



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,

$$\text{Масса } m_n \approx m_p$$

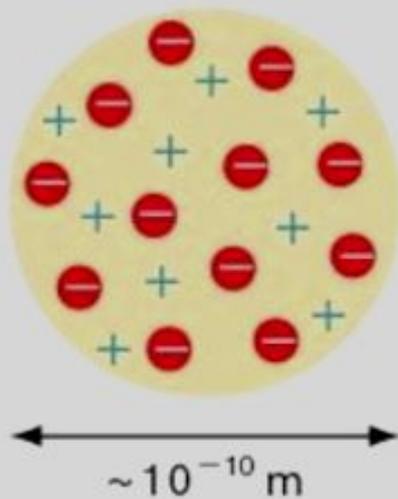
Субатомные элементарные частицы

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 α - и β -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 α -частица — ядро гелия.

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

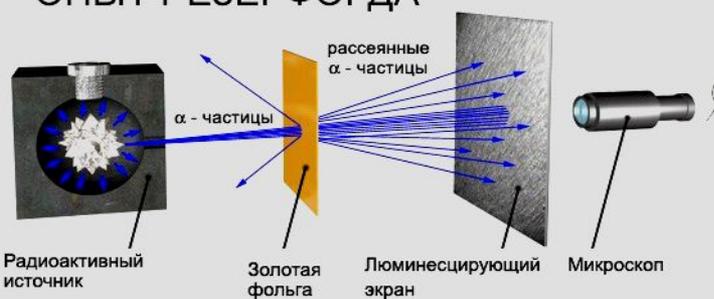
Предложил планетарную модель атома.

Открыл образование новых химических элементов при распаде тяжелых радиоактивных элементов.



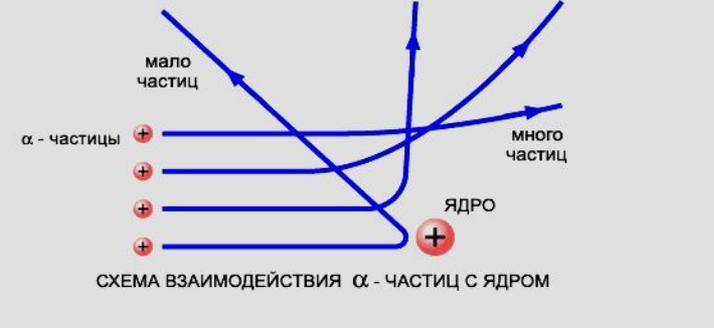
Эрнст Резерфорд (1871-1937)

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 various 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 'при отсутствии золотой фольги' (without the gold foil), showing a dense cluster of flashes, and the bottom one is taken 'при ее внесении в поток' (when it is introduced into the stream), showing a sparse distribution of flashes.

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



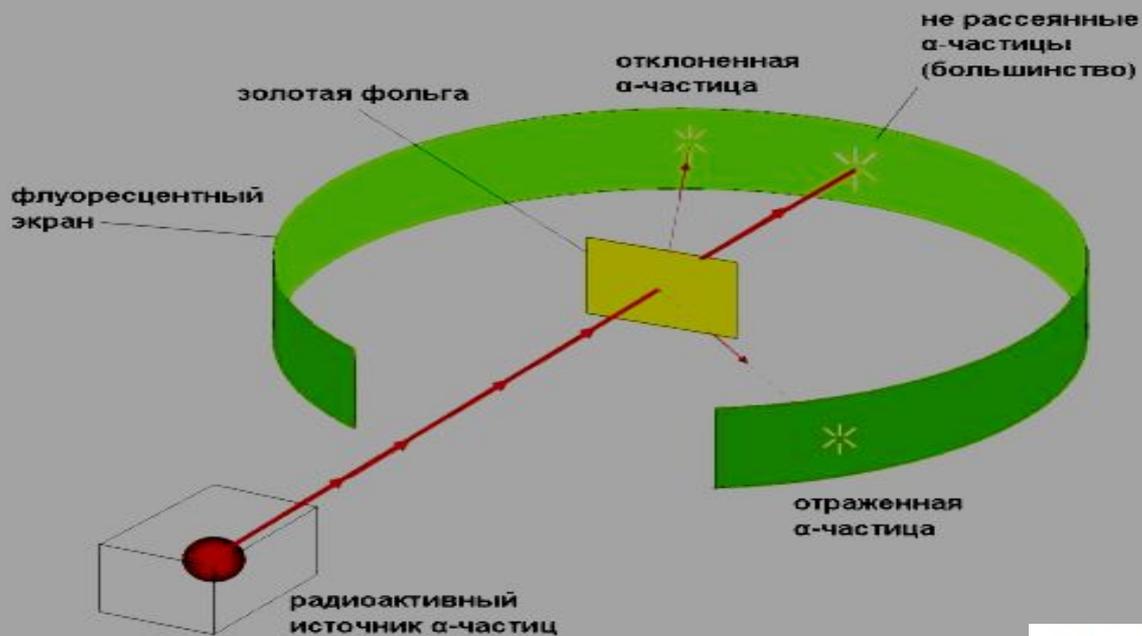
This schematic shows the interaction between alpha particles and a nucleus. On the left, a 'мало частиц' (few particles) approach a 'ЯДРО' (nucleus), represented by a red circle with a '+' sign. Some particles pass straight through, while others are deflected. On the right, a 'много частиц' (many particles) approach the nucleus, and one is shown being deflected at a large angle. 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 ЯДРО много частиц СХЕМА ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ α - ЧАСТИЦ С ЯДРОМ

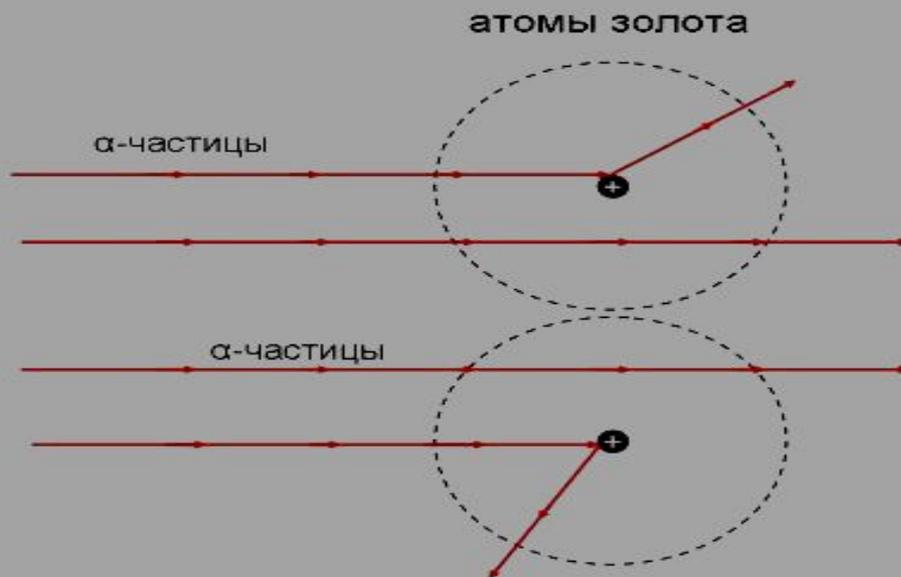
Фотографии люминесцирующего экрана при отсутствии золотой фольги в потоке α - частиц и при ее внесении в поток

Каждая вспышка вызывается ударом α - частицы об экран

ДОПОЛНИТЕЛЬНЫЕ СВЕДЕНИЯ



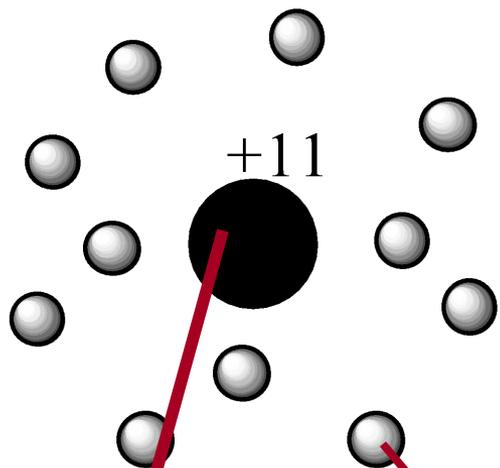
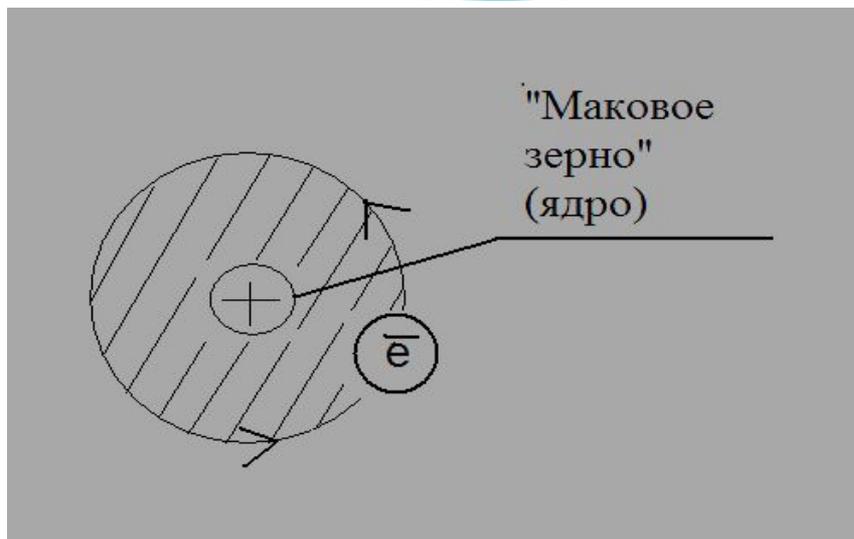
Эксперимент Резерфорда (1908-1911)



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)

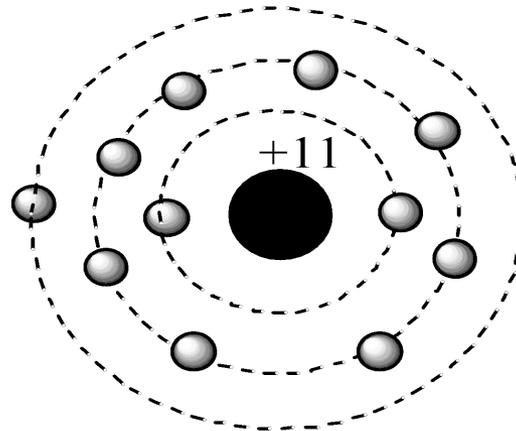
В 1913 г. **Нильс Бор** опубликовал серию статей «О строении атомов и молекул», открывших путь к атомной квантовой механике.



