

# Лекция № 2

## Строение атома

*Начало квантовой механики. Уравнение Шредингера. Энергетическая характеристика состояния электрона в атоме. Квантовые числа. Строение электронных оболочек атомов. Принцип наименьшей энергии. Правило Клечковского. Принцип Паули. Правило Хунда. Атомные орбитали. Энергетические уровни электрона в одноэлектронном атоме. Многоэлектронный атом. Принцип Паули и емкость электронных оболочек. Правило Хунда и порядок заполнения атомных орбиталей. Принцип наименьшей энергии. Правило Клечковского. Строение электронных оболочек элементов. Периодичность строения электронных оболочек. Орбитальные энергии электронов. Потенциалы ионизации и сродство к электрону атомов, радиусы атомов и ионов в зависимости от положения элемента в периодической системе. Электроотрицательность атомов химических элементов.*

# Способы выражения концентрации растворов

**РАСТВОРЫ**, истинные растворы — однородные (гомогенные, однофазные) системы переменного состава из двух или более компонентов (составных частей).

**Концентрация** — величина, характеризующая количественный состав **раствора**

- **Массовая доля вещества** - отношение массы растворённого вещества к общей массе раствора:

$$\omega = \frac{m_{\text{вещества}}}{m_{\text{раствора}}} \cdot 100\%$$

Массовая доля величина безразмерная. Её можно выражать в долях единицы или в процентах.

**Например**, если в 1000г раствора содержится 12 г хлорида натрия, то массовая доля (%) этого вещества равна

- $$\omega(\text{NaCl}) = \frac{m(\text{NaCl})}{m(p)} \times 100\%; \quad \omega(\text{NaCl}) = \frac{12}{1000} \times 100\% = 1,2\%;$$

- **Моляльная концентрация ( $C_m$ )**

определяется числом моль растворенного вещества в 1000 г растворителя.

$$C_m = \frac{m(B)}{M(B)m(L)}, [\text{моль/кг}]$$

- где  $m(B)$  - масса растворённого вещества В,  
 $M(B)$  - молярная масса вещества В, г/моль;  $m(L)$  - масса растворителя.

- **Молярная концентрация или молярность (См или М)** определяется количеством вещества (моль), содержащегося в 1 л раствора.

$$C_M = \frac{m(B)}{M(B)V} 1000, [\text{моль/л}]$$

- где  $m(B)$  - масса растворённого вещества В,  $M(B)$  - молярная масса вещества В, г/моль;  $V$  - объём раствора, мл; 1000 - коэффициент перевода миллилитров в литры. Вместо обозначения моль/л допускается обозначение - М (после числа).
- **Например**, раствор с молярной концентрацией сульфата калия  $C_M(K_2SO_4) = 1$  моль/л может быть обозначен как 1М  $K_2SO_4$  (одномолярный раствор сульфата калия в воде). Аналогично записи 0,1М, 0,01М и 0,001М означают соответственно деци-, санти- и миллимолярный растворы.

- **Титр раствора (Т)** соответствует числу граммов растворенного вещества в одном миллилитре раствора и равен:

