ЛЕКЦИЯ 1 СТРОЕНИЕ АТОМА

Атом – это электронейтральная микросистема, состоящая из положительно заряженного ядра и электронной оболочки, заряженной отрицательно.

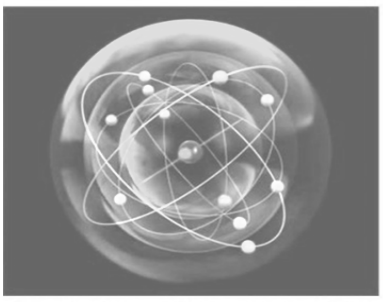
Носителем положительного заряда ядра являются протоны - **p**. Их число определяет величину заряда ядра **(Z)** и совпадает с порядковым номером химического элемента, т.е. **Z = P.**

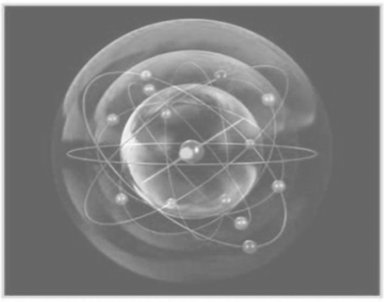
Основные характеристики элементарных частиц, образующих атом – протона, нейтрона и электрона, приведены в таблице 1.

Таблица 1.

Частица	Символ	Масса покоя		Заряд
		Кг	Относительная масса	
протон	p^+	$1{,}673\ 10^{-27}$	1	+1
нейтрон	n^0	$1{,}675\ 10^{-27}$	1	0
электрон	$\bar{e}$	$9{,}109\ 10^{-31}$	0	-1

Масса электрона почти в 1840 раз меньше массы протона и нейтрона. Поэтому масса атома практически равна массе ядра – сумме масс протонов и нейтронов ***(нуклонов)***.





Важной характеристикой ядра является ***массовое*** число А, которое равно общему числу нуклонов – сумме протонов **(P)** и нейтронов **(N)**, входящих в состав ядра:

$$\mathbf{A = P + N}$$

Разновидности одного и того же химического элемента, отличающиеся массой атомов, называются ***изотопами***. Ядра атомов изотопов различаются числом нейтронов.

Так, изотопами водорода являются атомы с массовыми числами соответственно 1,2 и 3:

^1H	(^2H) ^2D	(^3H) ^3T
p^+ ($\bar{e}$)	($p^+ + n^0$) $\bar{e}$	($p^+ + 2n^0$) $\bar{e}$
протий	дейтерий	тритий

Протий и дейтерий – стабильные изотопы, тритий – радиоактивен.

Превращение химических элементов осуществляется в результате ядерных реакций. Состав ядра в результате химической реакции не изменяется.

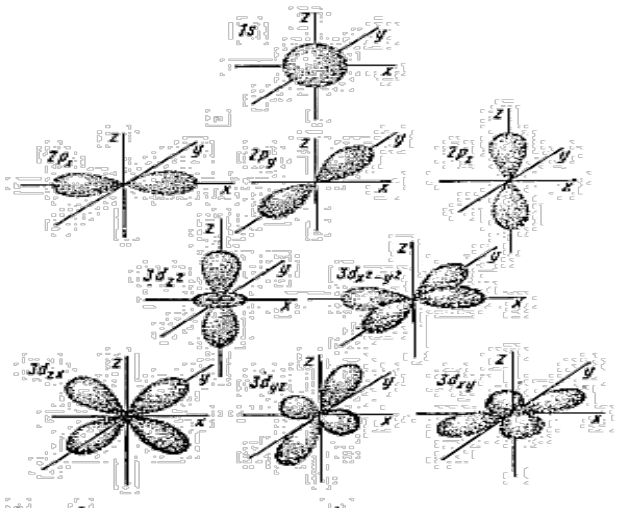
Состояние электронов в поле ядра атома.

Квантовые числа. Квантовые ячейки

Современная теория строения атома основана на законах, описывающих движение микрочастиц. В 20-е годы XX в. возник раздел физики, описывающий движение и взаимодействие микрочастиц, – *квантовая* (или *волновая*) механика. Она основывается на представлении о квантовании энергии, волновом характере движения микрочастиц и вероятностном методе описания микрообъектов.