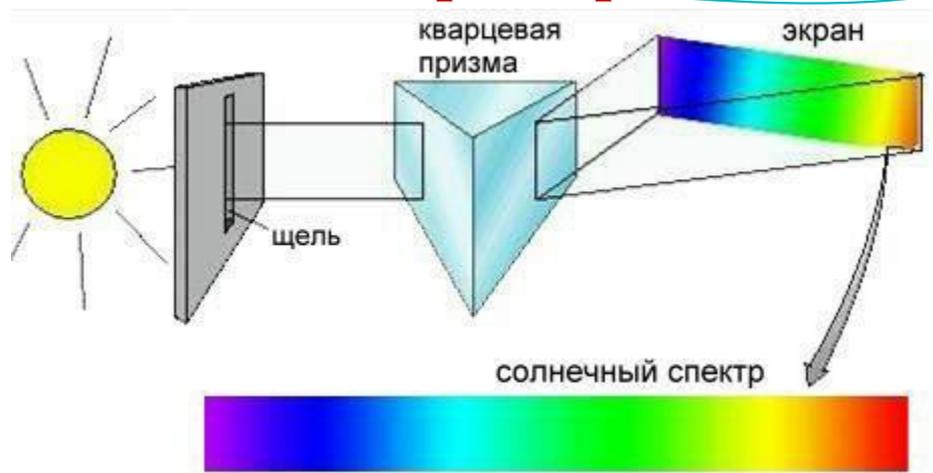
В **1913 г** *Нильс Бор* (Дания) предположил, что

- 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**

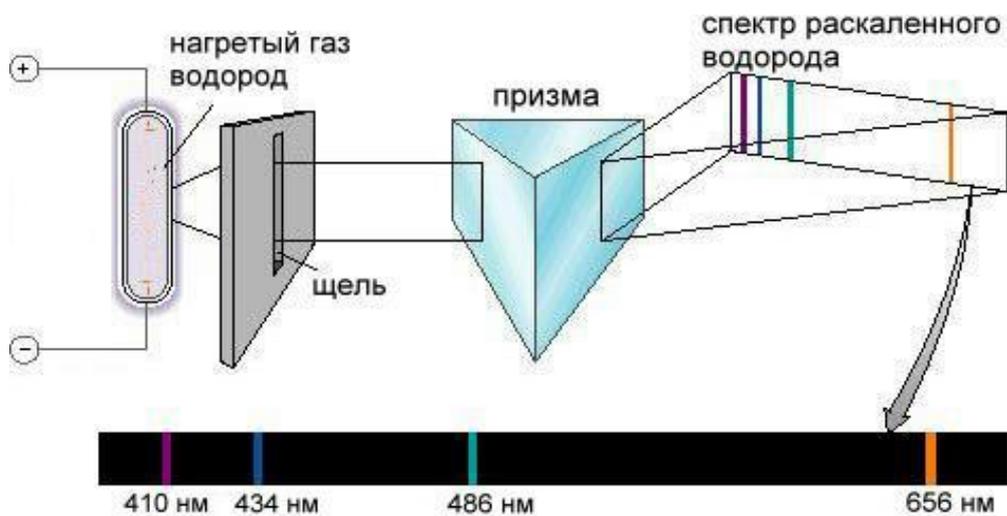
Нильс Бор (1885-1962)



Спектр солнечного излучения, полученный с помощью простейшего спектрометра

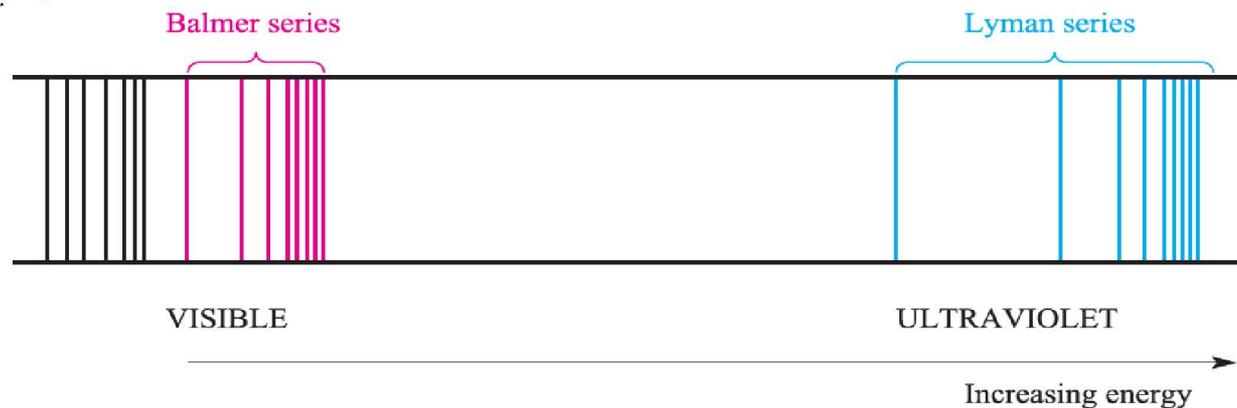
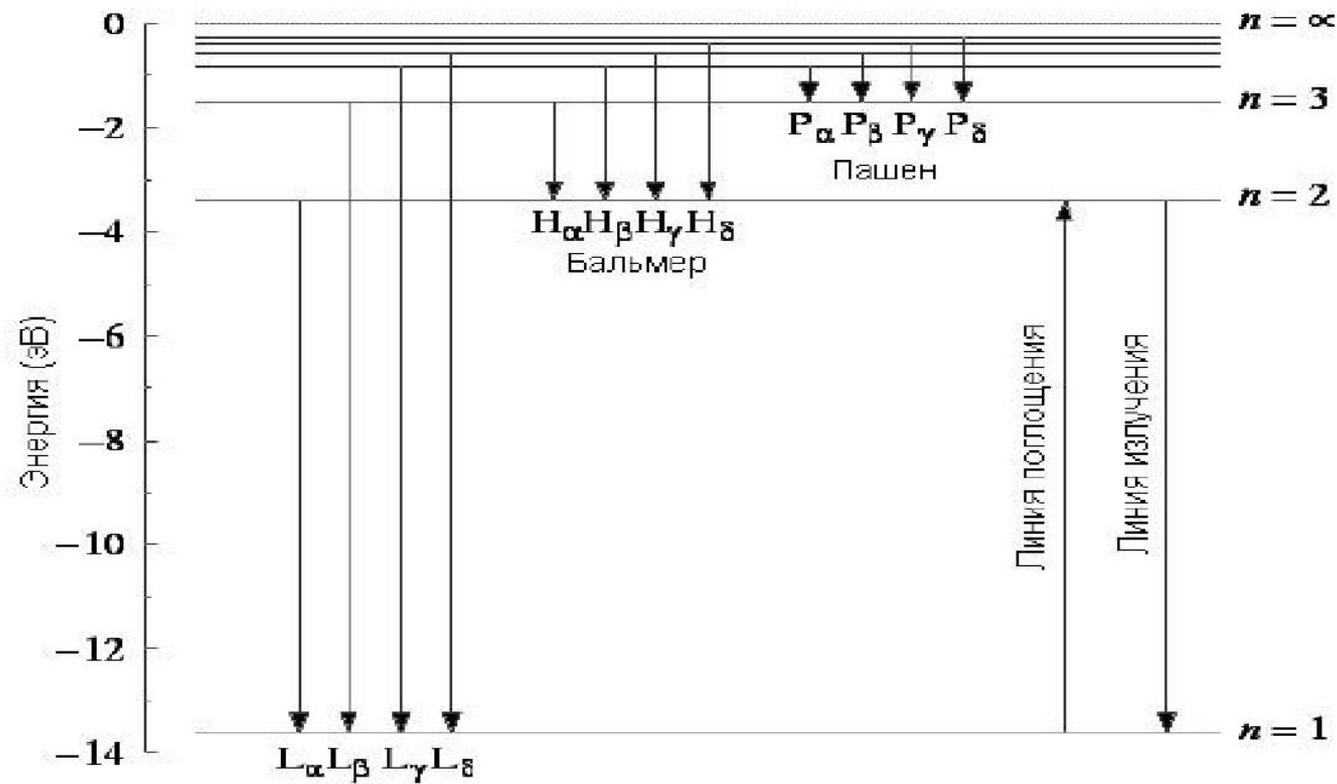


Спектр испускания раскаленного атомарного водорода.