$$T(B) = \frac{m(B)}{V}, [\text{г/мл}]$$

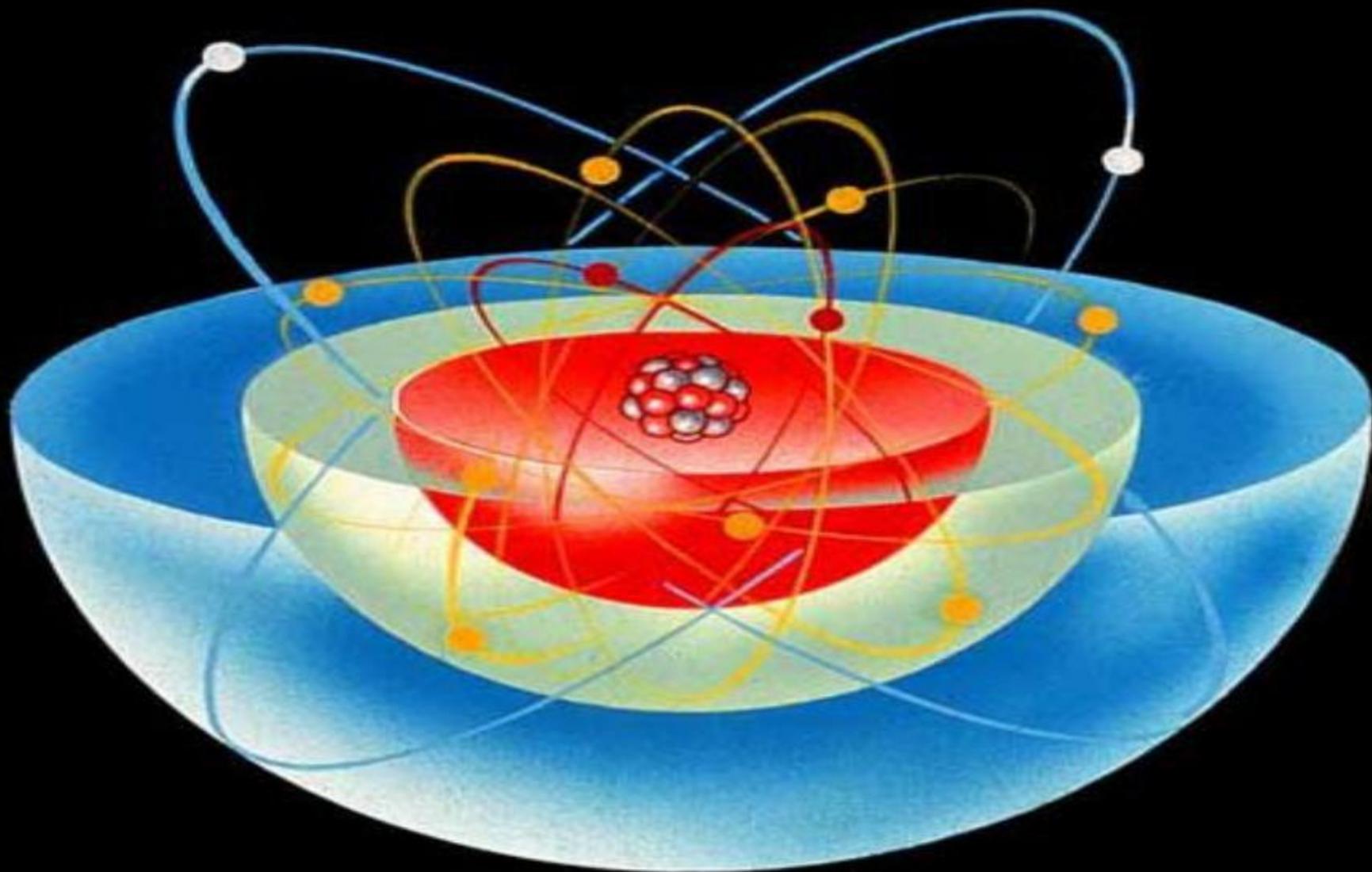
- где  $m(B)$  - масса растворённого вещества,  $V$  - объём раствора. Например, титр раствора, 100 мл которого содержат 5 г  $\text{Na}_2\text{CO}_3$ , равен

$$T(\text{Na}_2\text{CO}_3) = \frac{m(\text{Na}_2\text{CO}_3)}{V} = \frac{5}{100} = 0,05 [\text{г/мл}]$$

**Мольная доля** вещества — концентрация, выраженная отношением числа **молей** вещества к общему числу **молей** всех веществ, имеющихся в растворе

