Строение атома и Периодический закон

В.В.Загорский

Лекция курса

«Общая и неорганическая химия»

для 11-х классов СУНЦ

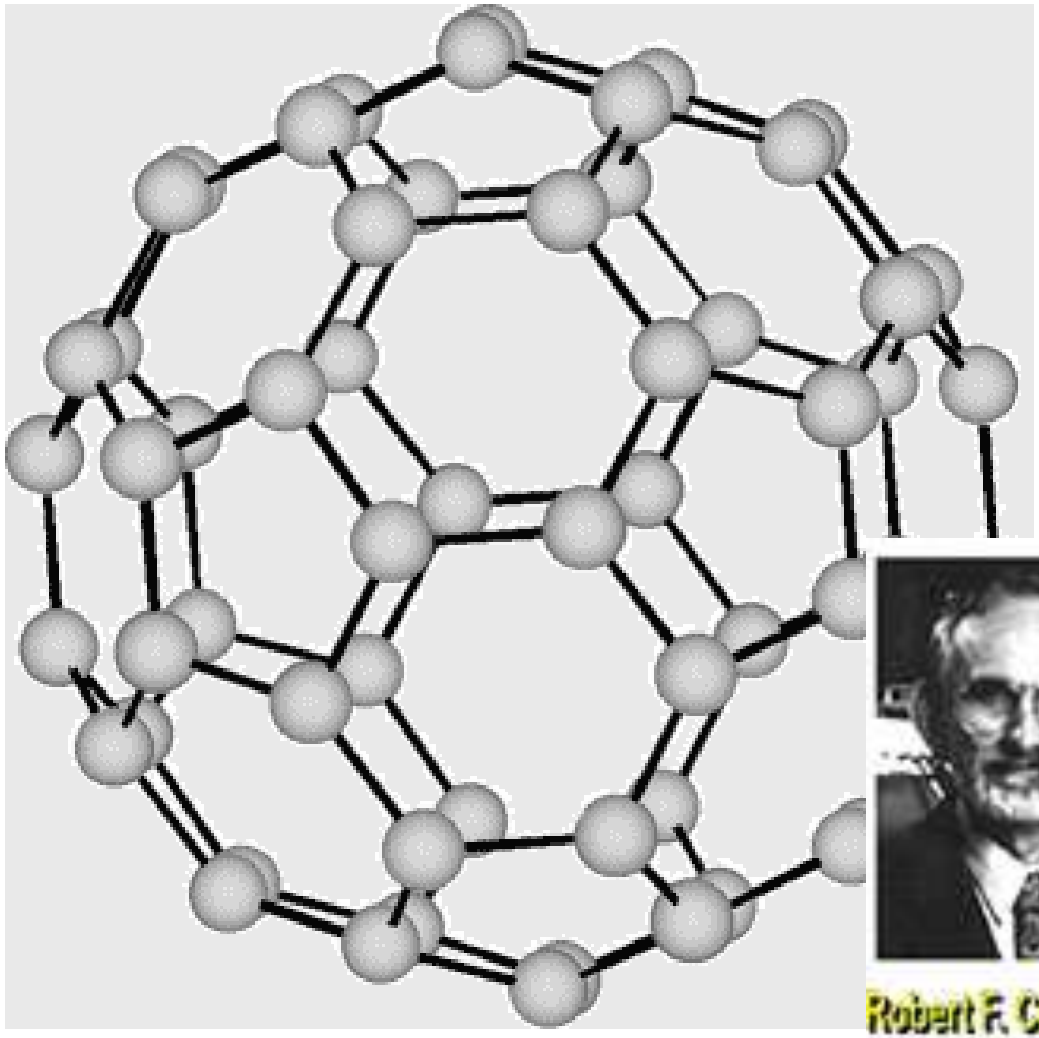
Современная наука –
способ познания реального мира, включающего в себя как ощущаемую органами чувств человека реальность, так и ***реальность невидимую***, способ познания, основанный на построении ***проверяемых моделей*** этой реальности"

Время открытий

- 1859 – спектроскоп
- 1869 – Периодический закон
- 1873 – электродинамика
- 1895 – лучи Рентгена
- 1896 – радиоактивность
- 1897 – электрон
- 1908 – строение атома

"Химики, по-моему, страдают особой формой "шизофрении". В самом деле, их мышление – это причудливая смесь самых абстрактных и совсем наглядных представлений. Они знают о тонких квантово-механических закономерностях, определяющих свойства молекул, которые, в свою очередь, ответственны за все многообразие окружающего нас мира. Эта взаимосвязь микро- и макромира остается скрытой от ученых других специальностей. Кроме того, никто не сделал так много для улучшения условий жизни людей, как химики, но их заслуги в должной мере не оценены".

Гарольд Крото (Нобелевская премия 1996 г. за фуллерены)



Robert F. Curl Jr.

Richard E. Smalley

Sir. Harold W. Kroto

Вещество – вид материи, которая обладает массой покоя. Состоит из элементарных частиц: электронов, протонов, нейтронов, мезонов и др.

Химия изучает главным образом вещество, организованное в атомы, молекулы, ионы и радикалы. Такие вещества принято подразделять на простые и сложные (хим. соединения).

Атом
(от греч. atomos – неделимый), наименьшая частица химического элемента, носитель его свойств.

Элементы химические, совокупности атомов с определенным зарядом ядра Z.

Д.И.Менделеев*:

"Родилось атомное представление о веществе еще в древности и до последнего времени (1895) борется с динамическим представлением, считающим вещество только проявлением сил."

"На современный атомизм, по моему мнению, прежде всего должно смотреть, как на прием или способ, удобоприменимый при получении весомого вещества природы."

* Менделеев Д. Основы Химии 6-е издание С-Пб, тип. В.Демакова, 1895. – 780 с., с.155

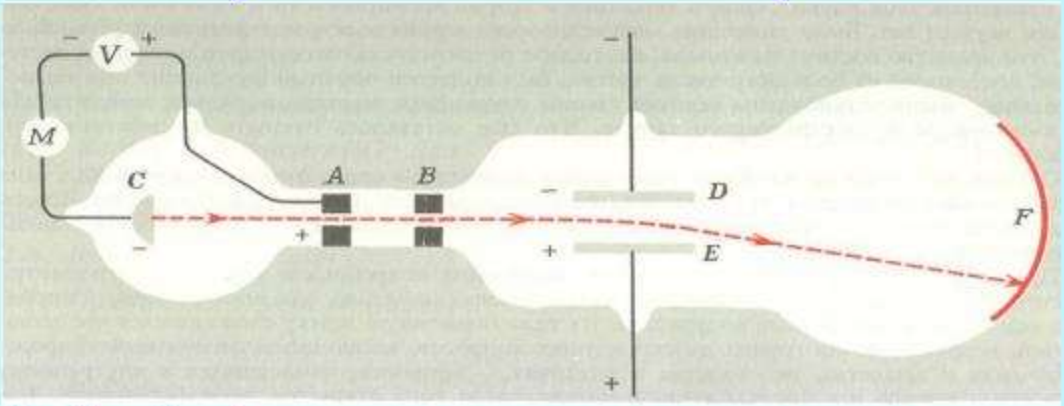
Д.И.Менделеев*:
«Итак, атомное учение, допускающее лишь конечную механическую делимость, должно быть, до сих пор по крайней мере, принимаемо только, как прием, подобный тому приему, который употребляет математик, когда сплошную кривую линию разбивает на множество прямых линий. В атомах – есть простота представления, но нет необходимости к ним прибегать.»

* Менделеев Д. Основы Химии 6-е издание С-Пб, тип. В.Демакова, 1895. – 780 с., с.158

Атомы с одинаковым количеством протонов и электронов, но с разным количеством нейтронов называют **изотопами** данного элемента. Например, у водорода есть три изотопа — протий, дейтерий и тритий. Их атомы имеют один протон и один электрон, но, соответственно, 0, 1 и 2 нейтрона. При обозначении изотопа перед символом химического элемента верхним индексом указывают массовое число, а нижним — атомный номер, например, протий $^{1}_{1}\mathbf{H}$, дейтерий $^{2}_{1}\mathbf{H}$.