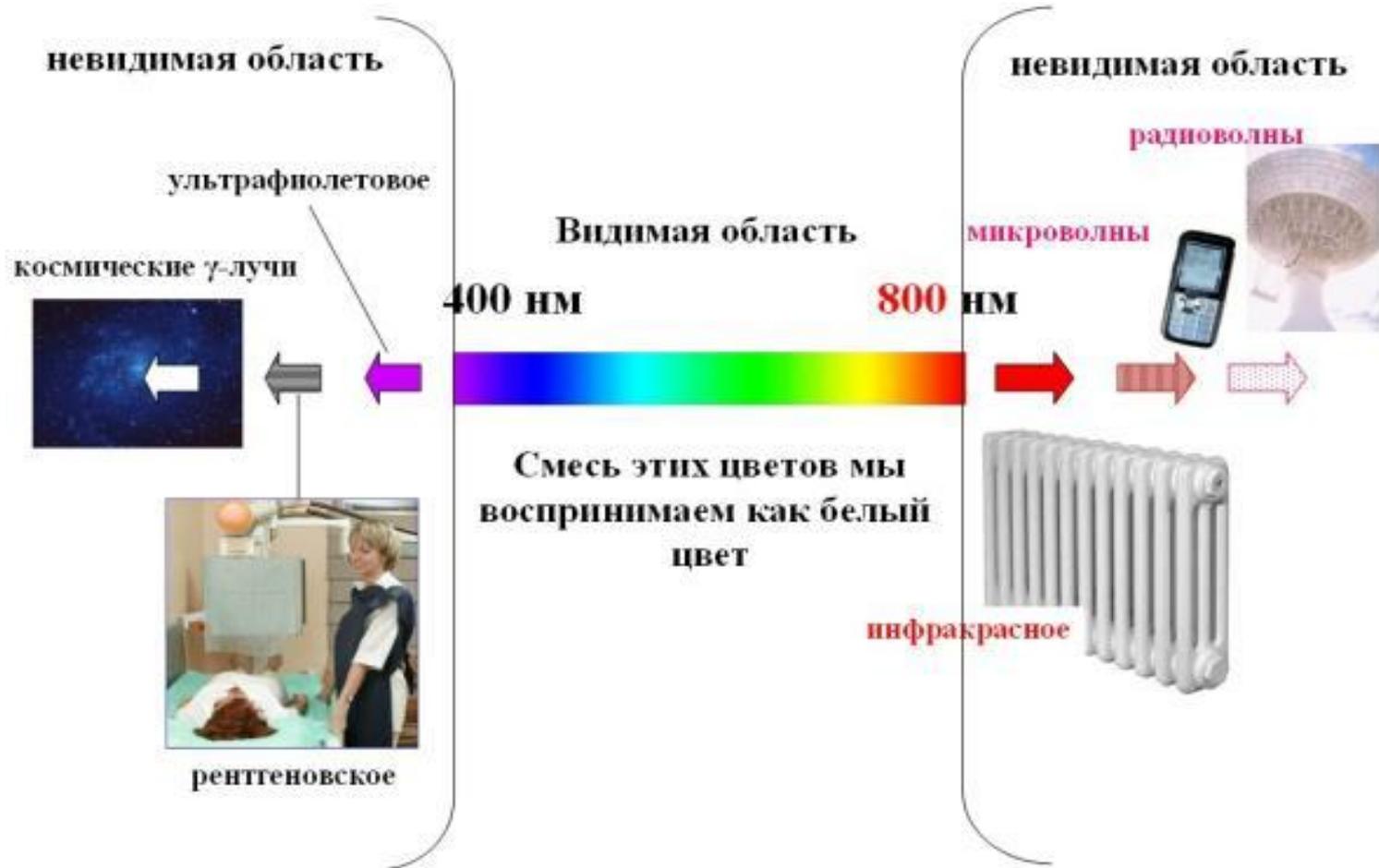


Водород в так называемой водородной лампе разогревается сильным электрическим разрядом. Испускаемый атомами водорода свет, пройдя через призму, дает спектр, состоящий из отдельных линий. На рисунке показана только видимая область спектра. Позже, с совершенствованием спектрометров, были открыты серии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

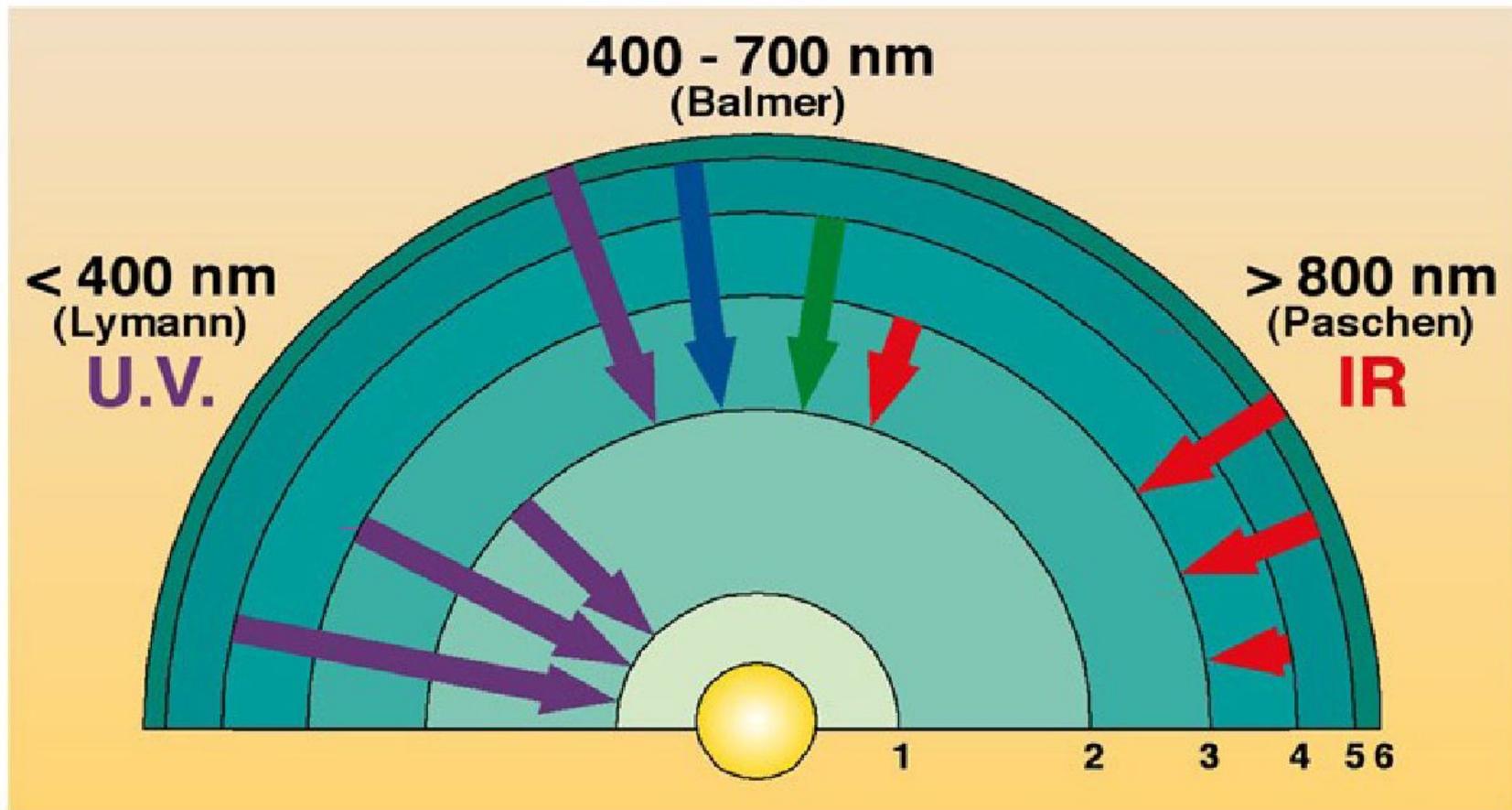
Водородоподобные атомы. Спектральные переходы



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 γ** и **длина волны λ** .

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 ψ , 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 $n = 1$.