$$\chi_i = \frac{n_i}{n_1 + n_2 + \dots + n_i}$$

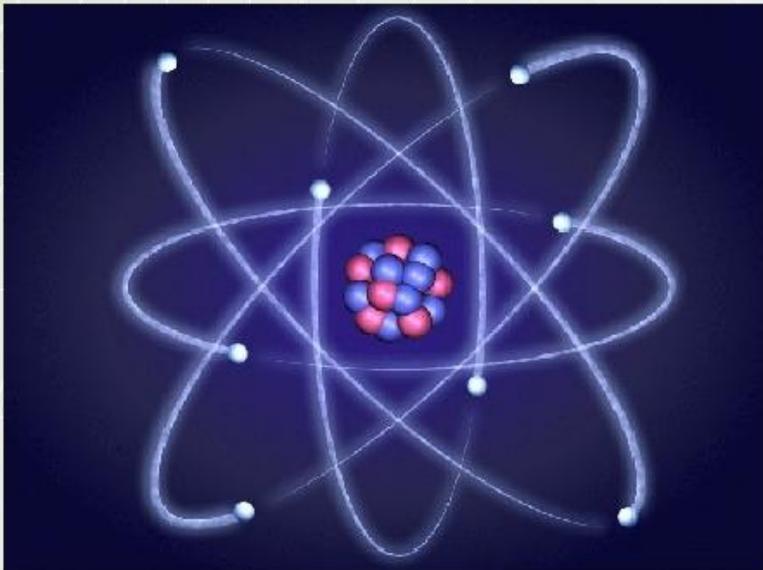
# Строение атома



# Квантово-механические закономерности, лежащие в основе строения атома

1911 г. Резерфорд - **планетарная модель атома**

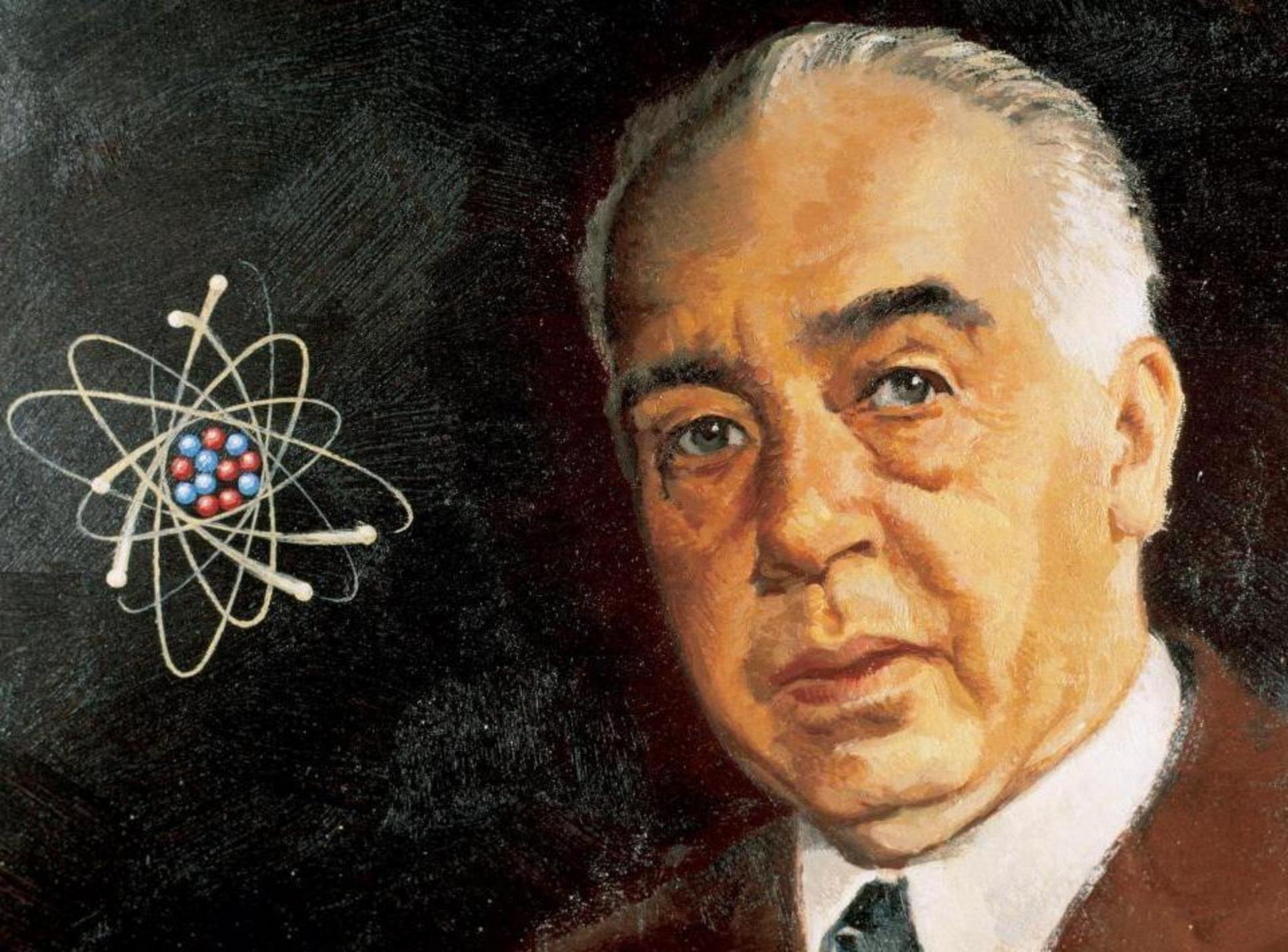
1. Атомное ядро (в 100 тысяч раз меньше атома)
2. Вокруг ядра движутся легкие частицы – электроны



Ядро состоит из частиц: протонов и нейтронов.



Английский ученый  
**Эрнест Резерфорд**  
(1871- 1937)



## Нильс Бор 1913 г.

**1 постулат:** в изолированном атоме  $\bar{e}$  движется по круговым стационарным орбитам, при этом атом не излучает и не поглощает  $E$

**2 постулат:** переход  $\bar{e}$  с одной орбиты на другую сопровождается испусканием или поглощением  $E$

$$E = -\frac{me^4}{n^2\hbar^2}$$

При этом разность энергий начального и конечного состояний воспринимается или отдается в виде **кванта** энергии:

$$h\nu = E_{\text{н}} - E_{\text{к}},$$

где  **$h$**  – **постоянная Планка**

$$(h=6,62 \times 10^{-34} \text{ Дж}\times\text{с});$$

$\nu$  - частота колебаний излучения

- *радиусы стационарных орбит* относятся друг к другу как квадраты натуральных чисел  $1^2 : 2^2 : 3^2 : n^2$ . Величина *n* (порядковый номер орбиты, или номер энергетического уровня) была названа *главным квантовым числом*.

