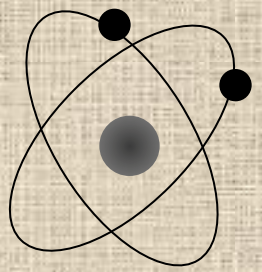
Строение атома



ХИМИЯ

Тема лекции: **Строение атома**

Лектор – Петровский Николай Андреевич

Цель лекции:

изложение строения атомов в рамках современной химической теории

Компетенции, формируемые у студента:

Умения:

- прогнозировать на основе положения элементов в Периодической системе, а также современных представлений о строении атомов, свойства *s*-, *p*-, *d*-элементов.

Основные определения

Атом – наименьшая частица химического элемента, способная к самостоятельному существованию и являющаяся носителем его свойств.

Атом – система взаимодействующих элементарных частиц, состоящая из ядра, образованного протонами и нейтронами, и электронов. В ядре сосредоточена основная масса атома.

Название частицы	масса, кг	масса, а.е.м.	заряд, усл. ед	заряд, Кл
Протон	$1{,}6726 \cdot 10^{-27}$	1,00728	+1	$1{,}6 \cdot 10^{-19}$
Нейтрон	$1{,}6749 \cdot 10^{-27}$	1,00867	0	0
Электрон	$9{,}109 \cdot 10^{-31}$	$5{,}468 \cdot 10^{-4}$	-1	$-1{,}6 \cdot 10^{-19}$

А.е.м. – атомная единица массы – 1/12 часть массы наиболее распространенного естественного стабильного изотопа углерода 12С.

Основные определения

Химический элемент – совокупность атомов с одинаковым зарядом ядра.

$_{Z}^{A}Э$

A – массовое число
Z – заряд ядра атома (число протонов в ядре), соответствует порядковому номеру элемента в периодической системе
A = Z + N, где N – число нейтронов.

Изотопы – атомы с одинаковым зарядом ядра, но разным массовым числом (разное число нейтронов). В химическом отношении изотопы являются неразличимыми атомами. Например, $_{17}^{35}Cl$, $_{17}^{36}Cl$, $_{17}^{37}Cl$

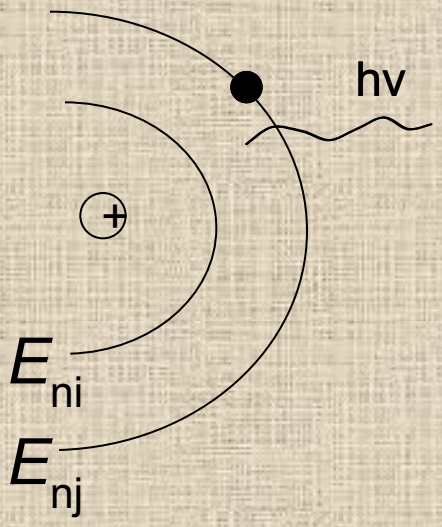
Изобары – атомы с одинаковым массовым числом, но разным зарядом. Например, $_{18}^{40}Ar$, $_{19}^{40}K$, $_{20}^{40}Ca$

Модель атома Бора

Постулаты Бора

1. Электрон может вращаться вокруг ядра не по любым орбитам, а только по некоторым круговым орбитам. Эти орбиты получили название стационарных. Двигаясь по стационарной орбите, электрон не излучает электромагнитной энергии.

2. Излучение происходит при скачкообразном переходе электрона с одной стационарной орбиты на другую. При этом испускается или поглощается квант электромагнитного излучения, энергия которого равна разности энергий атома в конечном и исходном состояниях.



$$E_{nj} - E_{ni} = h\nu$$

Модель атома Бора

Достоинства модели

1. Бор вычислил уровни энергии электрона в атоме водорода.
   E_n = -13,6/n2, где n – номер орбиты.
   Энергия электрона возрастает по мере удаленности орбиты от ядра. Отрицательный знак энергии означает устойчивость системы, которая тем более устойчива, чем ниже ее энергия.

2. Бор вычислил радиусы «дозволенных орбит».
   r_1 = 0,529 Å, 1 Å (1 ангстрем) = 10^{-10} м.
   $r_n = 0{,}529n^2$.