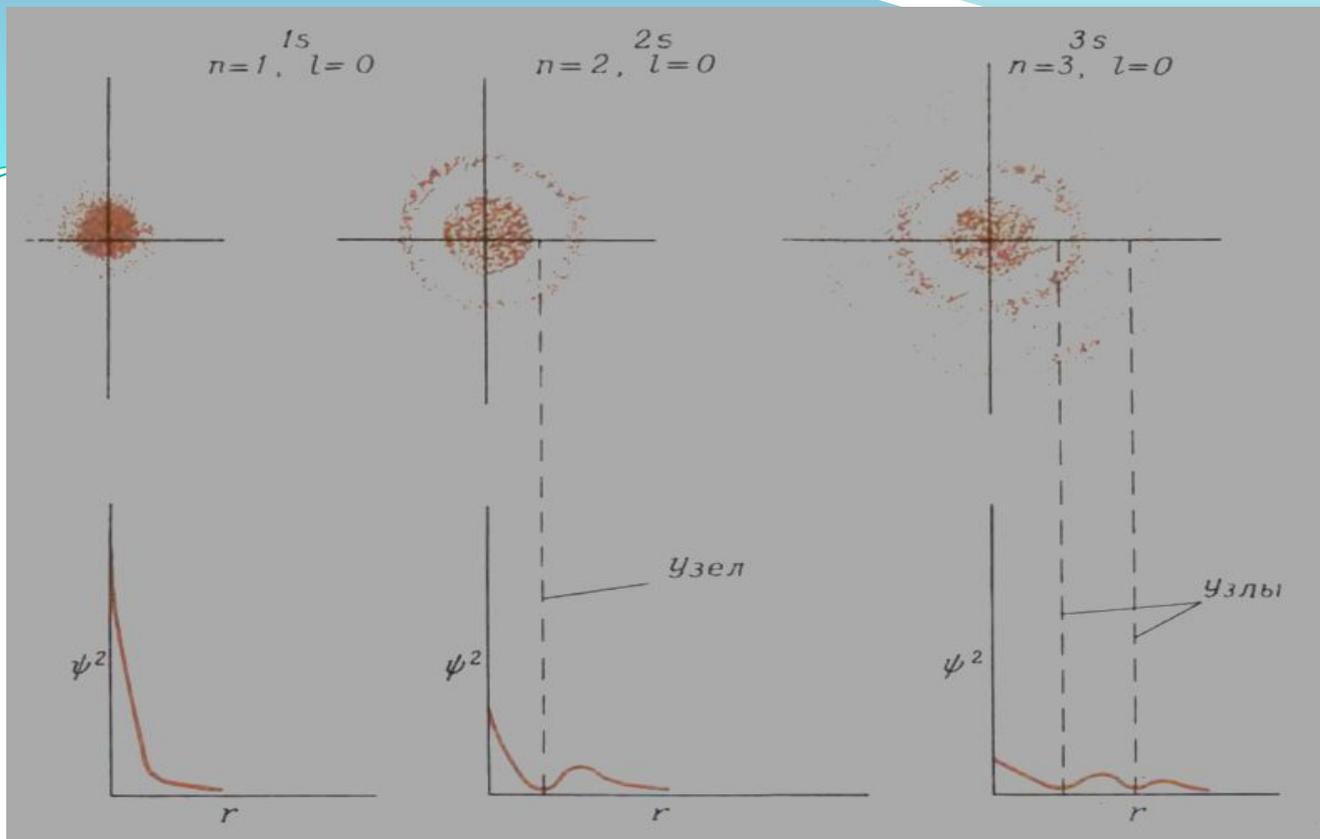


Рис. 5.15. Распределения электронной плотности для $1s$ -, $2s$ - и $3s$ -орбиталей. В нижней части рисунка показана зависимость электронной плотности, представленной функцией ψ^2 , от расстояния от ядра. Для $2s$ - и $3s$ -орбиталей функция электронной плотности принимает нулевые значения на определенных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

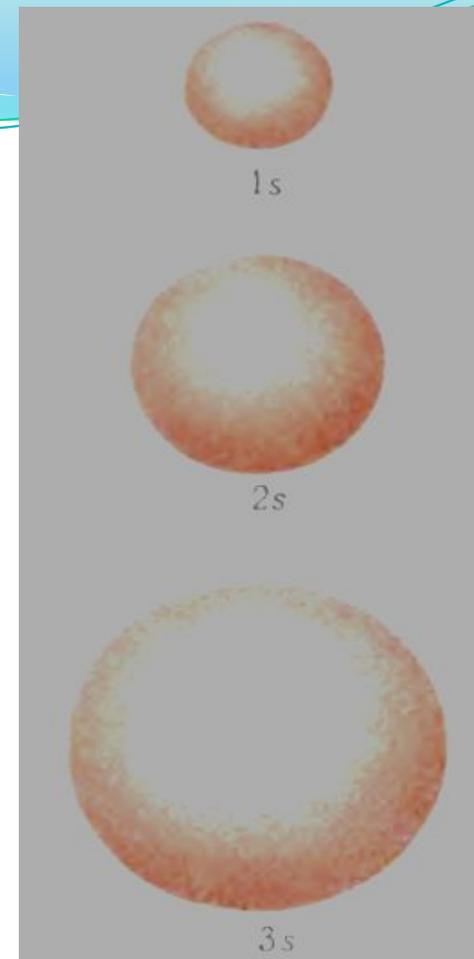
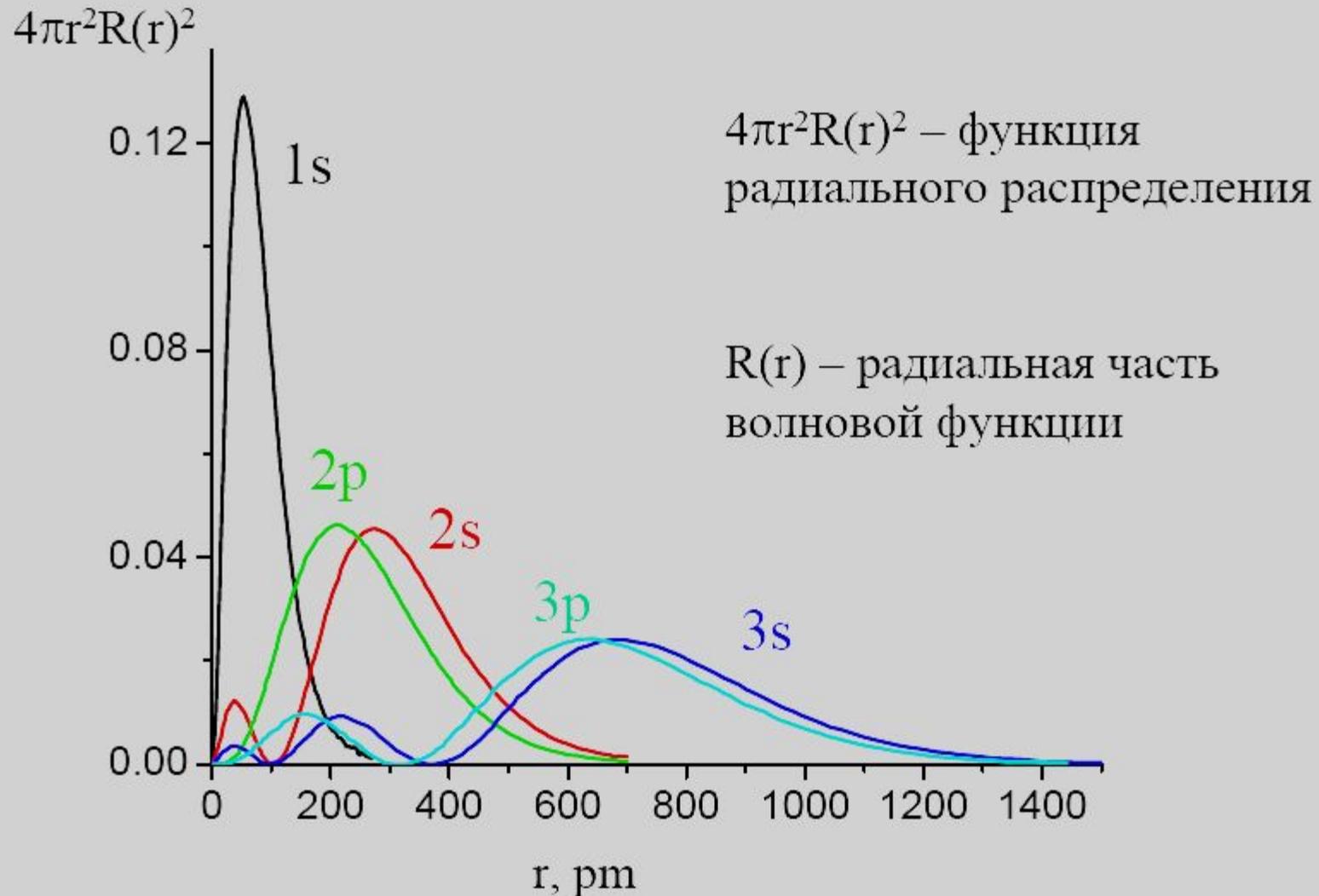


Рис. 5.16. Контурные изображения $1s$ -, $2s$ - и $3s$ -орбиталей. Сферические поверхности соединяют точки, в которых функция ψ^2 принимает постоянное значение. Эти поверхности охватывают пространство, в котором заключено 90% суммарного значения функции ψ^2 для каждой орбитали.

Протяженность орбиталей



Главное квантовое число n – определяет...