Основной характеристикой, определяющей состояние электрона в поле ядра атома, в квантовой механике является энергия. Энергия электрона принимает не любые, а лишь определенные дискретные (квантующиеся) значения. Для полной характеристики энергетического состояния каждого электрона в атоме разработана система четырех параметров, называемых квантовыми числами.

Главное квантовое число, n, с точки зрения волновых представлений об электроне



определяет, насколько удалено данное электронное облако от ядра. Чем больше значение ***n***, тем слабее связан электрон с ядром, тем на более высоком энергетическом уровне он находится и тем большей энергией он обладает. Главное квантовое число может принимать значения целых чисел от 1 до ∞ , но для электронов в невозбужденных атомах, открытых до сих пор элементов, оно изменяется реально от 1 до 7. Энергетические уровни, для которых **n**=1,2,3,4,5,6,7, называются, соответственно, K, L, M, N, O, P, .Q – уровнями, и характеризуют, практически, номер слоя электронов.

Орбитальное, или побочное, квантовое число, ℓ, характеризует различное энергетическое состояние электронов в пределах данного энергетического уровня, его значение определяет распределение электронов по подуровням данного уровня. С точки зрения волновых представлений орбитальное квантовое число **ℓ** характеризует форму электронного облака, пространственную область его наиболее вероятного нахождения. Для электронов, находящихся на энергетическом уровне с главным квантовым числом n, орбитальные квантовые числа **ℓ** могут принимать значения 0, 1, 2, 3…до (**n**-1). Для s-электронов (**ℓ**=0) характерна форма шара, для p-электронов(l=1) – форма гантели, для d-электронов(l=2) – четырехлопастного винта, для f-электронов, (l=3) эта форма еще сложнее: (рис.1) Электроны, которым отвечают значения побочного квантового числа **ℓ**= 0,1,2 и 3, называются, соответственно, s-, p-, d- и f- электронами.

Рис.1. Формы орбиталей

Электронное облако, форма которого определяется значением побочного квантового числа **ℓ**, а общий запас энергии – значением главного квантового числа **n**, называется ***атомной орбиталью*** (АО).

Таблица 2.

Главное квантвое число, **n**	Орбитальное квантовое число, **ℓ**	Обозначение орбитали (электронного облака)
1	0	1s
2	0, 1	2s, 2p
3	0, 1, 2	3s, 3p, 3d
4	0, 1, 2, 3	4s, 4p, 4d, 4f

Магнитное квантовое число $m_ℓ$ характеризует пространственное расположение орбиталей. Оно определяет ориентацию электронного облака относительно взаимно перпендикулярных осей x, y, z или относительно внешнего магнитного поля. Магнитное квантовое число принимает целочисленные значения от **− ℓ** до **+ ℓ**, включая и нуль, т.е. всего **(2ℓ+1)** значений, которым отвечают **(2ℓ+1)** энергетических состояний, возможных для электронов данного подуровня. Например, для f-электрона **ℓ**=3, **$m_ℓ$** может иметь (2·3+1) значений, а именно **$m_ℓ$**=-3,-2,-1,0,+1,+2,+3.

Спиновое квантовое число m_s характеризует внутреннее движение электрона, приводящее к возникновению у последнего собственного магнитного поля. Спиновое квантовое число может принимать только 2 значения: **+ ½** и **-½** в зависимости от того, параллельно или антипараллельно ориентируется собственное магнитное поле электрона относительно магнитного поля, обусловленного вращением электрона вокруг ядра.

Два электрона с одинаковыми значениями **n, ℓ, $m_ℓ$** , но с различными значениями **m_s** называют *спаренными или неподелённой парой* электронов (↑↓).

Распределение электронов в атомах элементов определяется тремя основными положениями: принципом наименьшей энергии, принципом запрета Паули, а также правилом Гунда.

Согласно **принципу наименьшей энергии**:

Размещение электронов должно отвечать наибольшей связи их с ядром, т.е. электрон прежде всего занимает такие положения, при которых он будет обладать наименьшим запасом энергии.