3. Рассчитанные частоты из соотношения $\Delta E = h\nu$ совпали с данными полученными из атомных спектров атома водорода и некоторых других частиц с одним электроном, например, He+.

Модель атома Бора

Недостатки модели

1. Модель не может объяснить, почему происходит квантование и почему электрон на орбите не излучает энергию, как того требует электродинамика. Оба эти свойства были постулированы.

2. Теоретические и экспериментальные данные совпадали для частиц, содержащих один электрон, но теория не могла объяснить спектральные характеристики многоэлектронных атомов, даже для самого простого случая – атома Не.

3. Теорию оказалось невозможным применить для объяснения химической связи.

Квантово-механическая модель атома

Основные предпосылки

1. Энергия в микромире поглощается или излучается дискретно в виде квантов (М. Планк)

2. Все микрочастицы имеют двойственный характер.
Электрон подобно фотону можно рассматривать и как частицу и как волну.
Уравнение де Бройля $\lambda = h/mv$,
где m и v – масса и скорость частицы.

3. Принцип неопределенности (Гейзенберг).
Согласно этому соотношению невозможно одновременно точно определить местоположение частицы и ее импульс.
Соотношение неопределенностей имеет вид:
$\Delta x \cdot \Delta p \geq h/2\pi$, где Δx – неопределенность координаты,
Δp – неопределенность импульса.

Квантово-механическая модель атома

Уравнение Шредингера:

$$\Delta\Psi(x,y,z)+\frac{2m}{\hbar^2}(E-U)\Psi(x,y,z)=0$$

где $\Delta=\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}$ – оператор Лапласа,

Ψ – волновая функция (пси-функция),

m – масса частицы,

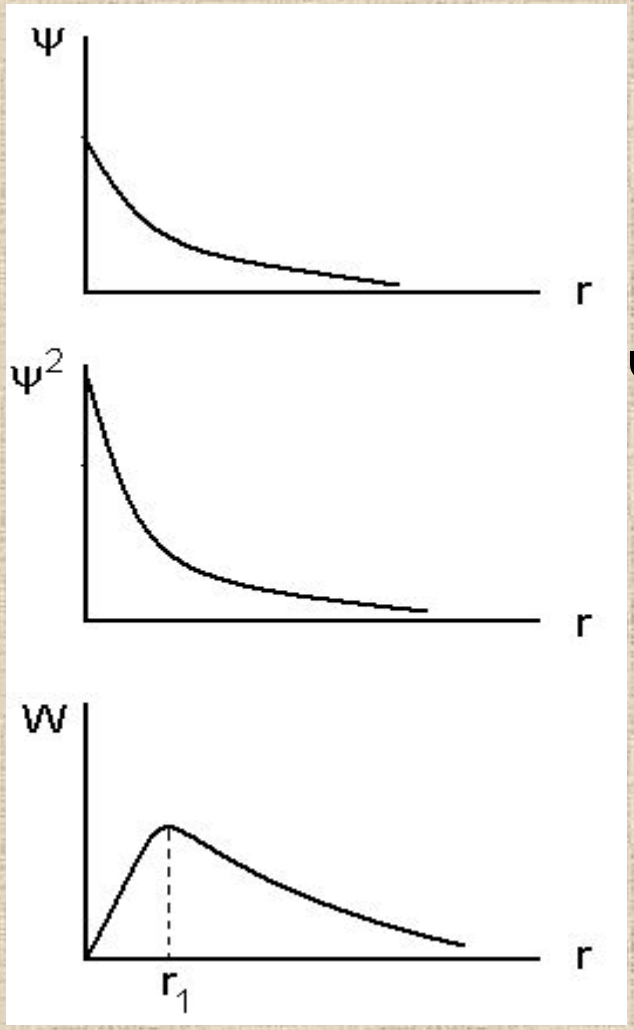
U – потенциальная энергия,

E – полная энергия,

$\hbar = h/2\pi$.