Единицей атомной массы является 1/12 массы нейтрального атома наиболее распространённого в природе изотопа углерода, ядро которого содержит 6 протонов и 6 нейтронов.

Открытие электрона



Джозеф Джон Томсон (1856-1940 гг.)

В 1897 г. Дж. Томсон, изучая характеристики газового разряда, показал, что катодные лучи, образующиеся в разрядной трубке, состоят из отрицательно заряженных частиц вещества. Отклоняя катодные лучи в электрических и магнитных полях, он определил отношение заряда к массе этих частиц.

$$\frac{e}{m}=6{,}7\times10^{17}\ \text{ед. СГСЭ/г};$$

(современное значение: $5{,}27\cdot10^{17}$ ед. СГСЭ/г)

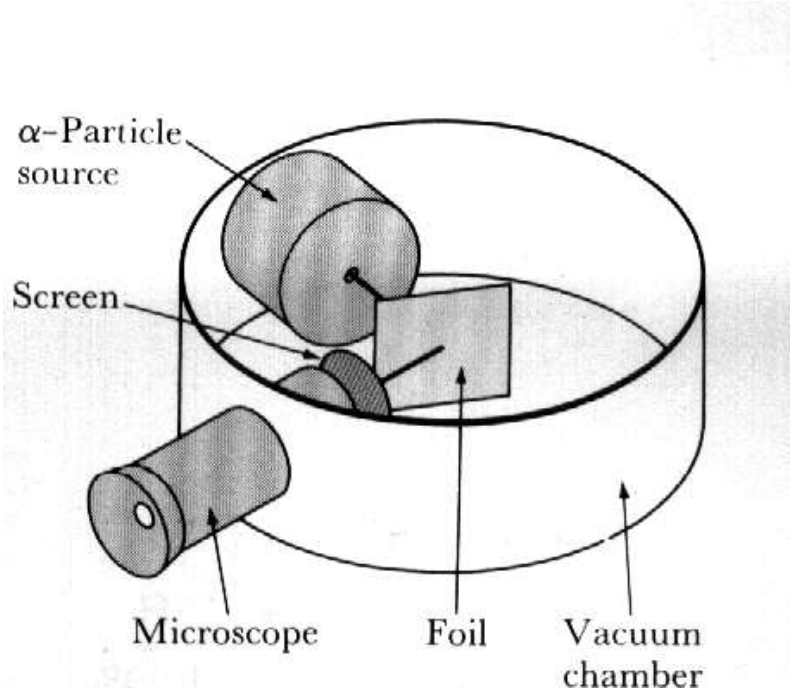
Он показал, что катодные лучи представляют собой поток более лёгких, чем атомы, частиц и не зависят от состава газа. Эти частицы были названы электронами. Открытие электрона и установление того факта, что все атомы содержат электроны, явилось важной информацией о внутреннем строении атома.

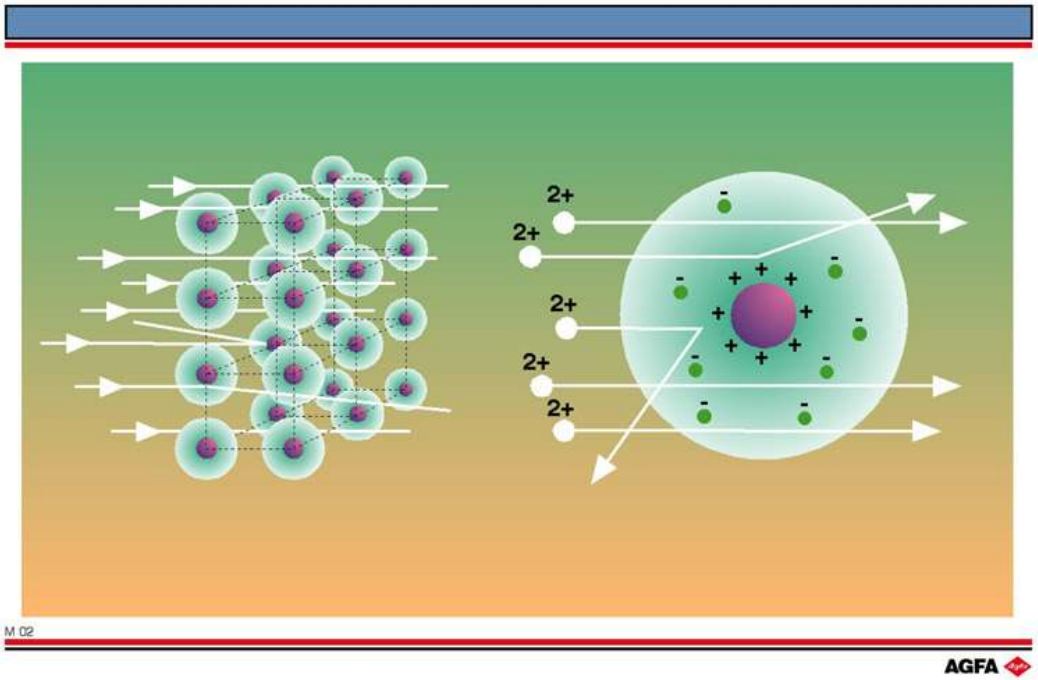
Мимо открытия…

В 1897 году Кауфман, одновременно с Дж. Дж. Томсоном, измерил отношение заряд/масса для катодных лучей. Результаты у обоих экспериментаторов были сходны, однако Кауфман, в отличие от Томсона, был осторожен в своих выводах, и слава первооткрывателя электрона досталась Томсону.

Эксперимент Резерфорда (1908-1911)

Э.Резерфорд (1871-1937), Ганс Вильгельм Гейгер (1882-1945)
и Эрнест Марсден (1889-1970)

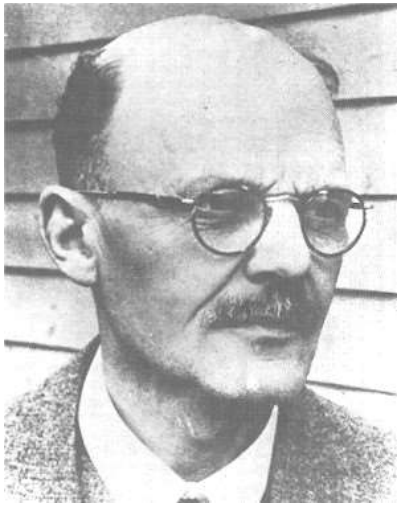




Atkins P.W. General chemistry, Oxford, Sci. Amer. Books, 1989

CD: IUPAC DIDAC project - 2003 Agfa-Gevaert N.V.
http://www.iupac.org/didac/index.html

Эрнест **Резерфорд** (1871-1937)
Нобелевская премия 1908 г.



Ганс Вильгельм Гейгер
(1882-1945)