Характеризует энергию электрона в атоме и размеры электронного облака

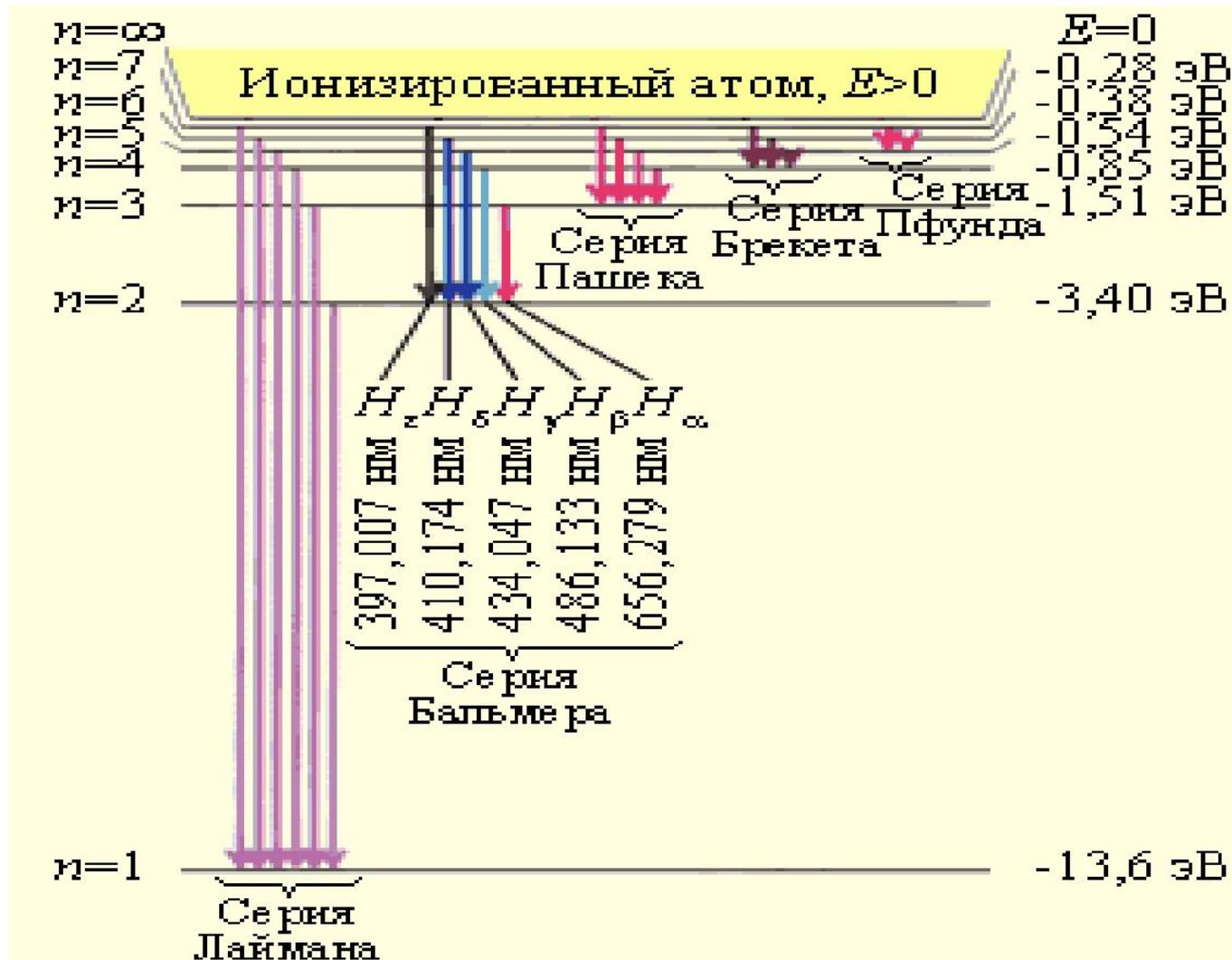
Принимает целочисленные значения **от 1 до ∞**

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

$n =$	1	2	3	4	5	6	7
Обозначение энергетического слоя	K	L	M	N	O	P	Q

Спектр атома водорода

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

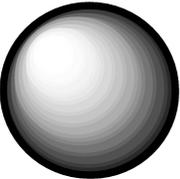
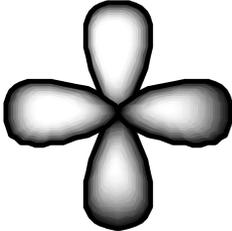


Орбитальное (побочное) квантовое

число l – определяет форму электронного облака

Характеризует энергетический подуровень

Принимает целочисленные знач. от 0 до ∞ ; 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 ψ_{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

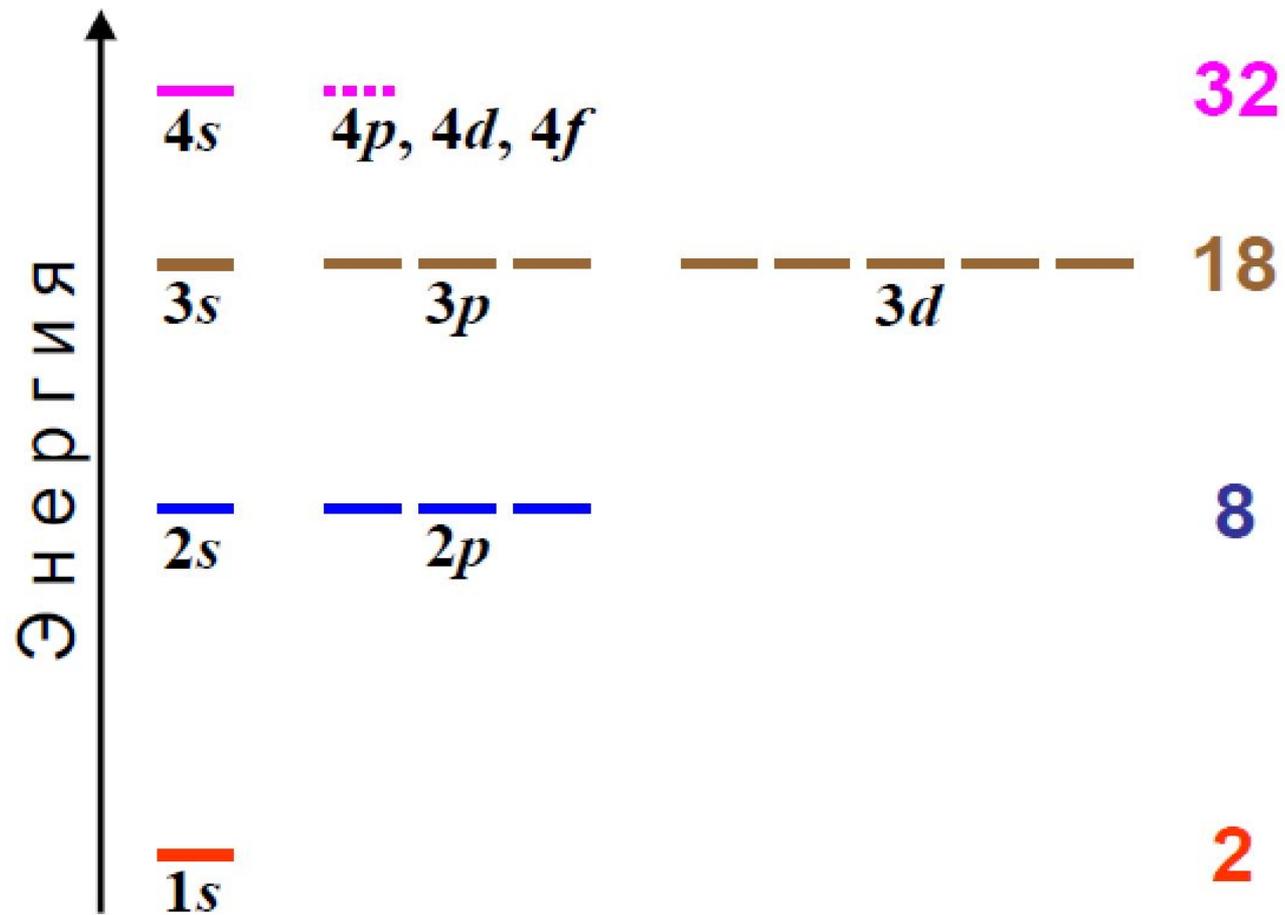
d - состоянию – пять орбиталей

f - состоянию – семь орбиталей

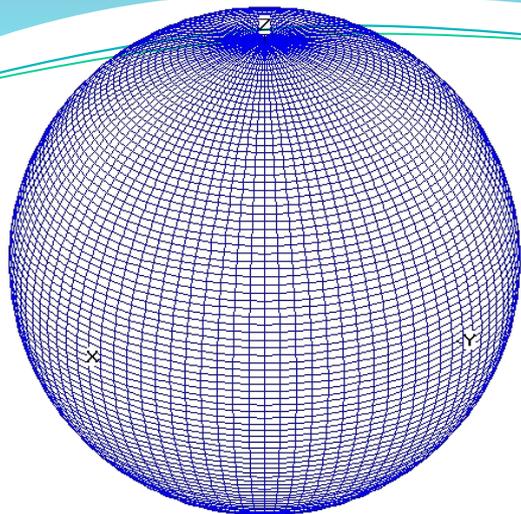
Число орбиталей на подуровне равно $(2l+1)$, а общее число орбиталей на энергетическом уровне равно n^2