Для атома водорода радиус ближайшей к ядру орбиты равен  $52,9 \times 10^{-12}$  м. Электрон вращается по ней со скоростью 2200 км/ч.

- 1924 г. де Бройль – *гипотеза*: каждая движущаяся частица одновременно обладает свойствами волны (*корпускулярно-волновой дуализм*), длина которой

$$\lambda = h/mv$$

# *Современная теория строения атома – квантовая механика*

Квантовую механику от классической механики отличают три идеи:

**Квантование** энергии электронов в атоме

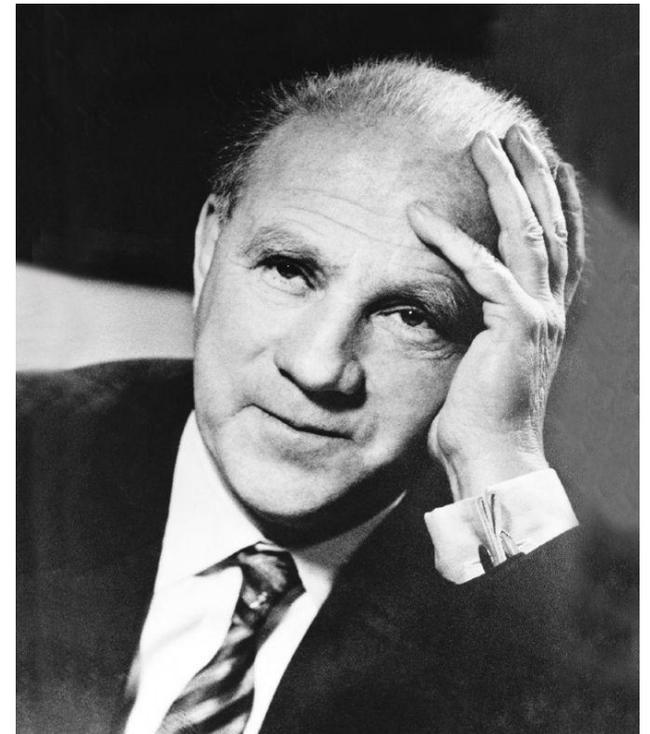
**Двойственная** природа  $e$

**Вероятностный** характер законов микромира

# *Принцип неопределённости Гейзенберга*

Невозможно одновременно точно определить координаты и импульс движущегося в атоме  $e^-$  в силу его волновых свойств

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \frac{h}{2}$$



# Уравнение Шрёдингера

Эрвин Шрёдингер 1926 г. - волновое уравнение, учитывающее двойственную природу  $\bar{e}$



$$-\frac{\hbar^2}{8\pi^2 m} \left( \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} \right) + U\psi = E\psi$$

$\Psi$  – волновая функция;

$m$  – масса электрона. Масса покоя электрона -

$$m_e = 9,109 \cdot 10^{-31} \text{ кг};$$

$U$  – потенциальная энергия;

$E$  – полная энергия электрона;

$x, y, z$  – координаты.

$|\Psi|^2$  - вероятность нахождения электрона в пространстве характеризуется **квадратом волновой функции**

При решении уравнения Шредингера, появляются три величины, которые могут принимать только дискретные целочисленные значения – три квантовых числа. Они обозначаются символами  $n$ ,  $l$  и  $m_l$

- **Главное квантовое число** ( $n$ ) - определяет средний радиус электронного облака, или общую энергию электрона на данном уровне. Принимает натуральные значения от 1 до  $\infty$  (обозначаемых латинскими буквами K, L, M, N, O, P, Q ).
- Совокупность  $\bar{\epsilon}$  в атоме с одинаковым значением  $n$  называется **энергетическим уровнем**

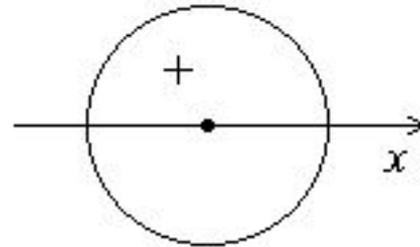
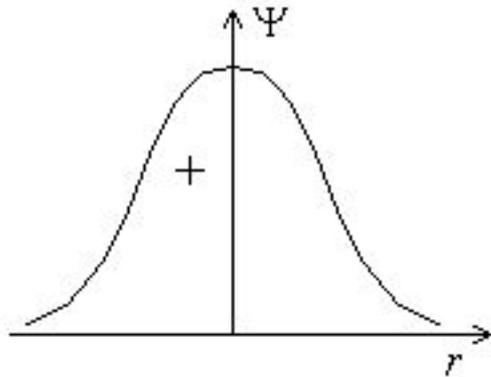
**Орбитальное** (побочное) квантовое число ( $l$ )

определяет механический момент электрона,  
обусловленный движением его вокруг ядра.