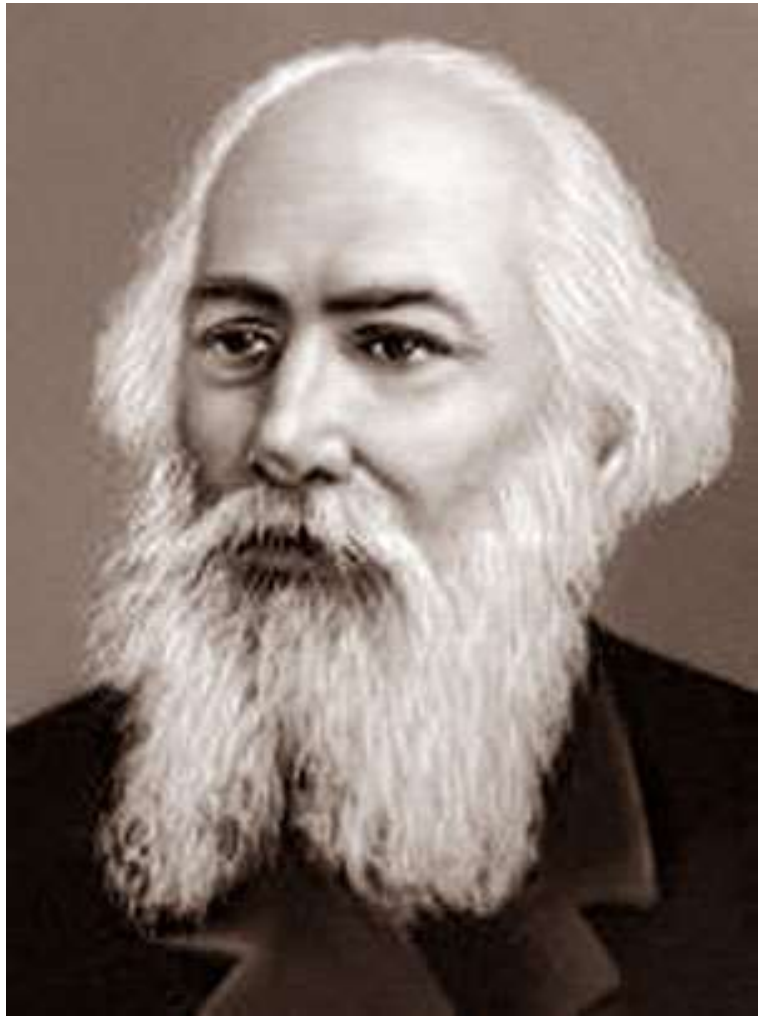
Эрнест Марсден
(1889-1970)

Бекетов Николай Николаевич (1827-1911)

«Динамическая сторона химических явлений», 1879 г.

«Мы должны и самый химический процесс подвести под общие физико-динамические явления – то есть, иначе говоря, самую химическую энергию рассматривать как известное количество движения, присущее элементам.

Допустив это раз, мы должны будем сделать предположение, что **атомы всех элементов находятся в постоянном необыкновенно быстром движении и что самые атомы и частицы, в виде которых они существуют, представляют подвижные системы наподобие нашей солнечной системы**.»

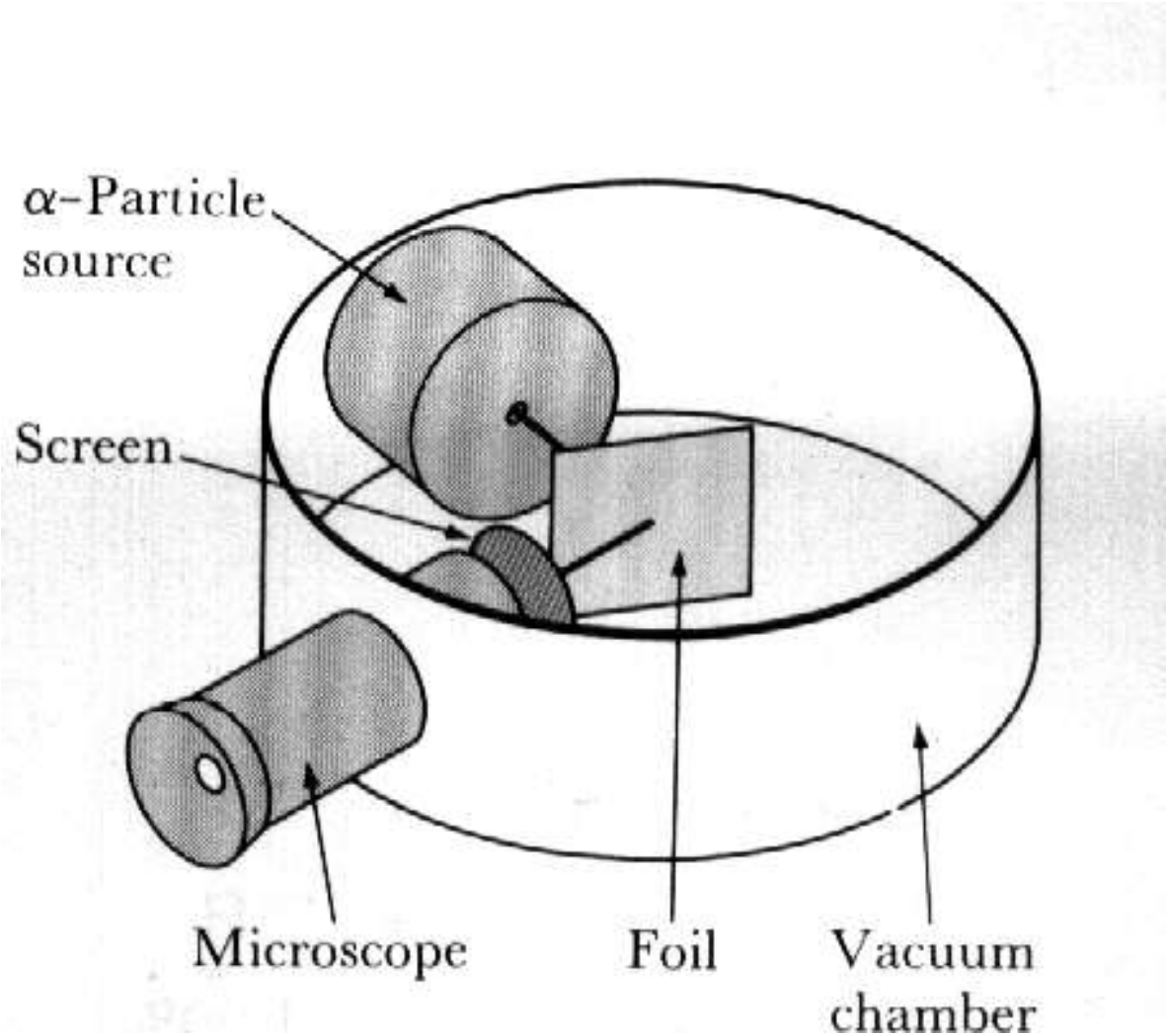


НАГАОКА (Nagaoka Xantaro), Хантаро

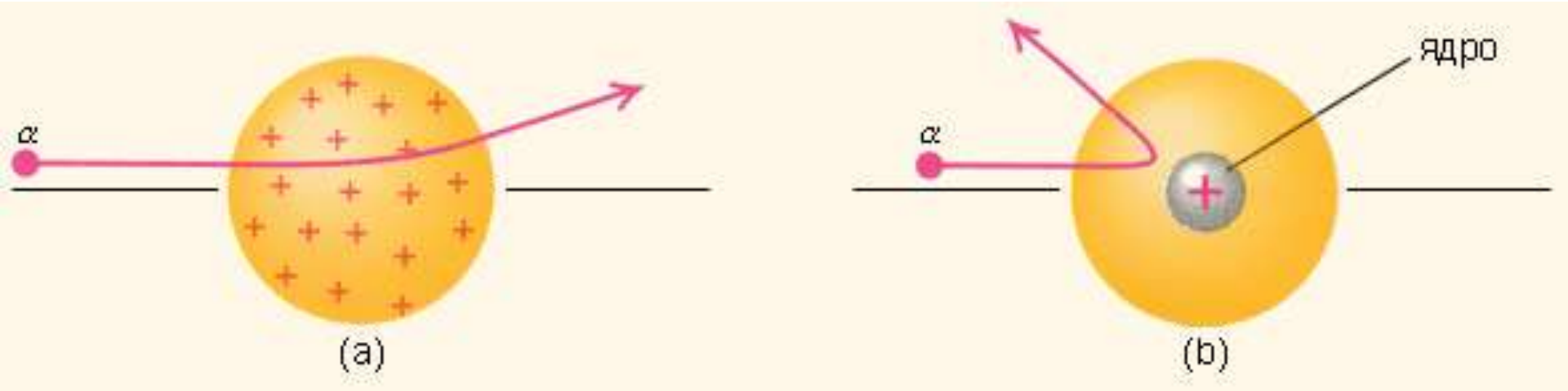
1865 г. –1950 г.

