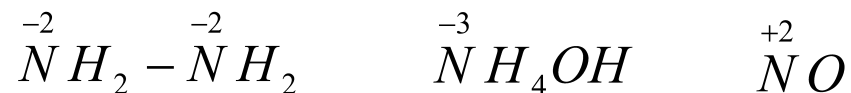
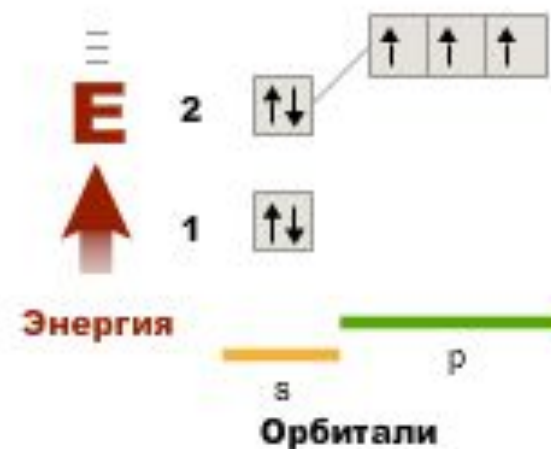
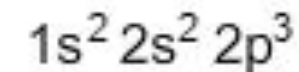
# СУРГУТСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

Элементы могут проявлять несколько степеней окисления, которые определяются электронной конфигурацией внешнего энергетического уровня и возможными переходами электронов.

Например:



Электронная формула элемента



C.O. : -3;-2;0;+1;+2;+3;+4;+5



**Валентность** – это число химических связей, которыми данный атом соединен с другими атомами в соединении.

Для определения валентности атома необходимо знать строение соединения.

Нельзя валентность отождествлять со степенью окисления.



# СУРГУТСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ



Спасибо за внимание.  
Вопросы?