Характеризует форму электронного облака и энергию электрона на подуровне, число подуровней на данном энергетическом уровне

**Принимает значения от 0 до  $n-1$ :**

**$s$  ( $l = 0$ ),  $p$  ( $l = 1$ ),  $d$  ( $l = 2$ ),  $f$  ( $l = 3$ )**



- График волновой функции s-электрона в зависимости от расстояния до ядра. Форма s-орбитали

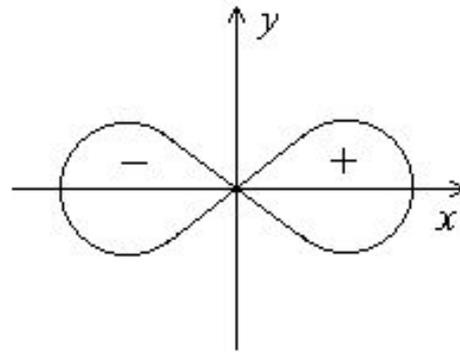
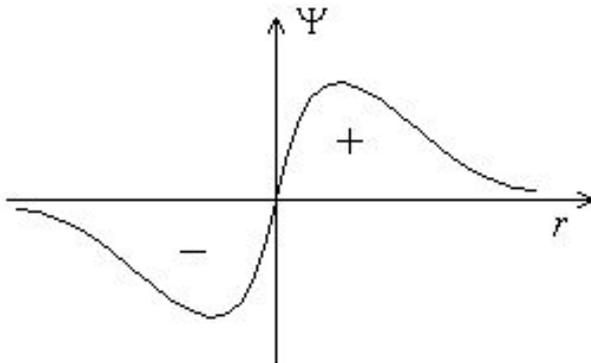