Барельефный портрет Хантаро Нагаока
в Музее науки (Токио)

Схема экспериментов Резерфорда
(Эрнест Резерфорд, Ганс Гейгер, Эрнест Марсден, 1908-1911)



Если бы у Э.Резерфорда был компьютер…



достоверность эксперимента около **1**

достоверность эксперимента составляет $\mathbf{3*10^{-2174}}$

Три уровня научной модели мира (пример)

2. Идеализированные образы (физические модели)

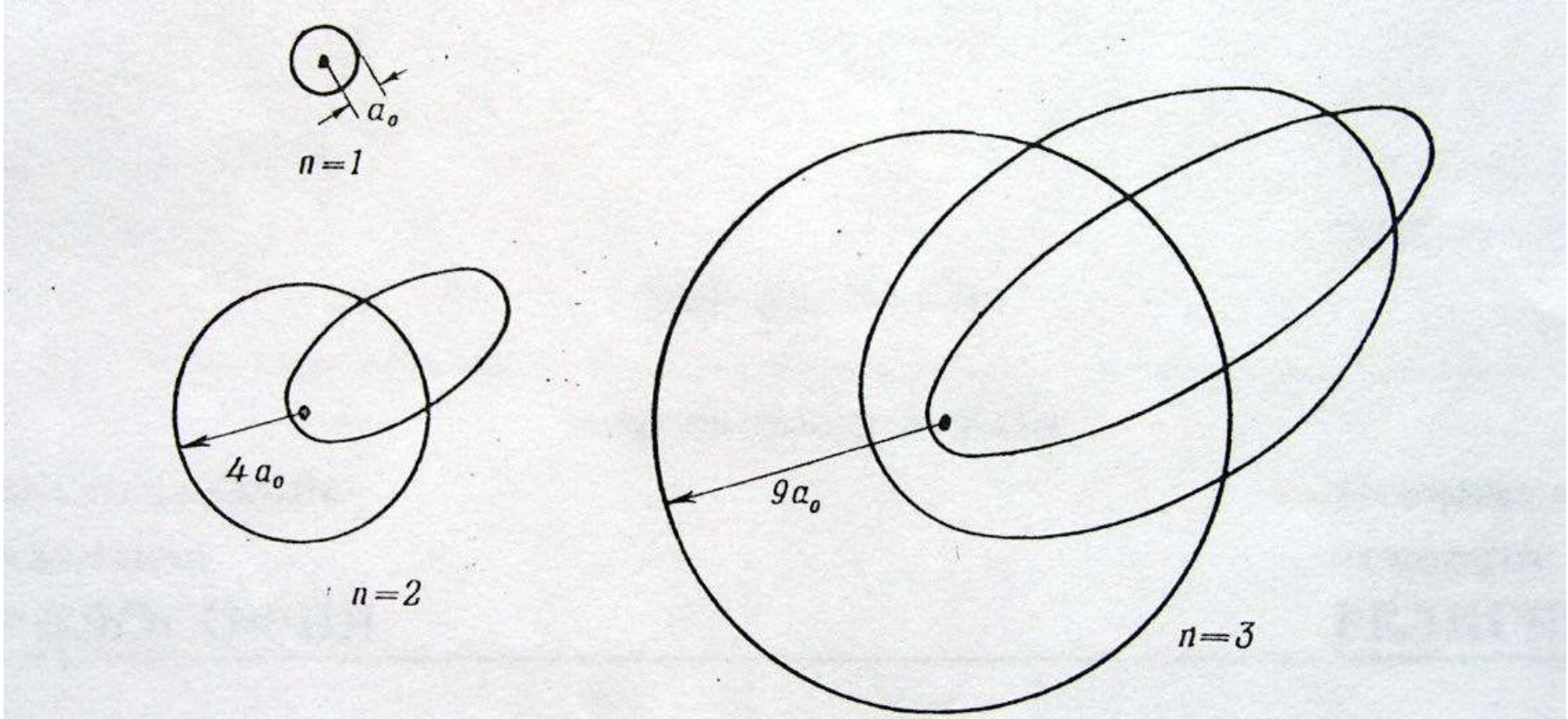


Рис. 75. Орбиты Бора для электрона в атоме водорода. Эти круговые и эллиптические орбиты рассматриваются в теории Бора.

Создатели оболочечной модели атома (1913-1914)

Нильс Хенрик Давид **Бор** (1885-1962).
Нобелевская премия по физике 1922 г.

Генри Гвин Джефрис **Мозли** (1887-1915)
Погиб на Первой мировой войне

Три уровня научной модели мира (пример)
3. Математическое описание (формулы и уравнения)

Теория Н.Бора для атома водорода (1913 г.)

$a_o = h^2/(4\pi^2 me^2) = 0{,}053$ нм

- радиус атома Н в основном состоянии

$E_n = -(2\pi^2 me^4)/(n^2 h^2)$

- энергия атома в состоянии **n**

$1/\lambda = [(2\pi^2 me^4)/(ch^3)][1/n_1^2 - 1/n_2^2]$

- уравнение длин волн в спектре водорода

Источник: Лайнус Полинг Общая химия, М., "Мир", 1964

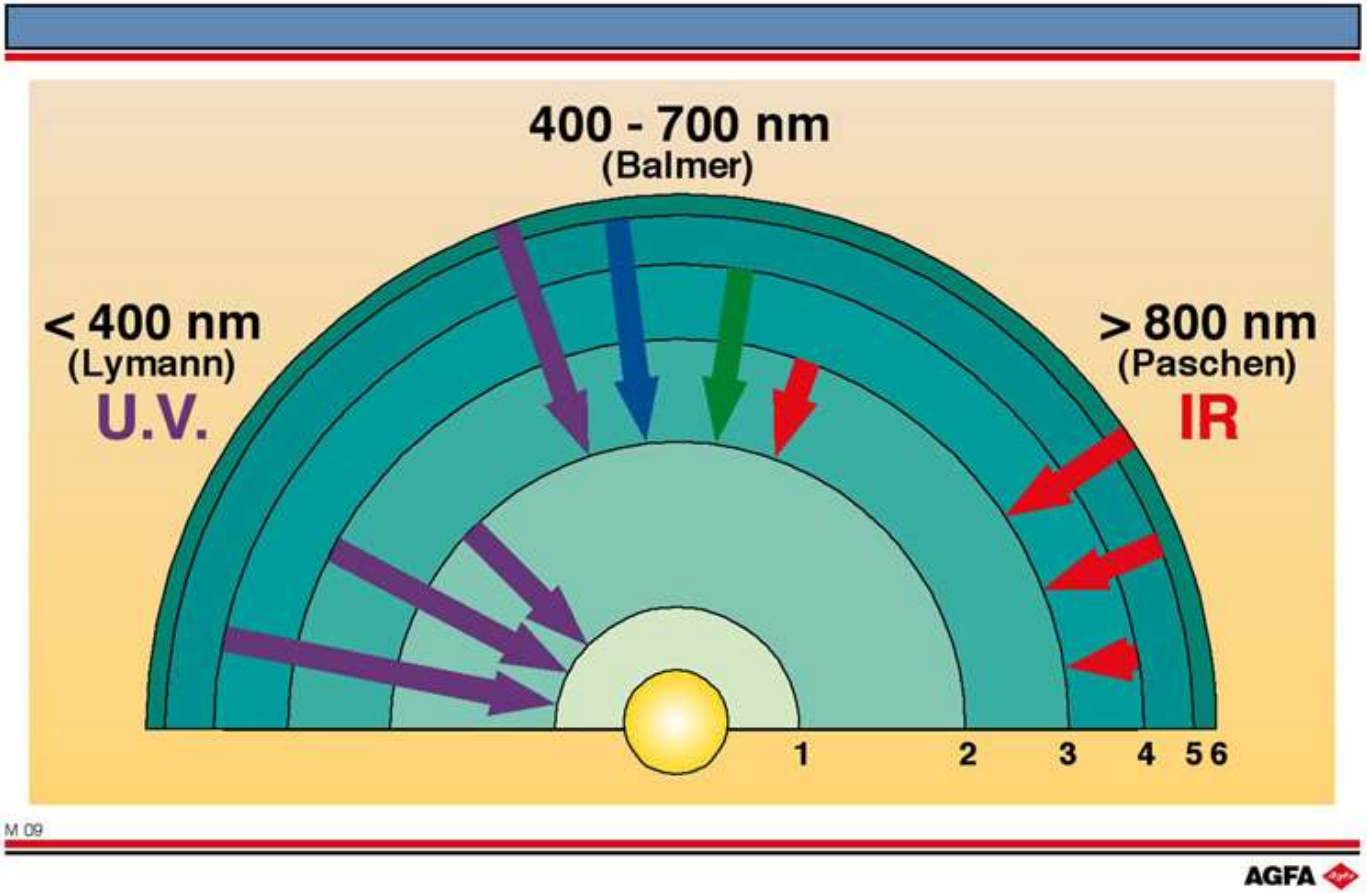
$$\nu_{kn} = R\left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{k^2}\right) -$$