Так как энергия электрона, в основном, определяется значением главного квантового числа **n** и, в меньшей степени, значением побочного числа **ℓ**, согласно **правилам В.М.Клечковского**:

1. *По мере увеличения заряда ядра атома заполнение подуровней осуществляется в таком порядке, при котором электрон в первую очередь поступает на подуровень, для которого значение суммы (n+ℓ) оказывается меньшим.*

2. *Если сумма (n+ℓ) оказывается одинаковой для двух или трех подуровней, то электрон в первую очередь поступает на подуровень с меньшим значением главного квантового числа.*

Например, энергия электрона на подуровне 4s (n+ℓ=4+0=4) меньше, чем на 3d (n+ℓ=3+2=5). На подуровне 5s (n+ℓ=5+0=5) энергия меньше, чем на 4d (n+ℓ=4+2=6); на 5p (n+ℓ=5+1=6) энергия меньше, чем на 4f (n+ℓ=4+3=7).

Согласно **принципу запрета Паули** (1925):

В атоме не может быть двух электронов с одинаковыми значениями всех четырех квантовых чисел.

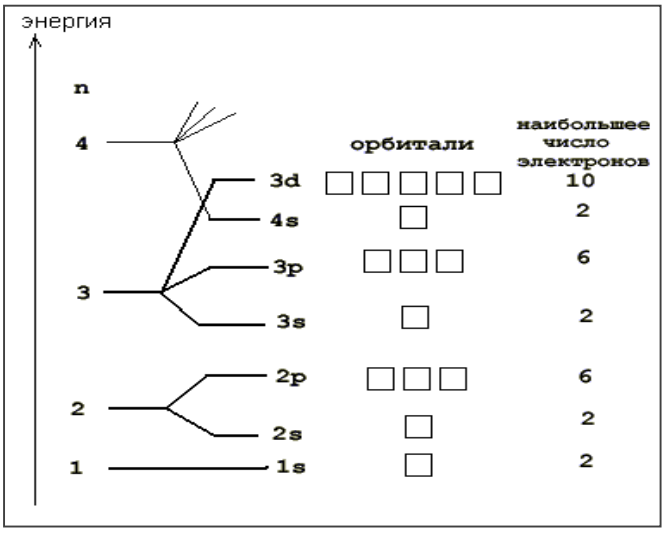
Паули установил, что максимальное количество электронов, которое может находиться на n-ном уровне, определяется по формуле $\mathbf{x=2n^2}$. Так, на первом уровне может находиться не более двух электронов, на втором-8, на третьем-18, на четвертом-32, на пятом-50.

Третье теоретическое положение, которым руководствуются для выяснения электронной конфигурации атома – **правило Гунда:**

Электроны в пределах данного подуровня (s-, p-,d- или f-) располагаются так, чтобы алгебраическая сумма значений спиновых квантовых чисел была максимальной.

Заполнение орбиталей происходит в порядке возрастания суммы квантовых чисел ***n*** + ***l***, а при равной сумме – в порядке возрастания числа ***n***. Соответственно по этому правилу последовательность заполнения энергетических уровней и подуровней следующая:

$1s^2 < 2s^2 < 2p^6 < 3s^2 < 3p^6 < 4s^2 < 3d^{10} < 4p^6 < 5s^2 < 4d^{10} < 5p^6 < 6s^2 < 5d^1 < 4f^{14} < 5d^9 < 6p^6 < 7s^2 < 6d^1 < 5f^{14} < 6d^9 < 7p^6 < 8s^2$……



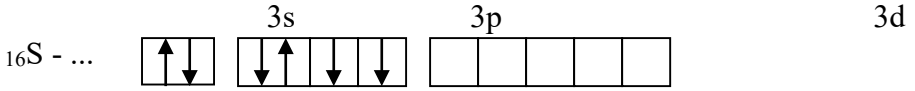
Примеры решения задач

Пример 1. Напишите электронную формулу атома серы. К какому электронному семейству относится сера? Укажите валентные электроны, распределите их по энергетическим ячейкам в нормальном и возбужденных состояниях.