График волновой функции p-электрона. Форма p-электронного облака

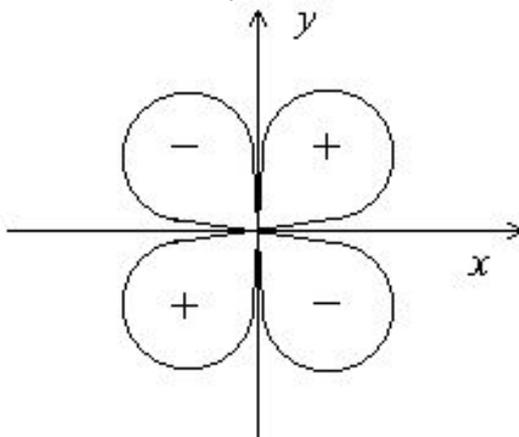


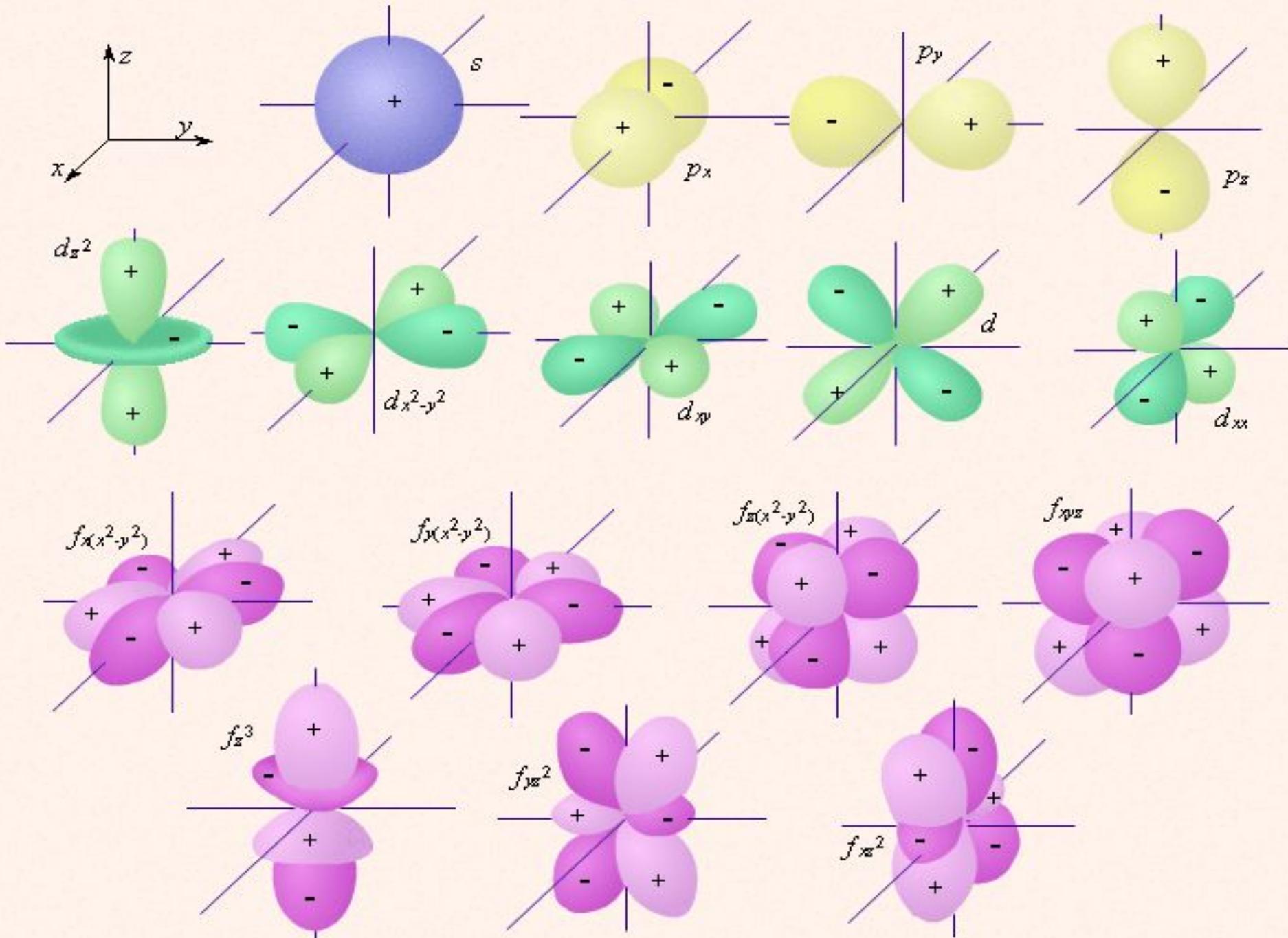
График волновой функции d-электрона. Форма d-электронного облака

- **Магнитное квантовое число** ( $m_l$ ) характеризует ориентацию электронного облака в пространстве. Принимает **значения от  $-l$  до  $+l$** , имеет  $(2l+1)$  различных значений.
- **Спиновое квантовое число** ( $m_s$  или  $s$ ) не связано с движением электрона вокруг ядра, а определяет его собственное состояние, принимает два **значения:  $+1/2$  и  $-1/2$** .

# Энергетическая диаграмма уровней с 1-го по 3-й (число орбиталей на данном энергетическом уровне = $n^2$ )



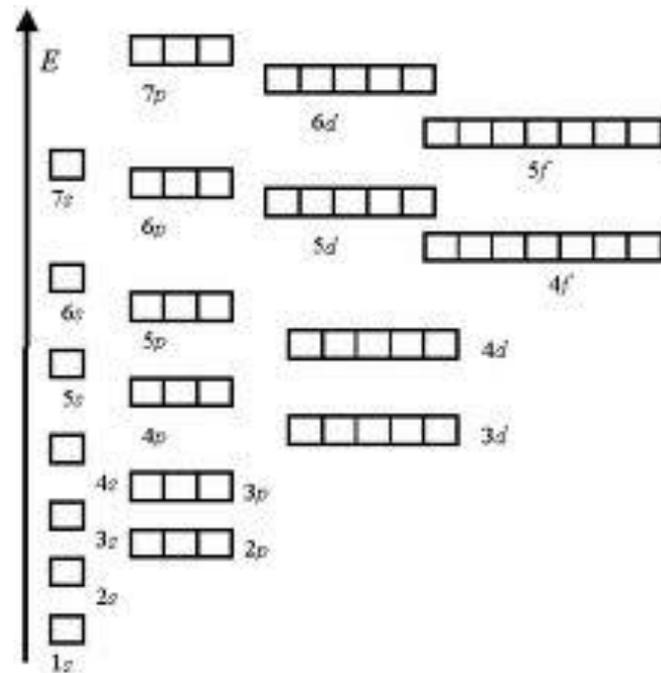
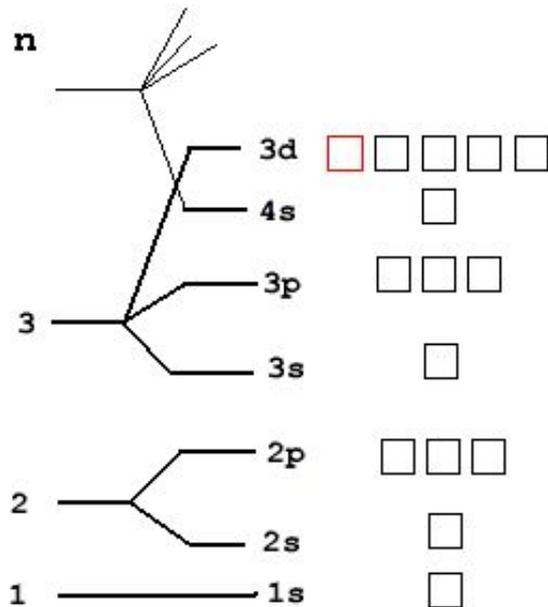
**Формы электронных облаков для  
различных состояний в атомах  
(полярные диаграммы  $|\Psi|^2$ )**