формула Бальмера–Ридберга

$k = n + 1,\ n + 2,\ n + 3,\ \ldots$

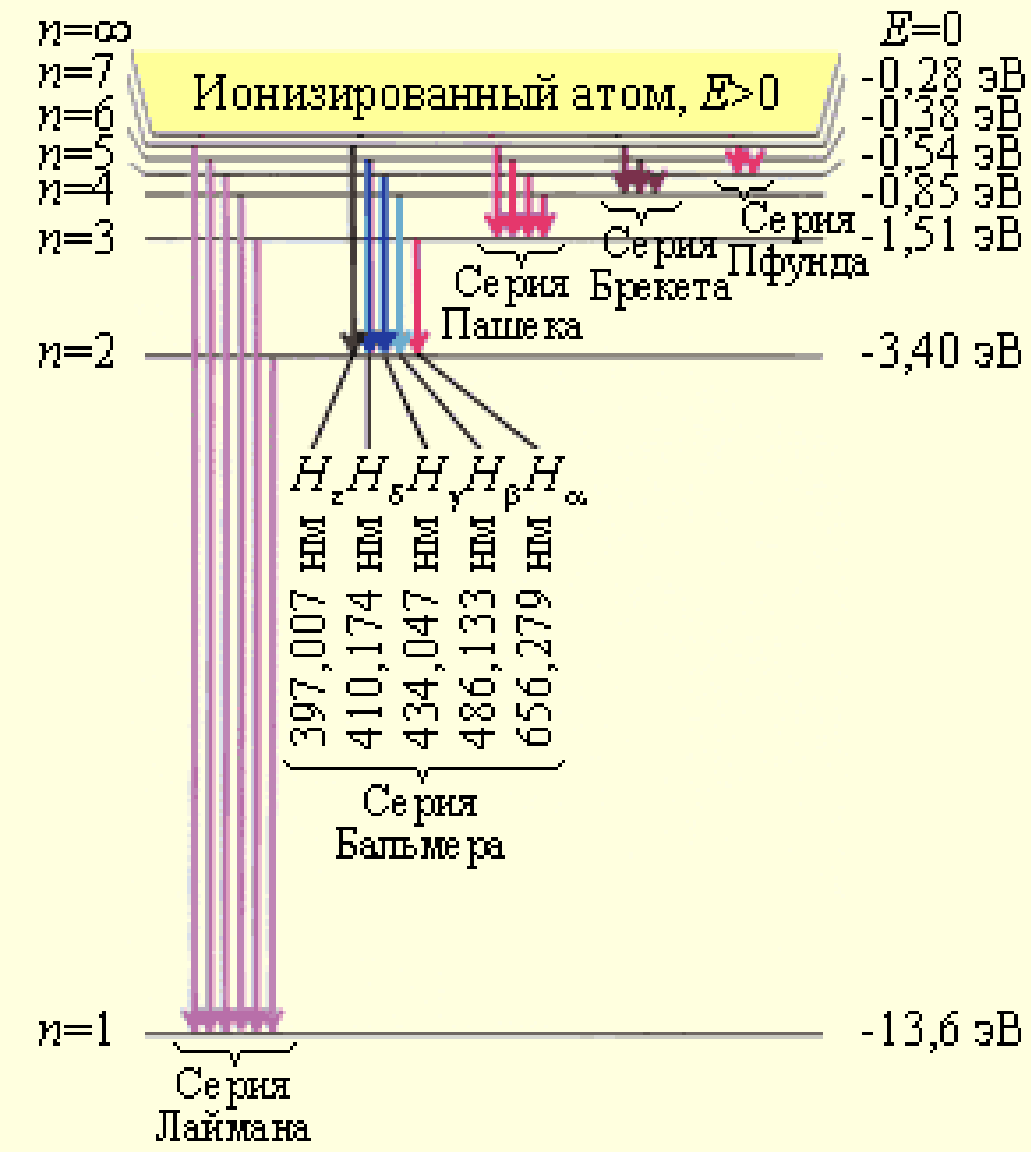
Спектр атома водорода (1)

H

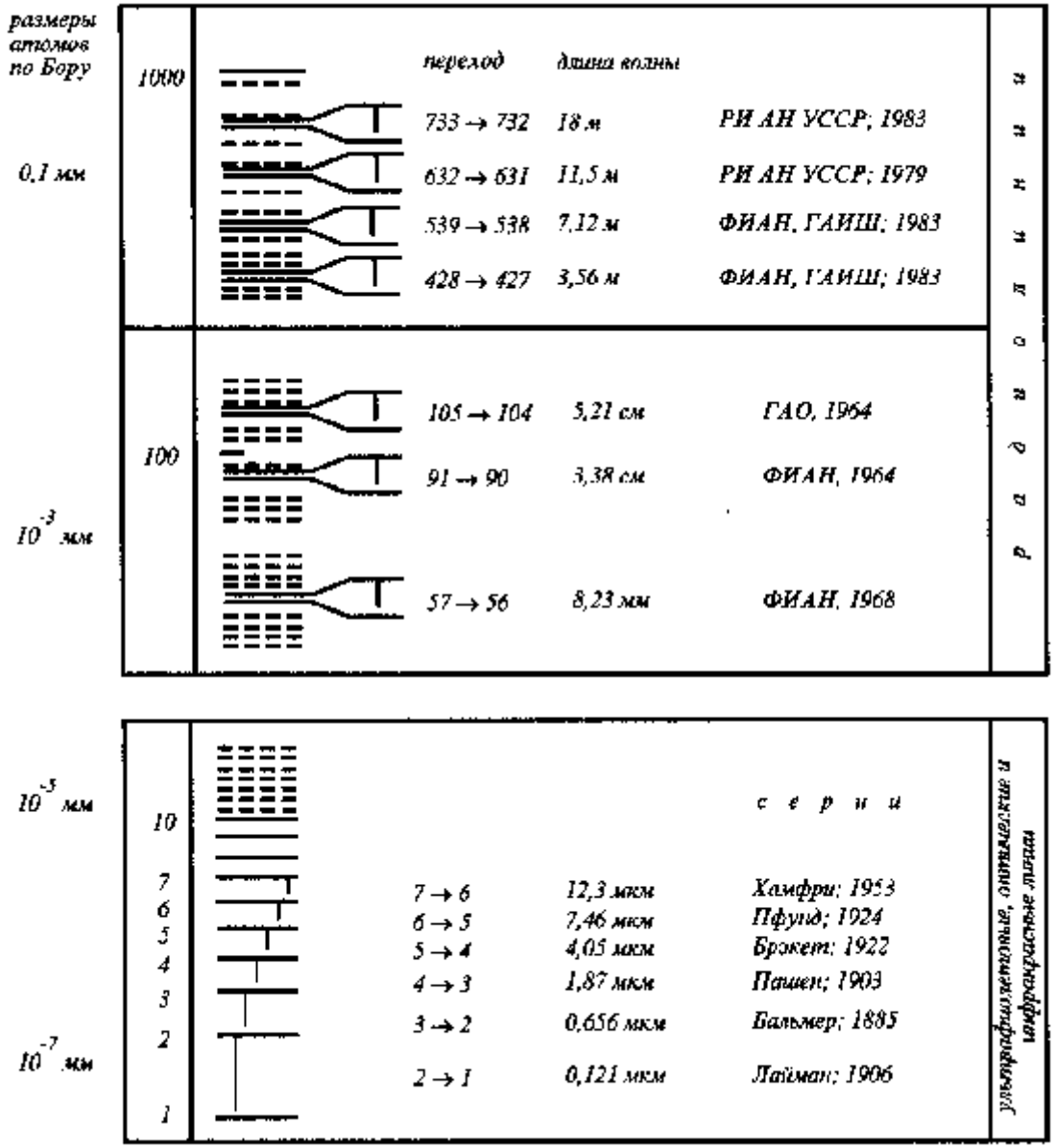


CD: IUPAC DIDAC project - 2003 Agfa-Gevaert N.V.
http://www.iupac.org/didac/index.html

Спектр атома водорода (2)



Сверхкрупные атомы водорода



Гершензон Е.М. Исследование одиночных атомов
Соросовский Образовательный журнал , 1995, №1, с.116-123

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).

