

Національний технічний університет
«Харківський політехнічний інститут»

Тема: Будова атома.

Викладач: Волобуєв Максим Миколайович
vmn2007@ukr.net

Кафедра загальної та неорганічної хімії,
НТУ «ХПІ»
Харків 2017

Частина I

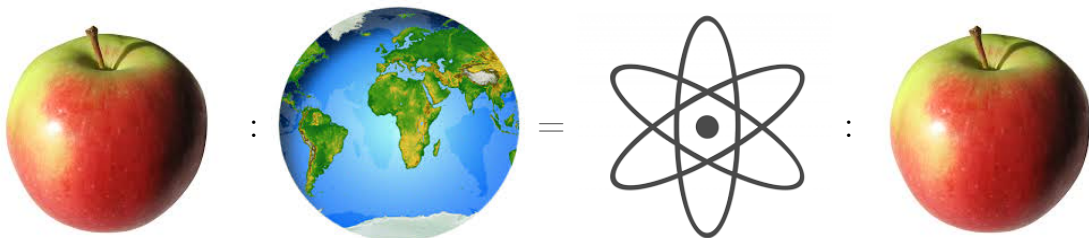
Вступ

1 Формулювання проблеми

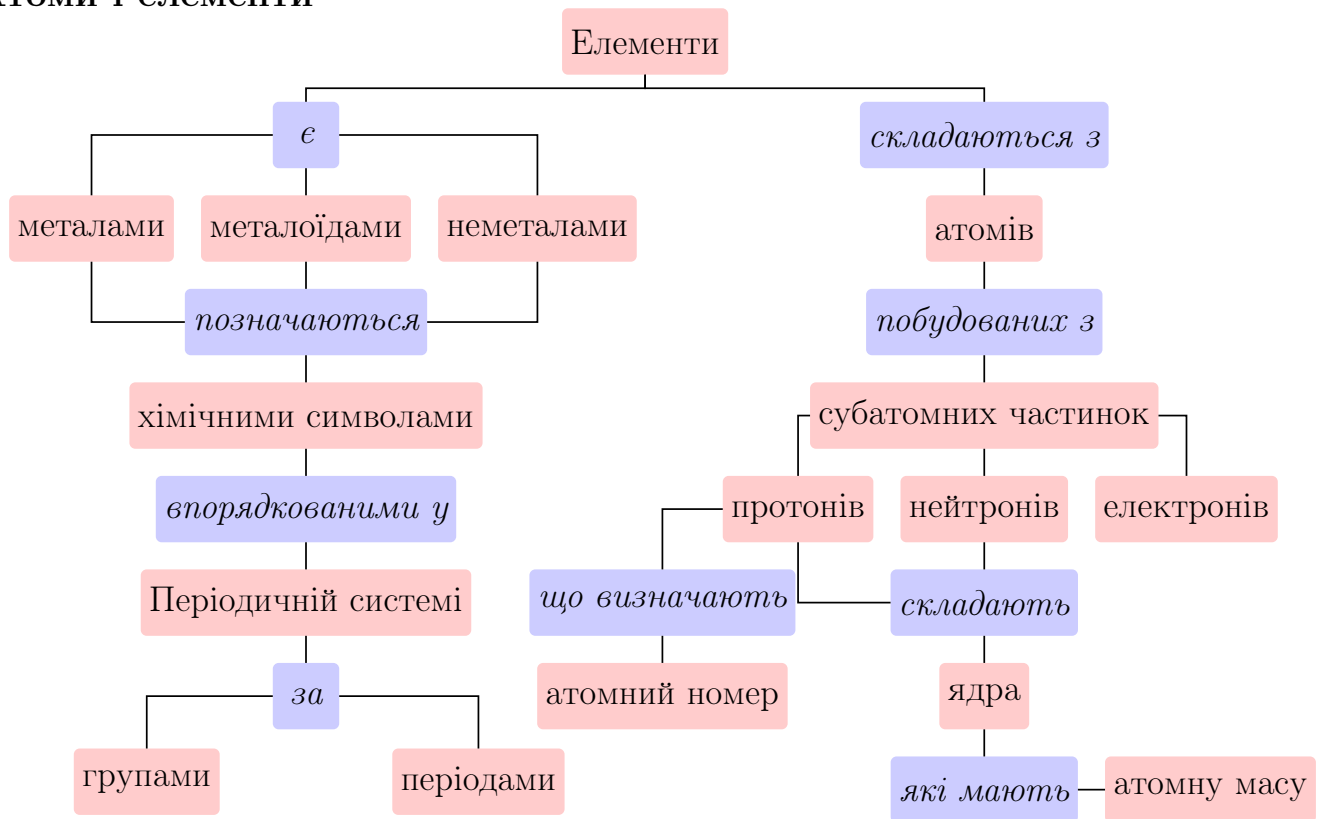
- Metали та неметали: різні властивості елементів
- Елементи проявляють різні властивості завдяки різниці у будові базових частинок – атомів
- Атом хімічно неподільний, але його будова визначає хімічну поведінку елемента
- Будова атома – фізична проблема, яка стосується хіміків
- Властивості мікросвіту сильно відрізняються від властивостей макросвіту!
- Об'єкти мікросвіту описуються *квантовою механікою*