Квантово-механическая модель атома

Атом водорода



Ψ^2 – плотность вероятности обнаружения электрона вблизи заданной точки

$W = \Psi^2 4\pi r^2 dr$ – вероятность нахождения электрона в объеме dV (сферический слой толщиной dr на расстоянии r от ядра)

$r_1 = 0{,}529$ Å

Квантово-механическая модель атома

Выводы из решения уравнения Шредингера

1. Из решения уравнения Шредингера автоматически вытекает существование дискретных уровней энергии, то есть квантованность энергетических состояний оказывается следствием присущих электрону волновых свойств.

2. Электрон может находиться в любой части пространства, окружающего ядро, но вероятность его пребывания в той или иной части неодинакова. Область пространства, в которой с вероятностью 90–95 % можно обнаружить электрон получила название *атомной орбитали*.

3. Решение уравнения Шредингера приводит непосредственно к трем квантовым числам, которые характеризуют энергетическое состояние и поведение электрона в атоме.

Квантовые числа

n – главное квантовое число
l – орбитальное квантовое число
m_l – магнитное квантовое число
m_s – спиновое квантовое число.

Первые три квантовых числа (n, l, m_l) следуют из решения уравнения Шредингера и полностью описывают атомную орбиталь.

Энергетическое состояние электрона в атоме полностью описывается набором из четырех квантовых чисел

Квантовые числа

Главное квантовое число

Принимает целочисленные значения: $n = 1, 2, 3\ldots$.

Характеризует основной уровень энергии электрона и размер электронного облака.

В многоэлектронных атомах совокупность электронов с одинаковым значением главного квантового числа называется *электронным слоем*.

Главное квантовое число *n* (номер энергетического уровня)	1	2	3	4	5	6	…
Буквенное обозначение электронного слоя	K	L	M	N	O	P	…

Квантовые числа

Орбитальное квантовое число

принимеат целочисленные значения от 0 до (n – 1):

$l = 0, 1, \ldots, (n\text{-}1)$.

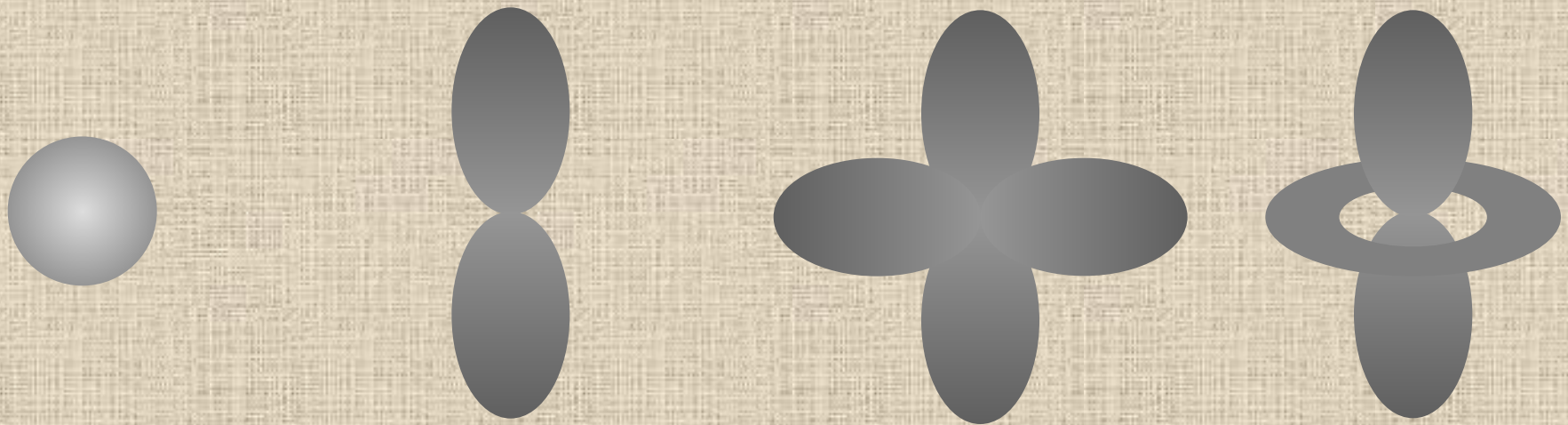
В многоэлектронных атомах совокупность электронов с одинаковым значением орбитального квантового числа называется *электронной оболочкой*.