Уравнение Шредингера для атома водорода

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e}\nabla^2\psi-\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\cdot\frac{e^2}{r}\psi=E\psi.$$

Оператор Лапласа в сферических координатах

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial f}{\partial r}\right)+\frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial f}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2 f}{\partial\phi^2}$$

Волновая функция

$$\psi = R(r)Y_{lm}(\theta,\varphi) = R(r)\Theta(\theta)\Phi(\varphi)$$

Y –сферические функции

P – функции Лежандра

L – присоединенные полиномы Лягерра

$$\Phi(\varphi)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{\pm im_l\varphi}$$

$$\Theta(\theta)=const\cdot P_l^{|m|}(\cos\theta)$$

$$R(r)=const\cdot\left(\frac{2Zr}{na_0}\right)^l L_{n+l}^{2l+1}(2Zr/na_0)e^{-\frac{Zr}{na_0}}$$

Квантовые числа

спектроскоп

Главное квантовое число n
определяет энергию электронов на данной орбитали:

$$E_n = -(2\pi^2 m e^4 Z^2)/(n^2 h^2) = -13{,}6\ \text{эВ} * Z^2/n^2$$

Z – заряд ядра.

5-й

Допустимые значения: **n = 1, 2, 3, 4, 5, ...**
K L M N O ...

Орбитальное квантовое число l
определяет значение орбитального момента количества движения электрона на данной орбитали:

$$[l(l+1)]^{1/2}\ h/2\pi$$

Допустимые значения: **0, 1, 2, 3, ... , n-1**
s p d f

спектры

Орбитальное квантовое число

Спектръ поглощенія двуокиси азота (1) и паровъ іода (2).

$l = 0$	1	2	3	4
s	p	d	f	g
резкий	главный	диффузный	фундамен-тальный	
sharp	*principal*	*diffuse*	*fundamental*	

Квантовые числа

Орбитальное магнитное квантовое число m_l определяет значение составляющей проекции момента количества движения электрона на выделенное направление в пространстве: $m_l (h/2p)$

Допустимые значения m_l для данного l: $-l, \ldots -2, -1, 0, +1, +2, \ldots +l$

Спиновое квантовое число m_s принимает для электрона только два значения: **+1/2 и -1/2**

Спин и взаимодействие (модель) 0:27

О смысле спина

Спин является некоторым внутренним свойством, наподобие массы или заряда, требующим особого, пока ещё не известного обоснования.

Другими словами. Спин (от англ. spin — вертеться, вращение) — собственный момент импульса элементарных частиц, имеющий «квантовую природу» и не связанный с движением частицы как целого. В отличие от орбитального углового момента, который порождается движением частицы в пространстве, спин не связан с любым движением в пространстве. Спин — это якобы внутренняя, исключительно квантовая характеристика, которую нельзя объяснить в рамках механики.
http://maxpark.com/community/4057/content/2001530

Квантовые числа (**Смысл спина**)

Спиновое квантовое число m_s

принимает для электрона только два значения: **+1/2 и -1/2**

KINOPOISK.RU

Построение системы квантовых объектов (1)

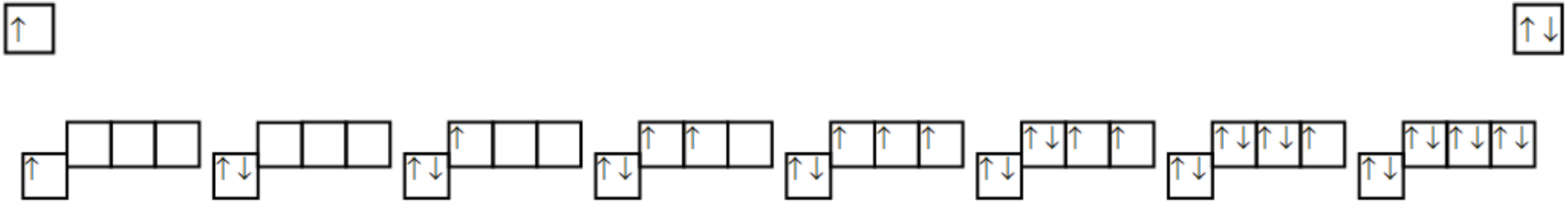
n=1 $n = 1; \quad l = 0; \quad m_l = 0; \quad m_s = +1/2$ и $-1/2$

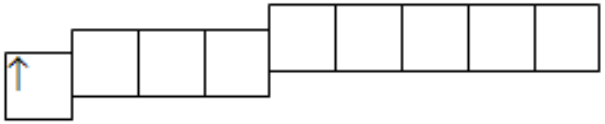
всего может быть 2 объекта

n=2

$n = 1,$	2			
$l = 0,$	1			
$m_l = 0,$	$-1,$	$0,$	$+1$	
$m_s = \pm 1/2,$	$\pm 1/2,$	$\pm 1/2,$	$\pm 1/2,$	

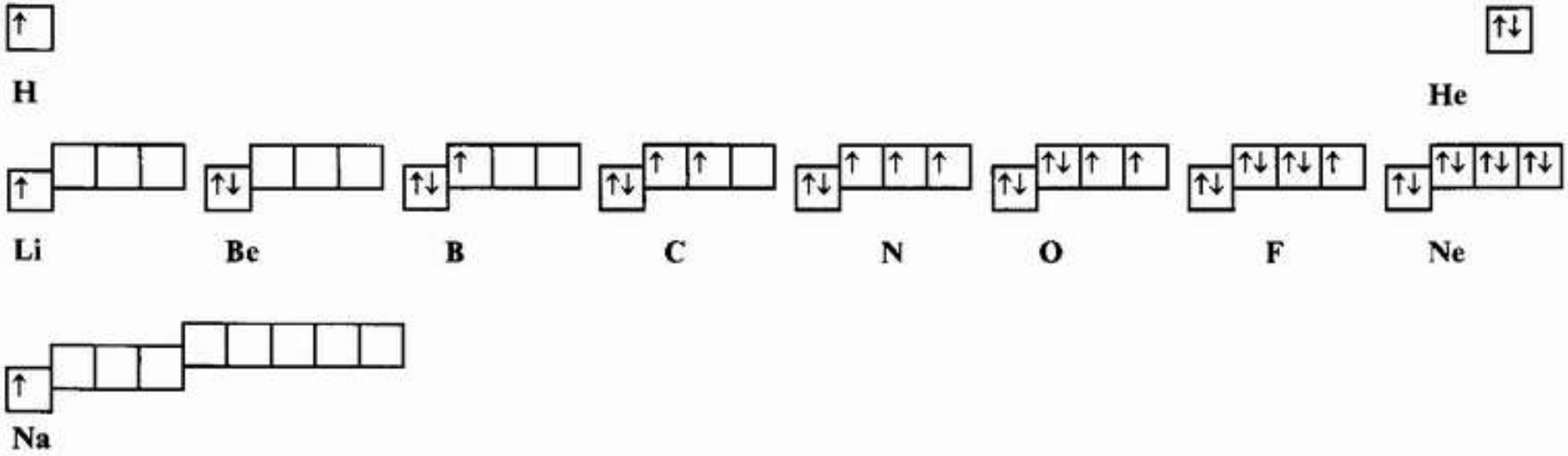
всего может быть 2 + 6 = 8 объектов





n=3

Построение системы квантовых объектов (2)