Загальні визначення

- Склад атома: ядро + електрони
- Ядро: протони + нейтрони
- Елементарні частинки атома:
 - електрон: заряд -1 , маса дуже мала
 - протон: заряд $+1$, $m_p \approx 1$ а.о.м.
 - нейтрон: заряд 0 , $m_n \approx m_p \approx 1$ а.о.м.
- Приклад: $^{13}_6\text{C}$ – 6 протонів, 7 нейтронів, 6 електронів
- $r_{\text{атома}}(\text{H}) = 5 \cdot 10^{-11}$ м, $r_{\text{ядра}}(\text{H}) \approx 10^{-15}$ м
- 10^{-10} м = 1 Å – за аналогією з 1 а.о.м. $\approx 1,66 \cdot 10^{-27}$ кг
- Відносні розміри атома:



Атоми і елементи



2 Історичний огляд

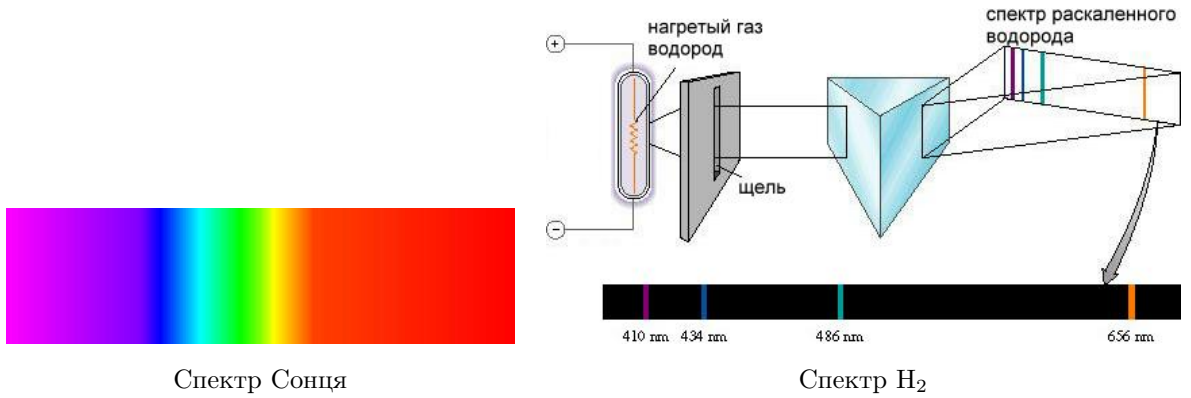
Еволюція уявлень про будову атома

Автор	Ідея	Модель
Томсон	Атом – позитивно заряджена субстанція с <i>вкрапленими</i> негативно зарядженими електронами	
Резерфорд, Бор	Навколо ядра по круговим орбітам <i>обертуються</i> електрони. Енергія електронів та розмір орбіт <i>квантовані</i>	
Шредингер	Навколо ядра <i>розподілені</i> електрони, точне положення яких невідоме	

3 Базові принципи

Квантова гіпотеза

- Порівнюючи випромінювання енергії різними джерелами можна побачити важливу різницю
- Спектр складної системи (Сонце) *безперервний*



- У спектрі атомів (і молекул!) присутні *смуги*
- Планк: енергія випромінюється (поглинається) *квантами*:
$$E = h\nu = \frac{hc}{\lambda}$$
 де ν – частота випромінювання, λ – довжина хвилі, $c \approx 10^8$ м/с – швидкість світла

Частинки та хвилі

- Фізика має справу з двома типами об'єктів: частинками і хвилями
- Частинки: маса m , швидкість v , координати x, y, z
- Хвилі: довжина хвилі λ , частота ν , фаза φ
- Особливості взаємодії:
 - закон збереження імпульсу – для частинок;
 - інтерференція, дифракція – для хвиль;
- Де-Бройль: *рух частинки* супроводжується розповсюдженням *хвилі*:

$$\lambda = \frac{h}{mv}$$

h – стала Планка $6,62 \cdot 10^{-34}$ Дж·с

- Для електрона $m_e = 9 \cdot 10^{-31}$ кг, $v_e = 10^6$ м/с:
 $\lambda \approx 10^{-10}$ м = 1 Å – можна порівняти з розмірами атома!