Орбитальное квантовое число l	0	1	2	3	4	5	…
Буквенное обозначение подуровня	s	p	d	f	g	h	…

Квантовые числа

Орбитальное квантовое число

Определяет форму атомной орбитали



l=0
s-орбиталь

l=1
p-орбиталь

l=2
d-орбиталь

Квантовые числа

Магнитное квантовое число

Характеризует результат взаимодействия магнитного поля движущегося электрона с наложенным внешним магнитным полем

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

$$m_l = -l, \ldots, 0, \ldots, +l$$

Определяет дискретные возможные ориентации атомных орбиталей в пространстве.

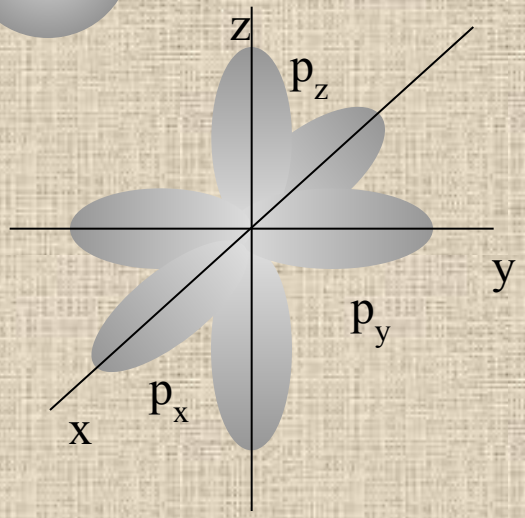
Число возможных значений m_l при данном значении l соответствует числу способов ориентации орбиталей в пространстве

Квантовые числа

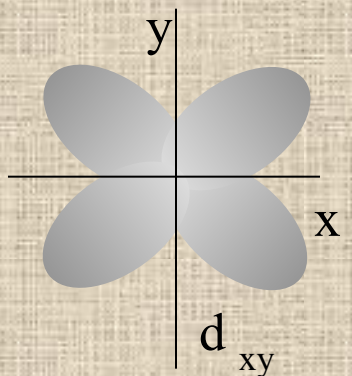
Магнитное квантовое число

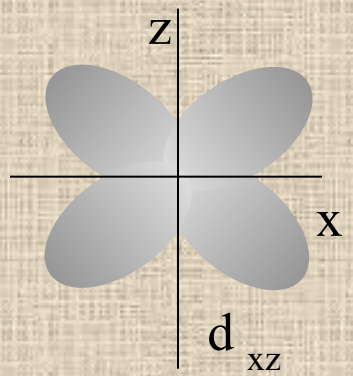
$l = 0,\ m_l = 0$

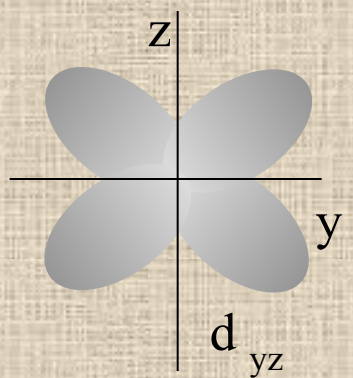
$l = 1,\ m_l = -1,\ 0,\ 1$

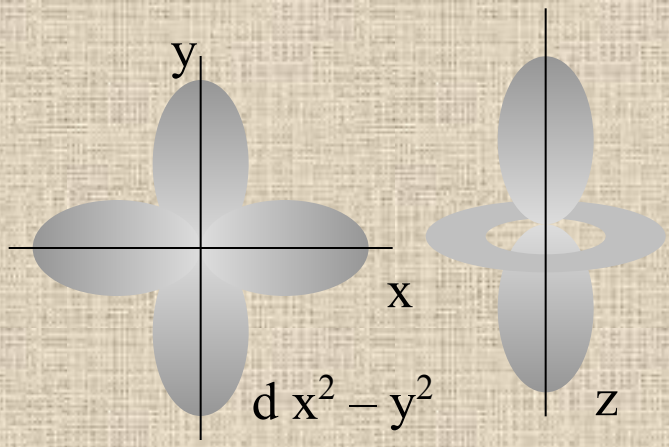


$l = 2,\ m_l = -2, -1,\ 0,\ 1,\ 2$









Квантовые числа

Спиновое квантовое число

Характеризует собственный момент количества движения электрона

$m_s = +1/2$ Если направление спина электрона совпадает с направлением орбитального магнитного момента