8 электронов → 8 групп

Периоды	Ряды	ГРУППЫ ЭЛЕМЕНТОВ										
		I	II	III	IV	V	VI	VII	VIII			
		а б	а б	а б	а б	а б	а б	а б	б			а
1	1	H 1 ВОДОРОД 1,008										He 2 Гелий 4,003
2	2	Li 3 ЛИТИЙ 6,941	Be 4 БЕРИЛЛИЙ 9,0122	B 5 БОР 10,811	C 6 УГЛЕРОД 12,011	N 7 АЗОТ 14,007	O 8 КИСЛОРОД 15,999	F 9 ФТОР 18,998				Ne 10 НЕОН 20,179
3	3	Na 11 НАТРИЙ 22,99	Mg 12 МАГНИЙ 24,312	Al 13 АЛЮМИНИЙ 26,092	Si 14 КРЕМНИЙ 28,086	P 15 ФОСФОР 30,974	S 16 СЕРА 32,064	Cl 17 ХЛОР 35,453				Ar 18 АРГОН 39,948
4	4	K 19 КАЛИЙ 39,102	Ca 20 КАЛЬЦИЙ 40,08	21 Sc СКАНДИЙ 44,956	22 Ti ТИТАН 47,056	23 V ВАНАДИЙ 50,941	24 Cr ХРОМ 51,996	25 Mn МАРГАНЕЦ 54,938	26 Fe ЖЕЛЕЗО 55,849	27 Co КОБАЛЬТ 58,933	28 Ni НИКЕЛЬ 58,7	
	5	29 Cu МЕДЬ 63,546	30 Zn ЦИНК 65,37	Ga 31 ГАЛЛИЙ 69,72	Ge 32 ГЕРМАНИЙ 72,59	As 33 МЫШЬЯК 74,922	Se 34 СЕЛЕН 78,96	Br 35 БРОМ 79,904				Kr 36 КРИПТОН 83,8
5	6	Rb 37 РУБИДИЙ 85,468	Sr 38 СТРОНЦИЙ 87,62	39 Y ИТТРИЙ 88,906	40 Zr ЦИРКОНИЙ 91,22	41 Nb НИОБИЙ 92,906	42 Mo МОЛИБДЕН 95,94	43 Tc ТЕХНЕЦИЙ [99]	44 Ru РУТЕНИЙ 101,07	45 Rh РОДИЙ 102,906	46 Pd ПАЛЛАДИЙ 106,4	
	7	47 Ag СЕРЕБРО 107,868	48 Cd КАДМИЙ 112,41	In 49 ИНДИЙ 114,82	Sn 50 ОЛОВО 118,69	Sb 51 СУРЬМА 121,75	Te 52 ТЕЛЛУР 127,6	I 53 ИОД 126,905				Xe 54 КСЕНОН 131,3
6	8	Cs 55 ЦЕЗИЙ 132,905	Ba 56 БАРИЙ 137,34	57–71 ЛАНТАНОИДЫ	72 Hf ГАФНИЙ 178,49	73 Ta ТАНТАЛ 180,948	74 W ВОЛЬФРАМ 183,85	75 Re РЕНИЙ 186,207	76 Os ОСМИЙ 190,2	77 Ir ИРИДИЙ 192,22	78 Pt ПЛАТИНА 195,09	
	9	79 Au ЗОЛОТО 196,967	80 Hg РТУТЬ 200,59	Tl 81 ТАЛЛИЙ 204,37	Pb 82 СВИНЕЦ 207,19	Bi 83 ВИСМУТ 208,98	Po 84 ПОЛОНИЙ [210]	At 85 АСТАТ [210]				Rn 86 РАДОН [222]
7	10	Fr 87 ФРАНЦИЙ [223]	Ra 88 РАДИЙ [226]	89–103 АКТИНОИДЫ	104 Rf РЕЗЕРФОРДИЙ [261]	105 Db ДУБНИЙ [262]	106 Sg СИБОРГИЙ [263]	107 Bh БОРИЙ [262]	108 Hn ХАНИЙ [265]	109 Mt МЕЙТНЕРИЙ	110	

ЛАНТАНОИДЫ

57 La ЛАНТАН 138,906	58 Ce ЦЕРИЙ 140,12	59 Pr ПРАЗЕОДИМ 140,908	60 Nd НЕОДИМ 144,24	61 Pm ПРОМЕТИЙ [145]	62 Sm САМАРИЙ 150,4	63 Eu ЕВРОПИЙ 151,96	64 Gd ГАДОЛИНИЙ 157,25	65 Tb ТЕРБИЙ 158,926	66 Dy ДИСПРОЗИЙ 162,5	67 Ho ГОЛЬМИЙ 164,93	68 Er ЭРБИЙ 167,26	69 Tm ТУЛИЙ 168,934	70 Yb ИТТЕРБИЙ 173,04	71 Lu ЛЮТЕЦИЙ 174,97

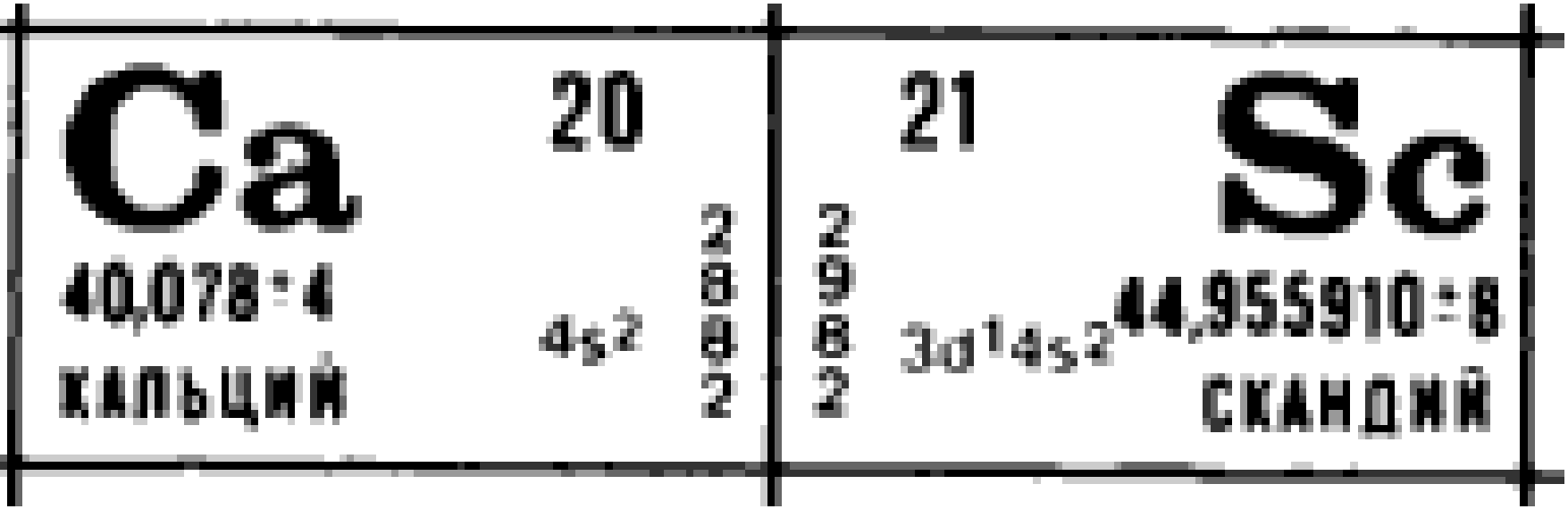
АКТИНОИДЫ

89 Ac АКТИНИЙ [227]	90 Th ТОРИЙ 232,038	91 Pa ПРОТАКТИНИЙ [231]	92 U УРАН 238,29	93 Np НЕПТУНИЙ [237]	94 Pu ПЛУТОНИЙ [244]	95 Am АМЕРИЦИЙ [243]	96 Cm КЮРИЙ [247]	97 Bk БЕРКЛИЙ [247]	98 Cf КАЛИФОРНИЙ [251]	99 Es ЭЙНШТЕЙНИЙ [254]	100 Fm ФЕРМИЙ [257]	101 Md МЕНДЕЛЕВИЙ [258]	102 No НОБЕЛИЙ	103 Lr ЛОУРЕНСИЙ

distant-lessons.ru

Металлы и неметаллы

От кальция к скандию



Для n > 2 правило Клечковского

Заполнение электронами орбиталей в атоме происходит в порядке возрастания суммы главного ***n*** и орбитального ***l*** квантовых чисел . При одинаковой сумме ***n+l*** раньше заполняется орбиталь с меньшим значением ***n***.