Принцип невизначеності Гейзенберга

- З якою точністю можна виміряти фізичну величину?
 - у *макросвіті* точність вимірювання обмежена *конструкцією приладу*;
 - у *мікросвіті* окрім цього точність обмежена *власне величиною!*
- Гейзенберг: неможливо одночасно точно визначити положення частинки та її швидкість

$$\Delta x \cdot \Delta p_x > \frac{h}{2\pi},$$

$\Delta x, \Delta p_x$ – похибка визначення координати та імпульсу
 $p_x = m \cdot v$ – імпульс частинки

- Для електрона: $\Delta x = 10^{-10}$ м, тоді $\Delta v = 10^6$ м/с
- Висновок: описати рух електрона в атомі за допомогою класичної механіки неможливо!

4 Рівняння Шредингера

Опис поведінки електрона в атомі

- Рівняння Ньютона для частинки:

$$x(t) = x_0 + v_0 t + \frac{Ft^2}{2m}$$

- Рівняння Гюйгенса для хвилі:

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} = -\frac{4\pi^2}{\lambda^2} \Psi$$

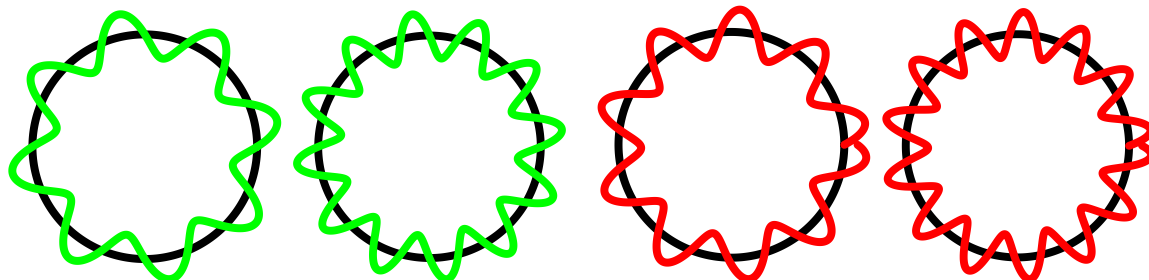
- Рівняння Шредингера для електрона в атомі:

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2} (E - U) = 0$$

- Стан електрона описується хвильовим рівнянням!
- Хвильова функція Ψ або *атомна орбіталь* (АО)
 - $\Psi^2 dV$ – імовірність знаходження електрона в dV
 - Електрон «десь» є $\int_0^\infty \Psi^2 dV = 1$
 - Електронна хмара: гранична поверхня, у межах якої ймовірність знаходження електрона більше 90% ($\int \Psi^2 dV = 0.9$)

Квантування станів електрона в атомі

- У теорії Бора стаціонарність деяких орбіт (квантування) постулюється, тобто просто приймається без доказів або пояснень
- З хвильового рівняння квантування виводиться природнім шляхом: хвильова функція електрона повинна бути безперервною



Допустимі рішення
(немає розривів функції)

Недопустимі рішення
(є розрив функції)

Частина II

Будова одноелектронного атома

5 Квантові числа

Квантові числа: визначення

- $\Psi = f(n, l, m, s)$ – хвильова функція параметризується
- Параметри – n, l, m, s – *квантові числа*
- n – *головне* квантове число
 - $n \in [1 \dots \infty)$ – ціле число
 - характеризує загальну енергію и розмір АО
 - $r_{\text{атома}}(n = 1) = 0,53 \text{ \AA}$, $r_{\text{атома}}(n = 42) = 9,3 \text{ мкм}$
- l – *орбітальне* (побічне) квантове число
 - $l \in [0 \dots (n - 1)]$ – ціле число
 - характеризує форму АО
- m – *магнітне* квантове число
 - $[-l \dots 0 \dots + l]$ – ціле число