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

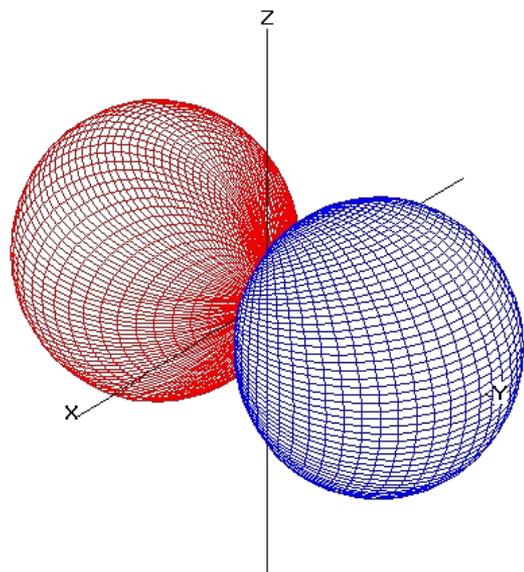
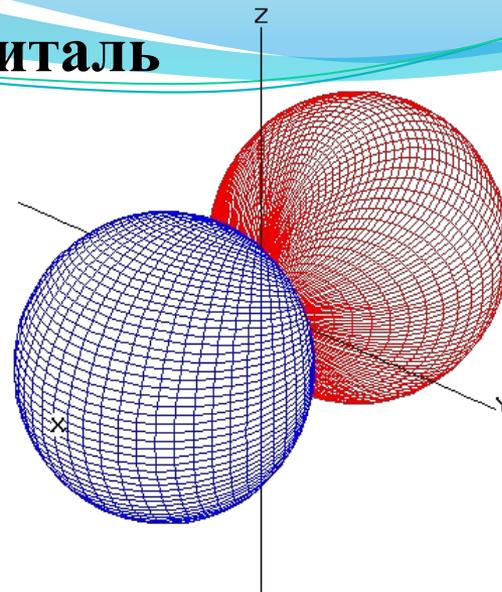
Вырождение водородоподобных уровней



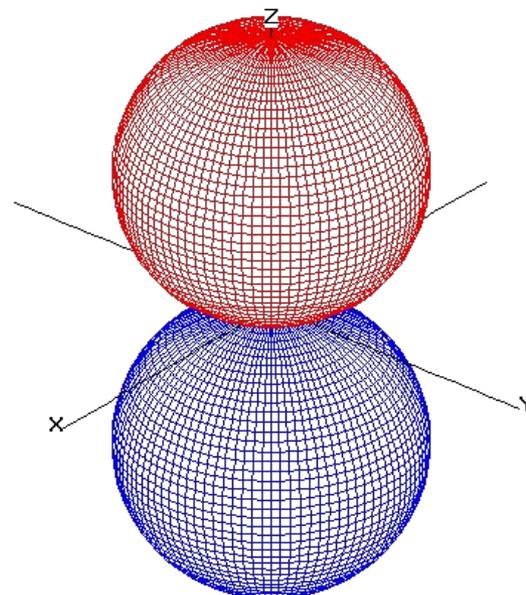
p_x – орбиталь



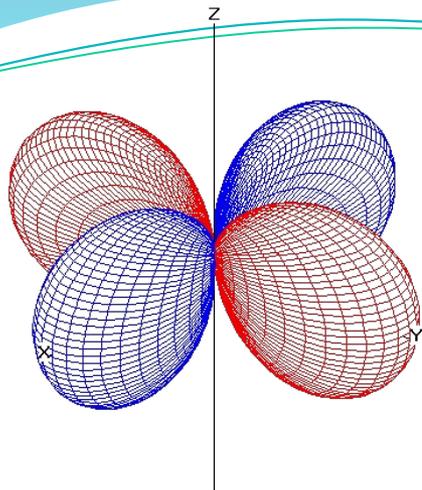
s – орбиталь



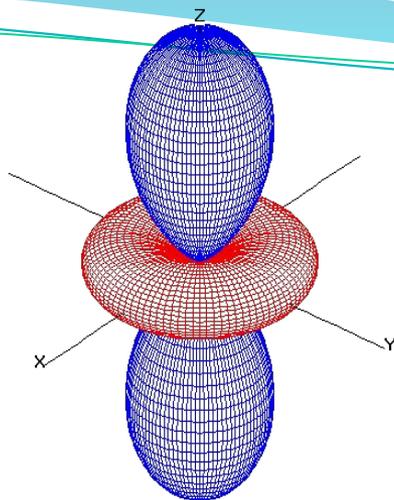
p_y – орбиталь



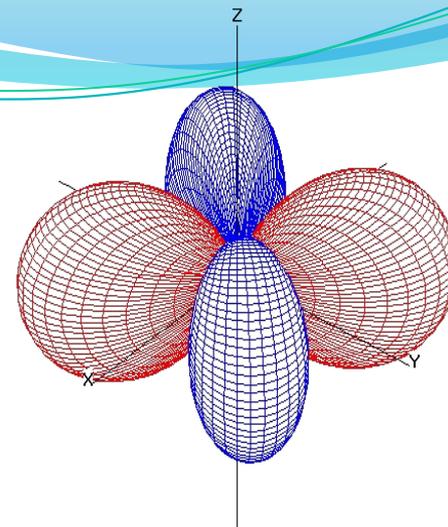
p_z – орбиталь



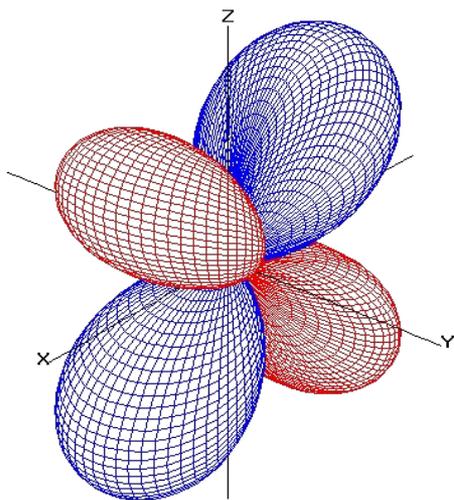
$d_{x^2-y^2}$ – орбиталь



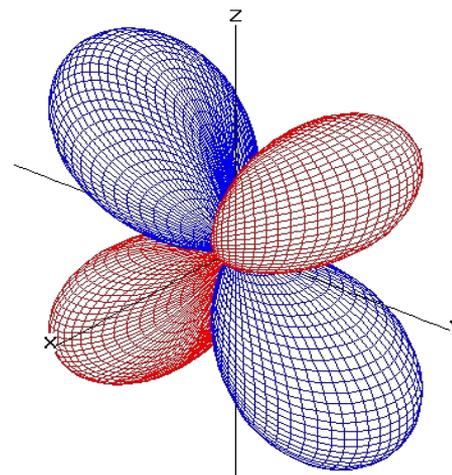
d_{z^2} – орбиталь



d_{xy} – орбиталь

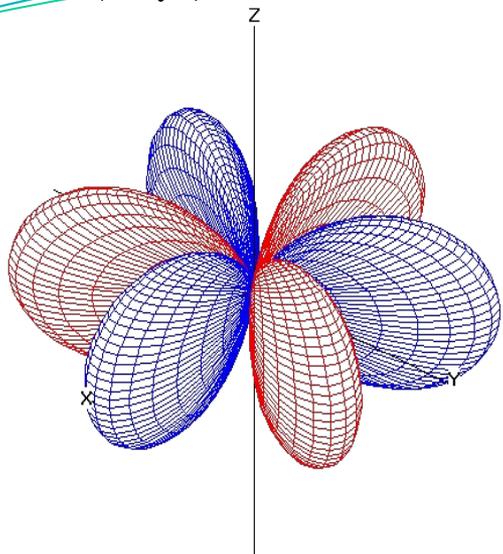


d_{xz} – орбиталь

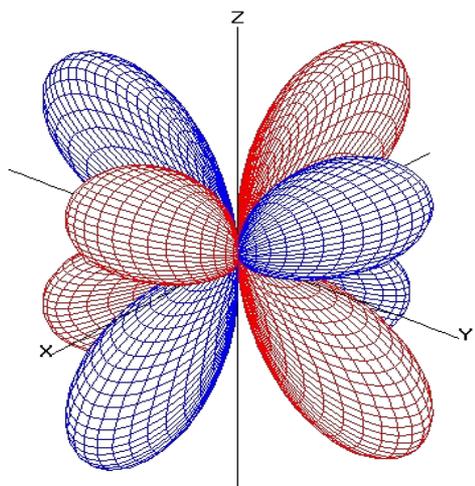
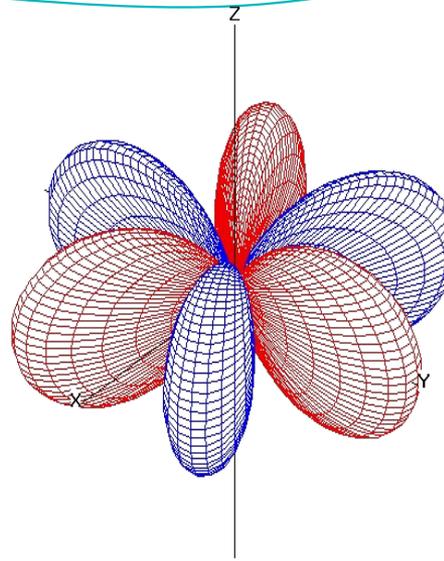