$m_s = -1/2$ Если противонаправлен

Строение многоэлектронных атомов

1. Принцип минимума энергии

Правило Клечковского: Увеличение энергии и соответственно заполнение орбиталей происходит в порядке возрастания суммы квантовых чисел ($n+l$), а при равной сумме ($n+l$) в порядке возрастания числа n.

2. Принцип Паули

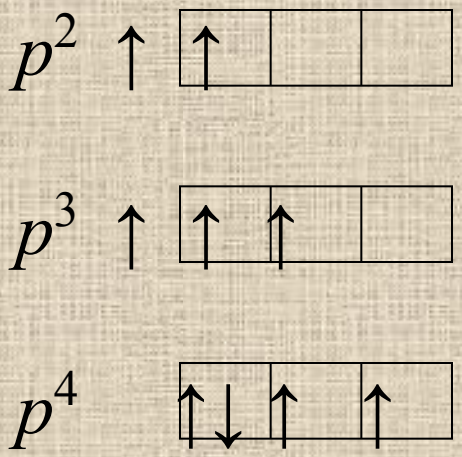
В атоме не может быть двух электронов с одинаковым набором всех четырех квантовых чисел

На одной атомной орбитали могут размещаться только два электрона, отличающиеся спиновыми характеристиками: ↑↓