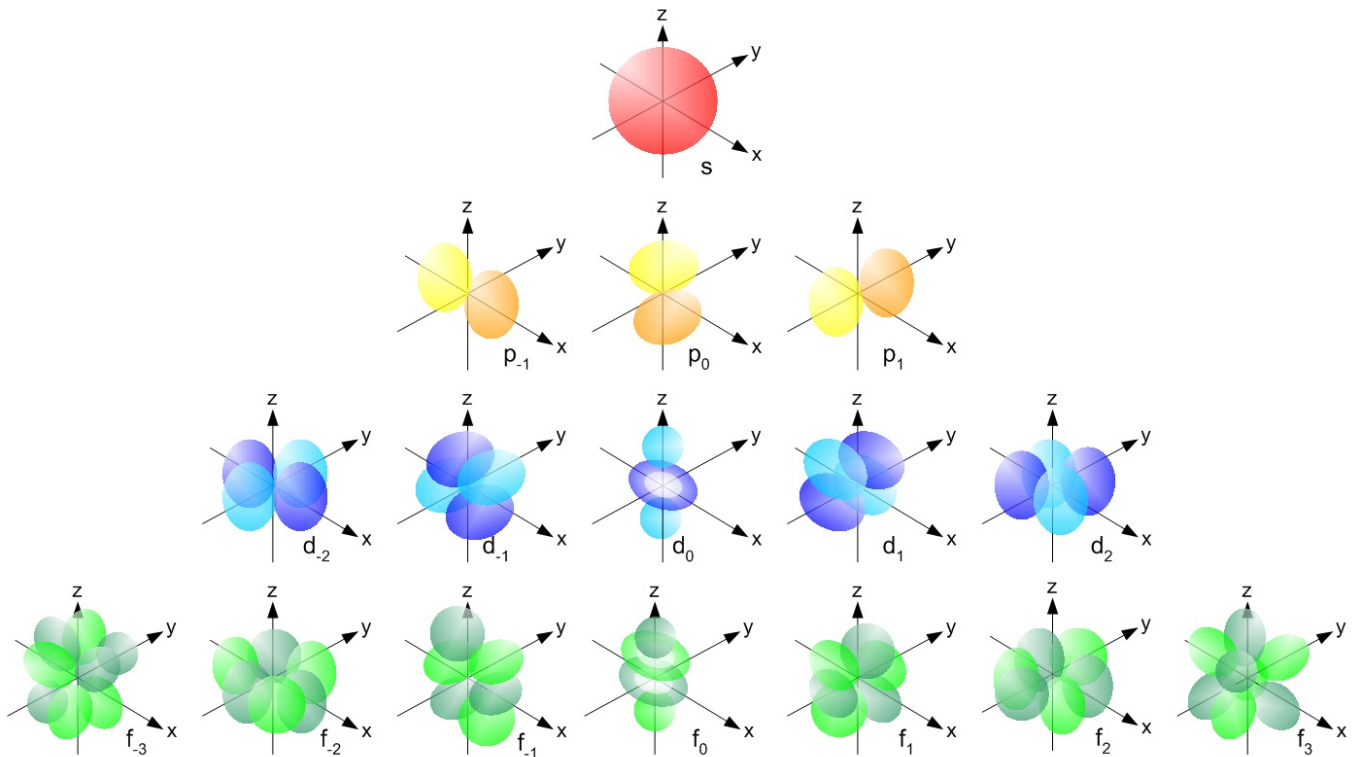
- характеризує орієнтацію АО у просторі
- s – *спінове* квантове число
 - $+1/2, -1/2$
 - характеризує власний стан електрона
- Енергетичні рівні та підрівні
 - *рівень*: АО з однаковим n
 - *підрівень*: АО з однаковими n і l
 - АО з однаковою енергією *вироджені*

l	Позначення	Форма АО	Кіл. АО
0	s	сфера	1
• 1	p	гантель	3
2	d	розетка	5
3	f	складна розетка	7

- Позначення АО: $2p_x, 4d_{xy}, 5f_{-1}$
 - $2, 4, 5$ – значення n
 - p, d, f – значення l
 - $x, xy, -1$ – інформація про m

6 Зображення АО

Граничні поверхні різних АО



Зображення взяті з [Вікіпедії](#)