Клечковский Всеволод Маврикиевич (1900—1972)— советский агрохимик.
Лауреат Сталинской премии (1952).

орбиталь

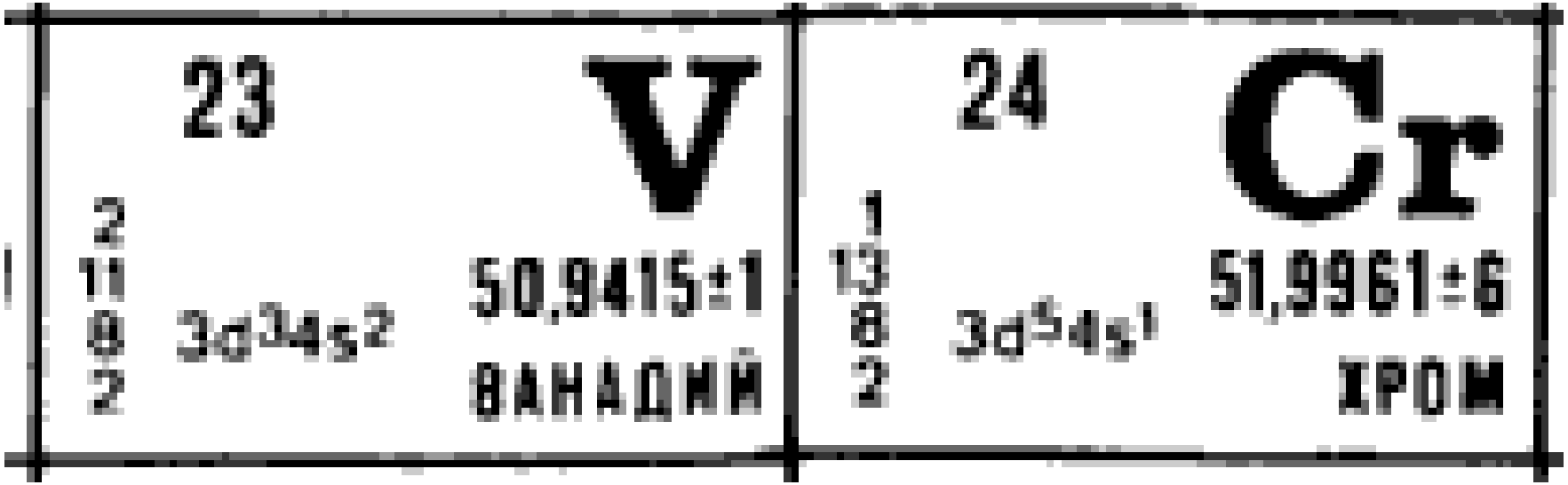
Атомная орбиталь — одноэлектронная волновая функция,
полученная решением уравнения Шрёдингера для данного атома[1];
задаётся: главным n, орбитальным l, и магнитным m — квантовыми числами.

Волновая функция рассчитывается по волновому уравнению Шрёдингера в рамках одноэлектронного приближения (метод Хартри — Фока) как волновая функция электрона,
находящегося в самосогласованном поле, создаваемом ядром атома со всеми остальными электронами атома.

$$1s < 2s < 2p < 3s < 3p < 4s < 3d < 4p < 5s < 4d < 5p < 6s < 4f \cong 5d < 6p < 7s < 5f \cong 6d < 7p < 8s$$

Таблица 1. Энергетическая последовательность орбиталей в изолированных атомах				
(*n*+*l*)	***n***	***l***	**Атомные орбитали**	
1	1	0	1*s*	Первый период
2	2	0	2*s*	Второй период
3	2	1	2*p*	
	3	0	3*s*	Третий период
4	3	1	3*p*	
	4	0	4*s*	Четвёртый период
5	3	2	3*d*	
	4	1	4*p*	
	5	0	5*s*	Пятый период
6	4	2	4*d*	
	5	1	5*p*	
	6	0	6*s*	Шестой период
7	4	3	4*f*	
	5	2	5*d*	
	6	1	6*p*	

От ванадия к хрому



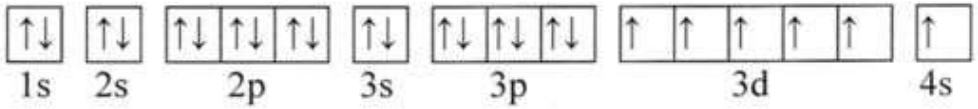
От ванадия к хрому

Хром – провал электрона!

Казалось бы, у хрома должно получиться: **Cr $3d^4 4s^2$**

Однако у хрома происходит **переход одного электрона с s-оболочки на d-оболочку:**

Cr…$3d^5 4s^1$



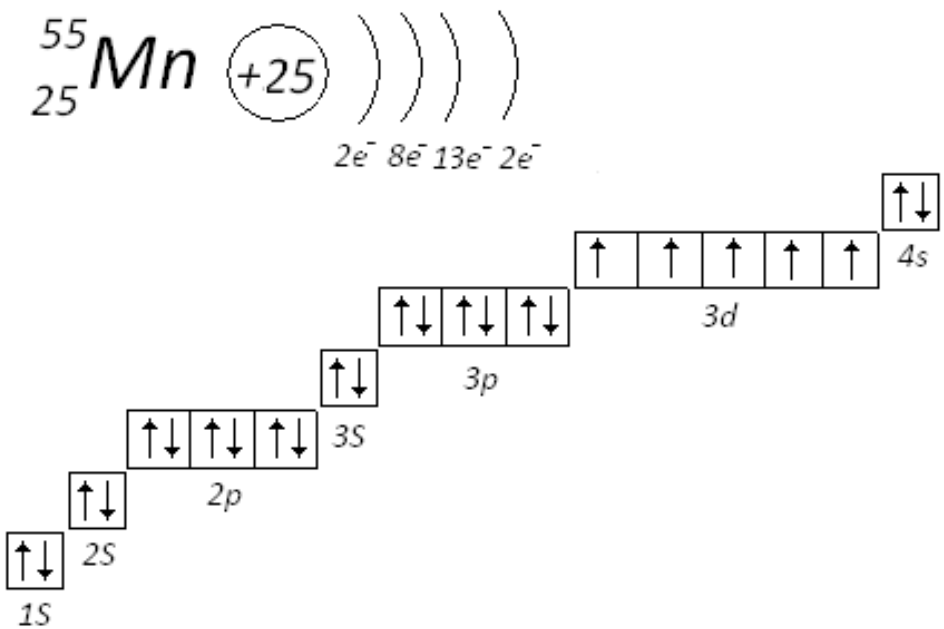
Это явление называется ПРОВАЛ ЭЛЕКТРОНА, причина такого явления - более выгодная по энергии полузаполненная d-оболочка.

Соответственно, хром имеет 6 неспаренных электронов, а не 4!

MyShared

От хрома к марганцу (?)

24 **Cr**	25 **Mn**
1 13 8 2	2 13 8 2
$3d^5 4s^1$	$3d^5 4s^2$
51,9961±6	54,938049±9
ХРОМ	МАРГАНЕЦ



В лекции использованы модели

из эл. учебника «Открытая химия 2.5»

(http://www.college.ru/chemistry/course/design/index.htm)