d_{yz} – орбиталь

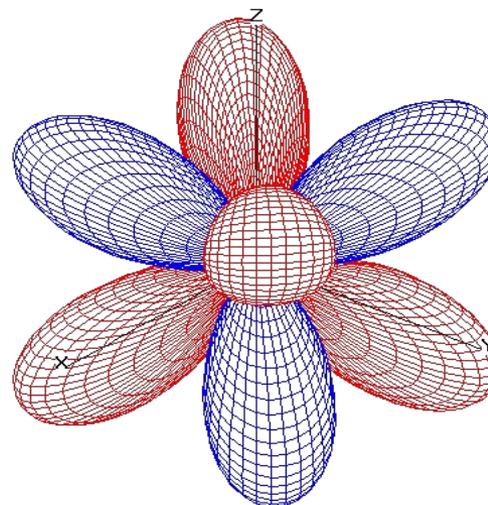
$f_{x(x^2-y^2)}$ – орбиталь



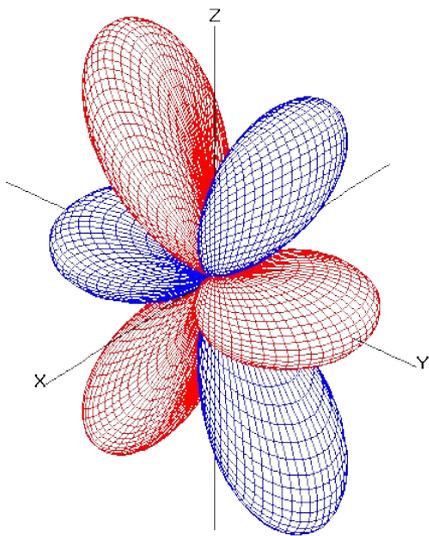
$f_{y(x^2-y^2)}$ – орбиталь



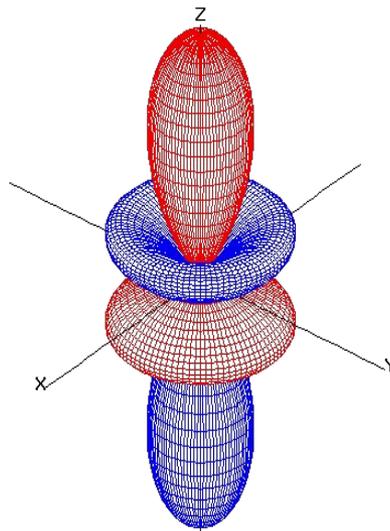
$f_{z(x^2-y^2)}$ – орбиталь



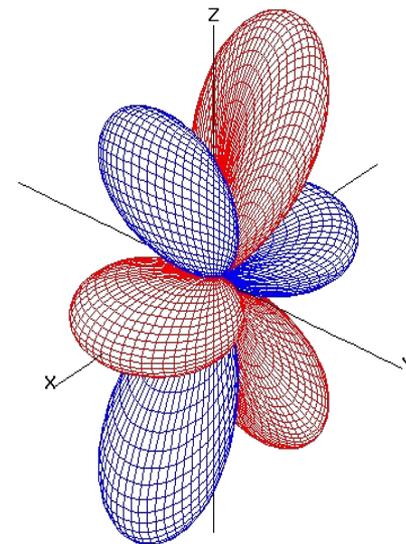
f_{xyz} – орбиталь



f_{yz^2} – орбиталь

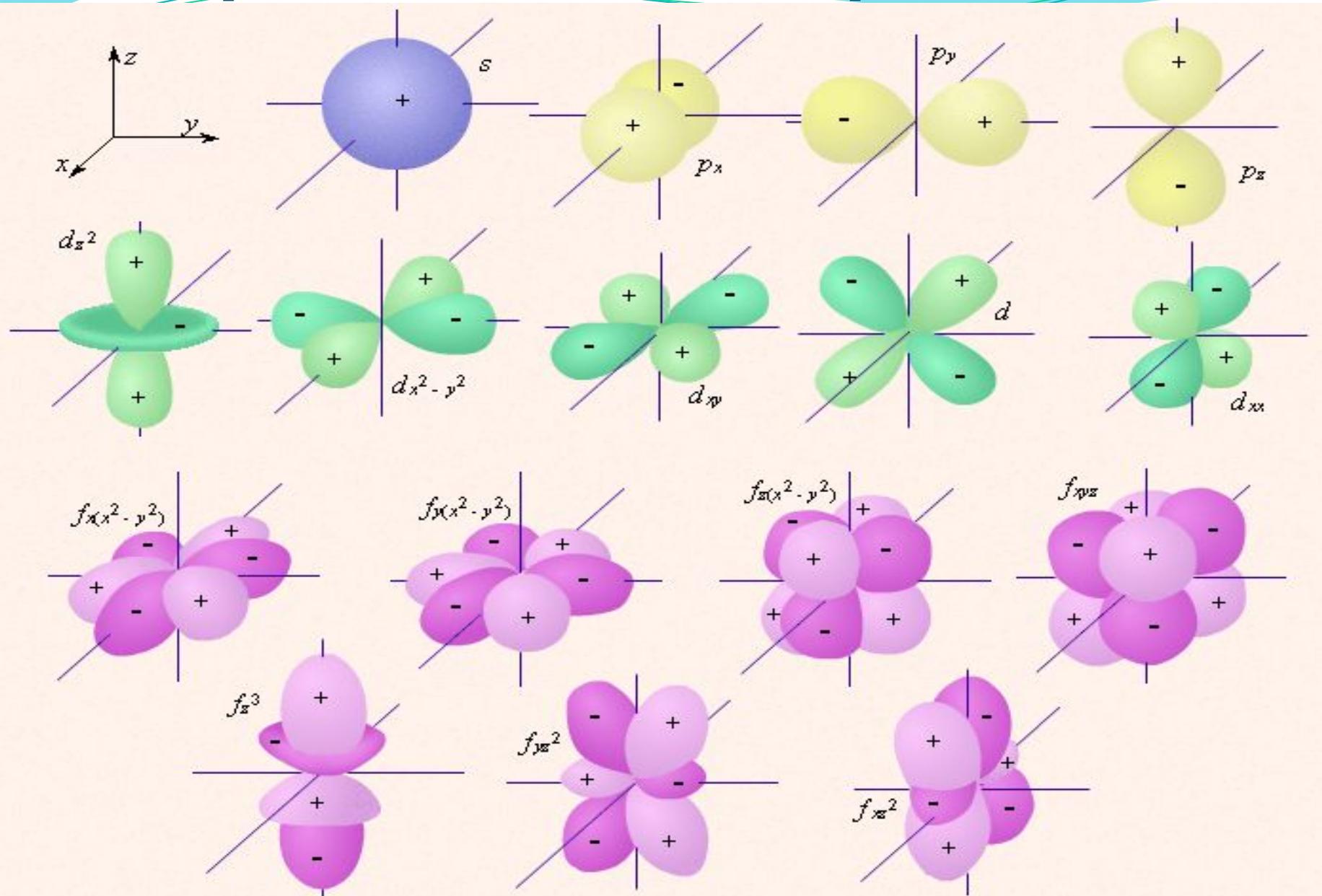


f_{z^3} – орбиталь



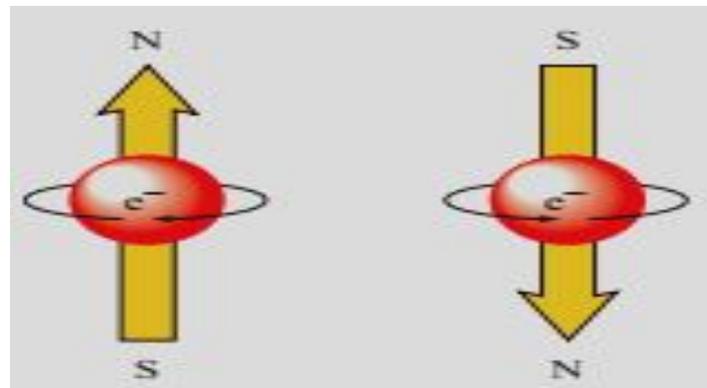
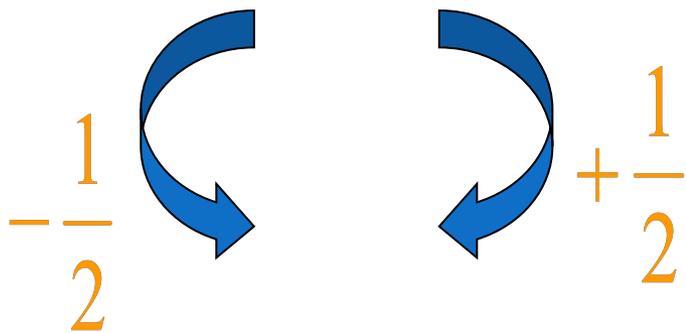
f_{xz^2} – орбиталь