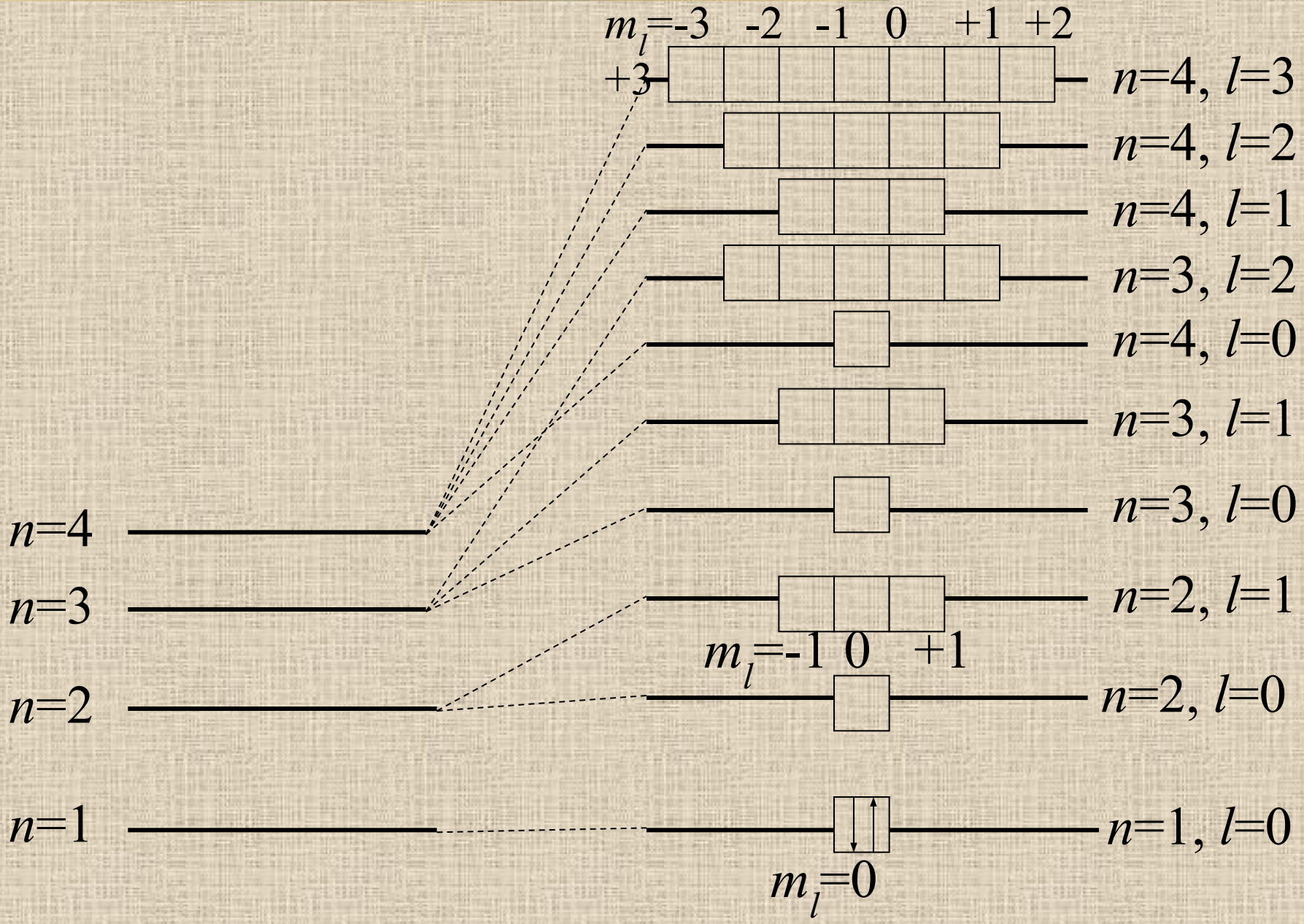
Строение многоэлектронных атомов

1. Правило Гунда

Электроны в пределах одного подуровня распределяются таким образом, чтобы их суммарный спиновый момент был максимален (стремятся остаться неспаренными)



Строение многоэлектронных атомов



Строение многоэлектронных атомов

I период

H $1s^1$
He $1s^2$

} s-элементы

II период

Li $1s^2 2s^1$
Be $1s^2 2s^2$

} s-элементы

B $1s^2 2s^2 2p^1$
C $1s^2 2s^2 2p^2$
……
Ne $1s^2 2s^2 2p^6$

} p-элементы

Строение многоэлектронных атомов

III период

Na $1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$

Mg $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2$

} s-элементы

Al $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^1$

……

Ar $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$

} p-элементы

Строение многоэлектронных атомов

IV период

K …..$4s^1$ } s-элементы

Ca …..$4s^2$

Sc ….$3s^2 3p^6 3d^1 4s^2$ } d-элементы

……

Cr ….$3s^2 3p^6 3d^5 4s^1$

Mn ….$3s^2 3p^6 3d^5 4s^2$

……

Cu ….$3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^1$

Zn ….$3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2$

Ga ….$3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^1 4p^1$ } p-элементы

……

Kr ….$3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^1 4p^6$

Строение многоэлектронных атомов

VI период

Cs ….$4d^{10}5s^25p^66s^1$
Ba ….$4d^{10}5s^25p^66s^2$ } s-элементы

La ….$4d^{10}5s^25p^65d^16s^2$ d-элемент

Ce ….$4d^{10}4f^25s^25p^65d^06s^2$
Pr ….$4d^{10}4f^35s^25p^65d^06s^2$
……
Gd ….$4d^{10}4f^75s^25p^65d^16s^2$
Tb …. $4d^{10}4f^95s^25p^65d^06s^2$
……
Lu ….$4d^{10}4f^{14}5s^25p^65d^16s^2$ } f-элементы

Hf ….$4d^{10}4f^{14}5s^25p^65d^26s^2$
……
Hg ……...$5d^{10}6s^2$ } d-элементы

Tl ……...$5d^{10}6s^26p^1$
……..
Rn …..…….$5d^{10}6s^26p^6$ } p-элементы

Строение многоэлектронных атомов

1. Каждый новый период начинается с заполнения нового слоя.
2. Каждый период начинается с *s*-элементов, они находятся в I, II группах, а заканчивается *p*-элементами, которые находятся в III – VIII группах (кроме 1 периода). Последний из *p*-элементов каждого периода – инертный газ с устойчивой восьмиэлектронной конфигурацией внешнего слоя ns^2p^6. Инертные газы характеризуются наивысшими энергиями ионизации.
3. *s*- и *p*- элементы образуют главные подгруппы ПСЭ (подгруппы А). *d*-элементы – побочные подгруппы (подгруппы Б)

Строение многоэлектронных атомов

4. У *s*- и *p*- элементов заполняется внешний слой. Число электронов на внешнем слое равно номеру группы.
5. У *d*-элементов заполняется *d*-подуровень предвнешнего слоя – …$(n\text{-}1)\,s^2p^6d^{1\div10}ns^2$.