# Основные принципы заполнения электронами атомных орбиталей

## Принцип наименьшей $E$

$\bar{e}$  в атоме в первую очередь стремится занять уровень и подуровень с наименьшей  $E$



Вольфганг ПАУЛИ,Фридрих Хунд, Всеволод Маврикиевич  
Клечковский



**Принцип Паули:** в атоме не может быть двух электронов, у которых все четыре квантовых числа были бы одинаковыми.  $\rightarrow N = 2n^2$  - емкость энергетических уровней;  $N = 2(2l+1)$  – подуровней.

**Правило Хунда:** устойчивому состоянию атома соответствует такое распределение электронов в пределах энергетического подуровня, при котором абсолютное значение суммарного спина атома максимально.

**Первое правило Клечковского:** при увеличении заряда ядра атомов заполнение энергетических уровней происходит от орбиталей с меньшим значением суммы главного и орбитального квантовых чисел  $(n+l)$  к орбиталям с большим значением этой суммы

# Распределение электронов по уровням и подуровням энергии в атоме

H—1 электрон,  $n = 1, l = m_l = 0, m_s = \frac{1}{2}$  или  $m_s = -\frac{1}{2}$ ;

$1s^1$



He —2 электрона,  $n = 1, l = m_l = 0, m_s = \pm \frac{1}{2}$ ;  $2n^2=2$

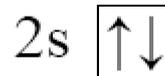
1s

$1s^2$



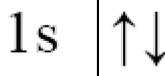
Li —3 электрона,  $n = 2; l = 0, 1; m_l = -1, 0, +1; m_s = \pm \frac{1}{2}$ ;

$2n^2=8$   $1s^2 2s^1$



Be —4 электрона,  $n = 2; l = 0, 1; m_l = -1, 0, +1; m_s = \pm \frac{1}{2}$ ;

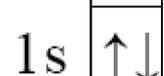
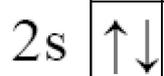
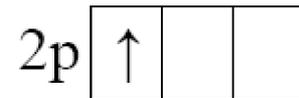
$2n^2=8$   $1s^2 2s^2$

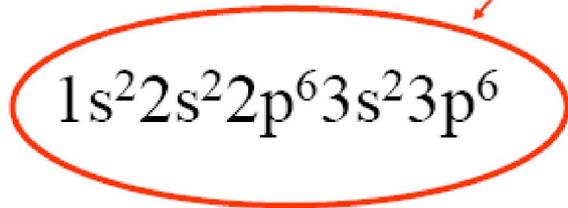
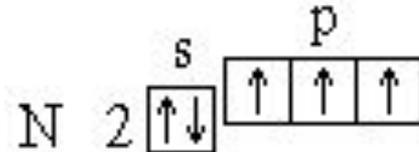
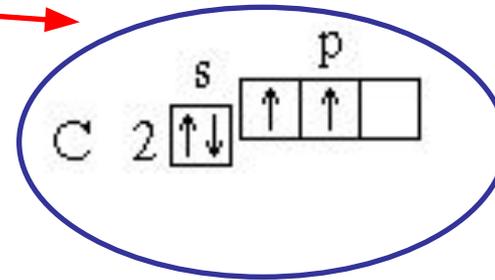
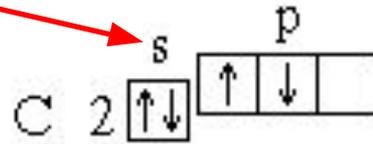
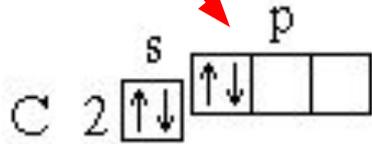