Частина III

Будова багатоелектронного атома

7 Основні правила

Послідовність заповнення АО

- Принцип мінімуму енергії: електрон займає доступну АО з самою низькою енергією
- *Принцип Паулі*: два електрони не можуть мати однаковий набір n, l, m і s
 - N_e^{max} (рів.) = $2n^2$ – ємність рівня
 - N_e^{max} (під.) = $2(2l + 1)$ – ємність підрівня
 - пара електронів с однаковими n, l и m , але різними s , належить до однієї комірки
- Ємність деяких рівнів та підрівнів:

n	N_e^{max} (рів.)	l	N_e^{max} (під.)	N комір
1	2	0(<i>s</i>)	2	1
2	8	1(<i>p</i>)	6	3
3	18	2(<i>d</i>)	10	5
4	32	3(<i>f</i>)	14	7

Правило Клечковського і електроні формули

- Правило Клечковського: *сума $n + l$ важливіша за n*

- Реалізація правила Клечковського

$$1s < 2s < 2p < 3s < 3p < 4s < 3d < 4p < 5s < 4d <$$

$$5p < 6s < 4f < 5d < 6p < 7s < \dots$$

підрів.	1 <i>s</i>	2 <i>s</i>	2 <i>p</i>	3 <i>s</i>	3 <i>p</i>	4 <i>s</i>	3 <i>d</i>
$n + l$	1+0	2+0	2+1	3+0	3+1	4+0	3+2
N_e^{max}	2	2	6	2	6	2	10
підрів.	4 <i>p</i>	5 <i>s</i>	4 <i>d</i>	5 <i>p</i>	6 <i>s</i>	4 <i>f</i>	5 <i>d</i>
$n + l$	4+1	5+0	4+2	5+1	6+0	4+3	5+2
N_e^{max}	6	2	10	6	2	14	10

- Приклад: ${}_5\text{V} : 1s^2 2s^2 2p^1$
- Приклад: ${}_{26}\text{Fe} : 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^6 \rightarrow 3d^6 4s^2$
- 4 сімейства елементів: *s*, *p*, *d*, *f*. Fe – *d*-сімейство

Побудова електроннографічних формул

- Іноді корисні *електроннографічні формули*:

– одна комірка – місце для пари електронів

– електрони позначаються стрілками:

* \uparrow – спин позитивний ($s = +1/2$)

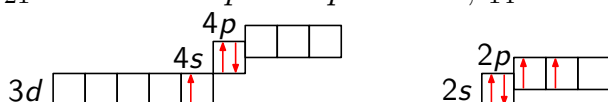
* \downarrow – спин негативний ($s = -1/2$)

- Правило Хунда (Hund): *спин електронів переважно однаковий*



- Хімічно значущі *валентні електрони*

- ${}_{21}\text{Sc} : 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^1$, ${}_{14}\text{Si} : 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^2$



- Валентність Sc: 0, 2, 3 Валентність Si: 2, 4

8 Особливості електронних формул

- Загальне правило: підвищеною стійкістю характеризуються повністю та наполовину заповнені підрівні
- Тому атоми у сполуках приймають або віддають електрони:
 - метали віддають електрони – утворюються катіони
 - неметали утворюють аніони
- **Ізоелектронні** частинки містять однакову кількість електронів:

Елемент	Формула	Іон	Формула іону	Благородний газ
Ca	$3s^2 3p^6 4s^2$	Ca^{2+}	$3s^2 3p^6 4s^0$	Ar ($3s^2 3p^6$)
F	$2s^2 2p^5$	F^-	$2s^2 2p^6$	Ne ($2s^2 2p^6$)

Частина IV

Властивості елементів

9 Періодична система

- Періодичний закон (1869 г.)
- Періодична система елементів (сучасний вигляд)

1 2 3 4 5 6 7 8 9 10 11 12 13 14 15 16 17 18

[H]																H	He
Li	Be											B	C	N	O	F	Ne
Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
Cs	Ba	La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
Fr	Ra	Ac															

Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu
Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	№	Lr

- Періодична система елементів (застарілий вигляд) містить головні та побічні підгрупи

	1	2	3	4	5	6	7		8	
[H]								H		He
Li	Be	B	C	N	O	F			Ne	
Na	Mg	Al	Si	P	S	Cl			Ar	
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	
Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br			Kr	
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	
Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I			Xe	
Cs	Ba	La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	
Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At			Rn	
Fr	Ra	Ac								

Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu
Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	№	Lr

10 Властивості елементів

- Енергія іонізації (I , кДж/моль) або потенціал іонізації (I , eV) – енергія відриву електрона від атома
- Спорідненість атома до електрона (E_e , кДж/моль) – енергія приєднання електрона до атома
- Електронегативність (ЕН, χ) характеризує здатність елемента відтягувати на себе електрони інших атомів. Умовна величина, наприклад $\chi = (I + E_e)/2$.