- У *f*-элементов заполняется *f*-подуровень предпредвнешнего слоя – …$(n\text{-}2)s^2p^2d^{10}f^{2\div14}(n\text{-}1)s^2p^6d^{1(0)}ns^2$.
- Элементы VII все радиоактивны, начиная с Np, все изотопы элементов получены искусственным путем в ходе ядерных реакций.

Изменение свойств элементов в свете Периодического закона

Современная формулировка периодического закона: Свойства элементов, а так же состав и свойства их соединений находятся в периодической зависимости от заряда ядра.

С увеличением заряда ядра атомов наблюдается закономерное изменение в их электронной структуре.

⇩

Происходит закономерное изменение химических и тех физических свойств атомов элементов, которые зависят от электронного строения:

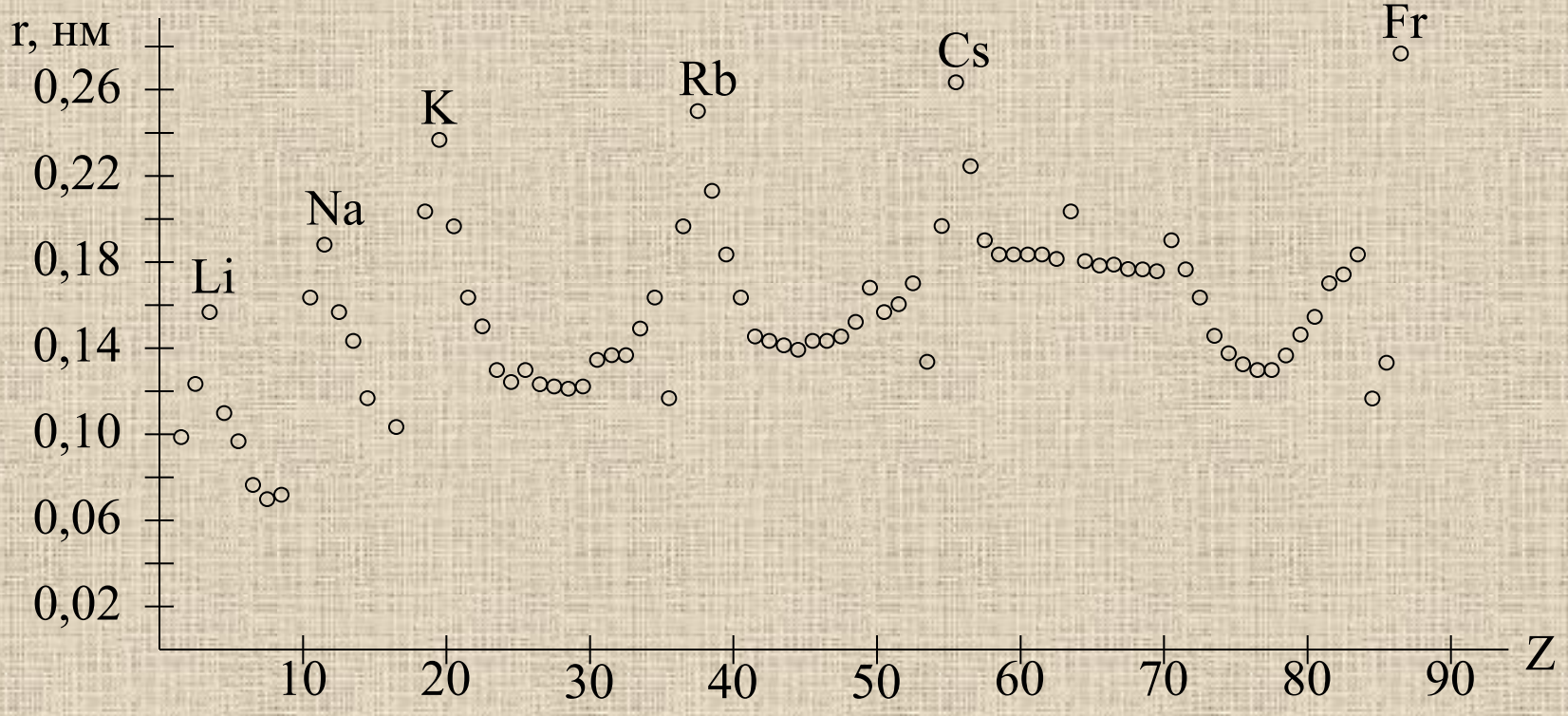
- радиус атома или иона
- энергия ионизации
- температуры плавления, кипения
- и др