B — 5 электронов,  $n = 2; l = 0, 1; m_l = -1, 0, +1;$

$m_s = \pm \frac{1}{2}; 2n^2=8$

$1s^2 2s^2 2p^1$



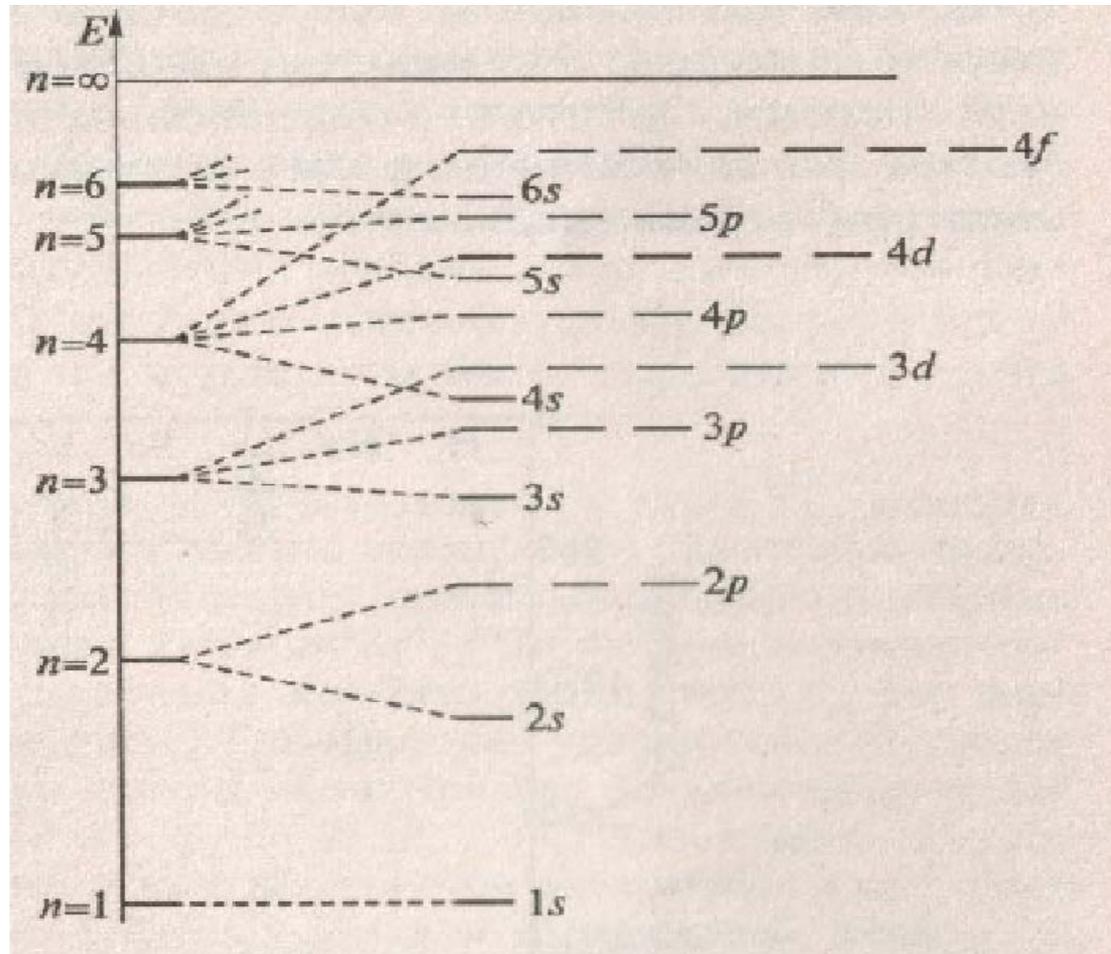


Na – 11 электронов,  $n=3$ ;  $l = 0, 1, 2$ ;  $m_l = -2, -1, 0, +1, +2$ ;  $m_s = \pm \frac{1}{2}$ ;  $2n^2=18$



- **Второе правило Клечковского**, согласно которому при одинаковых значениях суммы  $(n+l)$  орбитали заполняются в порядке возрастания главного квантового числа  $n$ .
- Следовательно, 4s-подуровень ( $n+l=4$ ) должен заполняться раньше, чем 3d ( $n+l=5$ ):
- K ( $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^1$ ); Ca ( $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2$ );
- Sc ( $n+l = 5$ ) ( $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^1$ );

# Энергия орбиталей



**$1s \rightarrow 2s \rightarrow 2p \rightarrow 3s \rightarrow 3p \rightarrow 4s \rightarrow 3d \rightarrow 4p \rightarrow$   
 $5s \rightarrow 4d \rightarrow 5p \rightarrow 6s \rightarrow 4f \dots$**

- из правил Клечковского имеются исключения. У атомов **Cr, Cu, Nb, Mo, Ru, Rh, Pd, Ag, Pt, Au** имеет место “провал” электрона с s-подуровня внешнего слоя на d-подуровень предыдущего слоя



Второй тип исключений из правила Клечковского