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 $\underline{m_s} = -1/2$



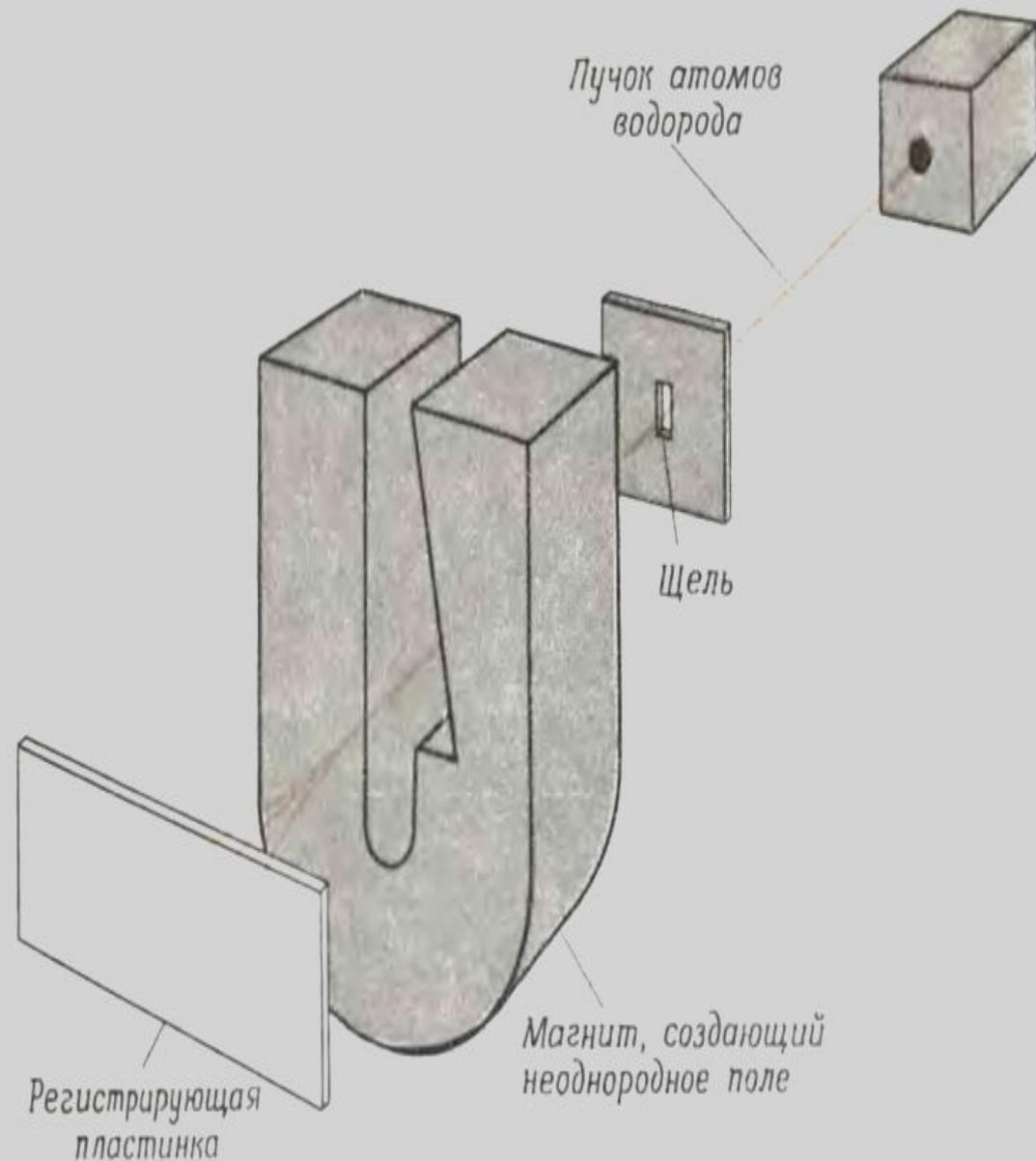


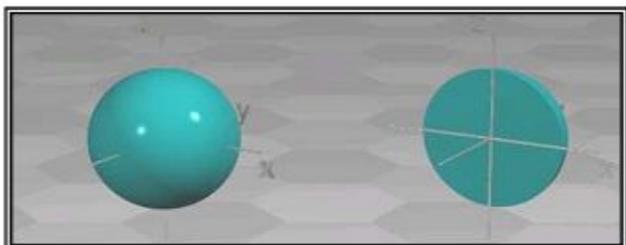
Рис. 6.3. Схема эксперимента Штерна–Герлаха. Пучок атомов водорода пропускают сквозь неоднородное магнитное поле. Атомы со спиновым квантовым числом $m_s = +1/2$ отклоняются в одну сторону, а атомы со спиновым квантовым числом $m_s = -1/2$ в противоположную сторону.

Граничные поверхности s - и p -орбиталей

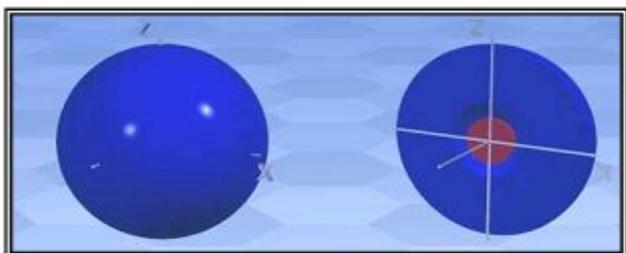
n

ns

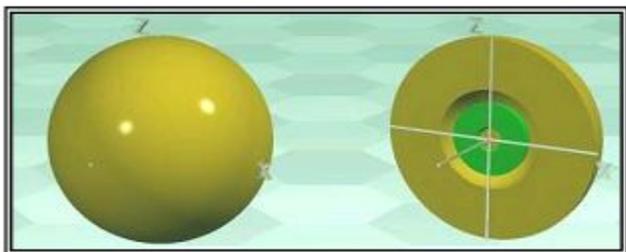
1



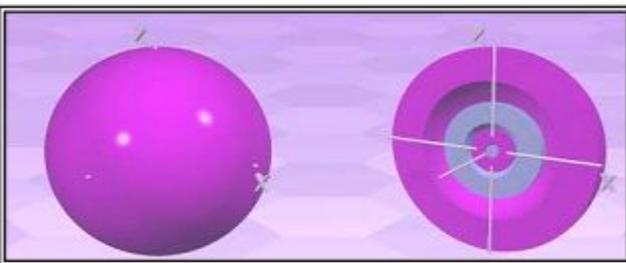
2



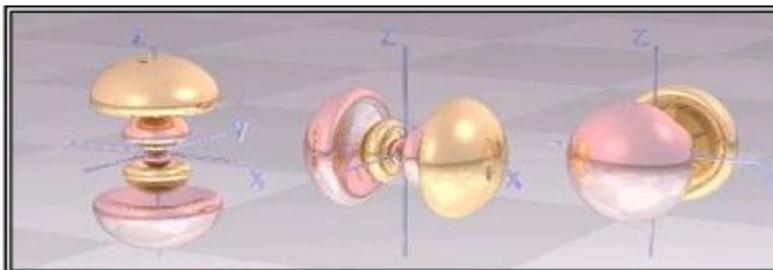
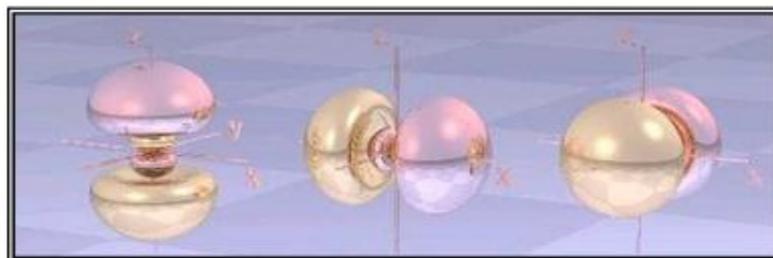
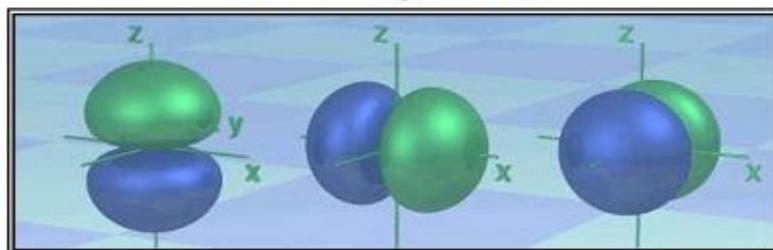
3



4



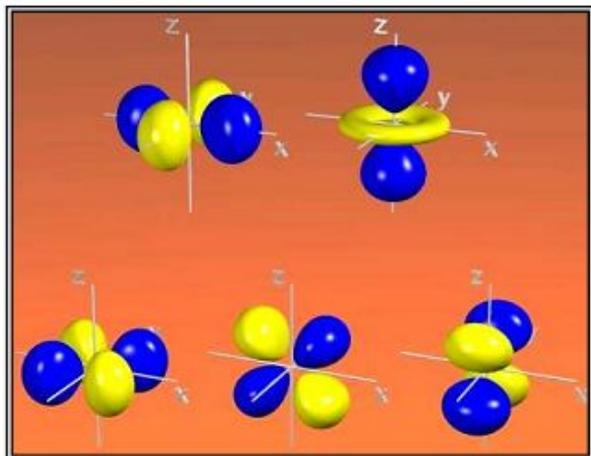
np_x, np_y, np_z



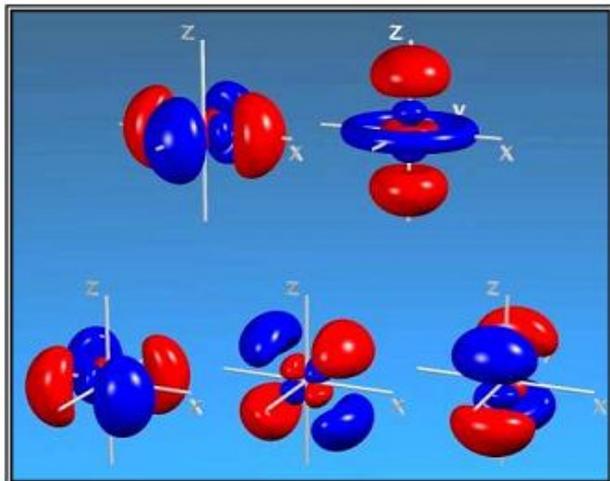
Граничные поверхности d - и f -орбиталей

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

3



4



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