Изменение свойств элементов в свете Периодического закона

Изменение атомных радиусов

Орбитальный радиус атома – расстояние от ядра до наиболее удаленного максимума электронной плотности.

Эффективный радиус – 1/2 межъядерного расстояния для рассматриваемого элемента в кристалле.



Изменение свойств элементов в свете Периодического закона

Изменение энергии ионизации

Энергия ионизации (*I*) – это та энергия, которую необходимо затратить, чтобы отделить электрон от атома (нейтрального, невозбужденного, газообразного) и увести его в бесконечность.

$Э - e \rightarrow Э^{+}$ I_1

$Э^{+} - e \rightarrow Э^{2+}$ I_2

……

$I_1 < I_2 < \ldots\ldots$

По периоду (слева направо) потенциал ионизации растет, что связано с уменьшением радиуса атомов.

В главных подгруппах потенциал уменьшается сверху вниз, что связано с возрастанием радиуса и эффектом экранирования ядра внутренними устойчивыми оболочками s^2p^6.

Изменение свойств элементов в свете Периодического закона

Изменение энергии сродства к электрону

Энергия сродства к электрону (Е) – это та энергия, которая выделяется при присоединении электрона к нейтральному невозбужденному атому с образованием отрицательно заряженного иона.

- По периоду (слева направо) сродство к электрону элементов возрастает.

- В главных подгруппах сродство к электрону уменьшается сверху вниз.

Изменение свойств элементов в свете Периодического закона

Изменение электроотрицательности

Электроотрицательность позволяет оценить способность атома данного элемента к оттягиванию на себя электронной плотности по сравнению с другими элементами соединения.

- Неметаллы – имеют наибольшие значения ОЭО (прочно удерживают свои электроны и легко принимают чужие)
- Металлы имеют малые значения ОЭО и легко отдают свои электроны

По периоду ЭО увеличивается
По главным подгруппам – уменьшается

Изменение свойств элементов в свете Периодического закона

Изменение химических свойств

F $2s^2 2p^5$

Cl $2s^2 2p^6 3s^2 3p^5$

Br $3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^5$

I $4s^2 4p^6 4d^{10} 5s^2 5p^5$

} полные аналоги

} электронные аналоги

Неполные электронные аналоги

Cl $2s^2 2p^6 3s^2 3p^5$ Cl (+7) $2s^2 2p^6$ Cl_2O_7 $HClO_4$ $KClO_4$

Mn $3s^2 3p^6 3d^5 4s^2$ Mn(+7) $3s^2 3p^6$ Mn_2O_7 $HMnO_4$ KMnO4

Изменение свойств элементов в свете Периодического закона

Изменение химических свойств

Нарастание неметаллических свойств →

Элемент	Na типичный металл	Mg	Al	Si	P	S	Cl типичный неметалл
Высший оксид:	Na_2O основн.	MgO основн.	Al_2O_3 амфотерн	SiO_2 кислотн.	P_2O_5 кислотн.	SO_3 кислотн.	Cl_2O_7 кислотн.
Гидрат оксида:	$NaOH$	$Mg(OH)_2\downarrow$	$Al(OH)_3\downarrow$	$H_2SiO_3\downarrow$	H_3PO_4	H_2SO_4	$HClO_4$