Решение. У атома серы порядковый номер 16 в таблице Д.И. Менделеева, поэтому – 16 электронов и последовательность заполнения энергетических уровней и подуровней совпадает с электронной формулой (что характерно для элементов с порядковыми номерами от 1 до 20):

$_{16}S – 1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^2\ 3p^4$

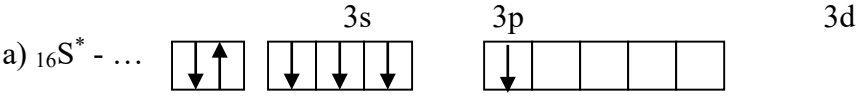
Последним заполняется p-подуровень, поэтому сера принадлежит к p-электронному семейству; содержит 6 валентных электронов – $3s^2\ 3p^4$. Представим схему размещения валентных электронов в квантовых (энергетических) ячейках:



Валентность серы в нормальном состоянии равна 2, например, в соединениях H_2S, Na_2S, CaS.

У атома серы на 3d-подуровне имеются вакантные орбитали. При возбуждении атома происходит разъединение пар электронов и переход их на свободные орбитали.

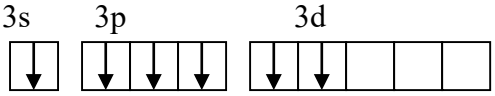
Представим электронные конфигурации атома серы в возбужденных состояниях:



$_{16}S^*$ - … $3s^2 3p^3 3d^1$

Валентность серы равна 4, например, в соединениях SO_2, H_2SO_3

б) $_{16}S^*$ - …



S^* - … $3s^1\ 3p^3\ 3d^2$

Валентность серы равна 6, например, в соединениях: SO_3, H_2SO_4.

Вывод: валентность серы в соединениях 2, 4, 6.

Пример 2. Составьте электронную формулу атома титана и ионов титана Ti^{2+} и Ti^{4+}. К какому электронному семейству относится титан? Приведите электронные аналоги титана.

Решение. Порядок заполнения энергетических уровней и подуровней следующий:

$$_{22}Ti - 1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^2\ 3p^6\ 4s^2\ 3d^2$$

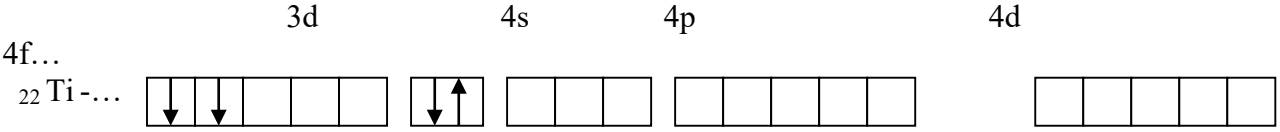
Титан принадлежит к d-электронному семейству.

Электронная формула титана имеет вид:

$$_{22}Ti - 1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^2\ 3p^6\ \underline{3d^2\ 4s^2}$$

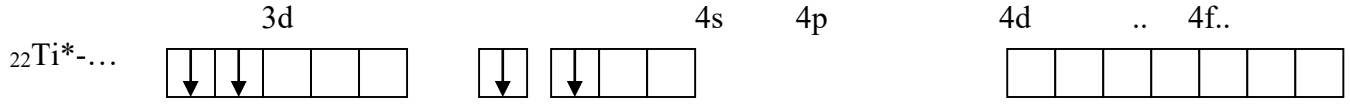
Подчеркнуты валентные электроны.

Электронно-графические формулы валентных электронов атома титана в нормальном и возбужденном состояниях:



Валентность титана в нормальном состоянии равна 2, например, в соединениях: TiO, $TiCl_2$. Такая валентность обусловлена двумя неспаренными электронами, но вакантные орбитали на 4p-подуровне вносят дополнительный вклад в валентность и титан в некоторых соединениях проявляет валентность, равную 3, например, в соединении $TiCl_3$.

При возбуждении атома титана происходит распаривание 4s-электронов и переход их на 4p-подуровень, валентность титана в этом состоянии равна 4 (TiO_2, $TiCl_4$):



$_{22}$ Ti^* - … $3d^2\ 4s^1\ 4p^1\ 4d^0\ 4f^0$

Сокращенная электронная формула атома титана:

$_{22}$ Ti - … $3d^2\ 4s^2$

Электронные аналоги титана:

$_{40}$ Zr - … $4d^2\ 5s^2$; $_{72}$ Hf - …$5d^2\ 6s^2$

Электронные формулы ионов титана Ti^{2+} и Ti^{4+} соответственно:

$_{22}Ti^{2+}$ - … $3d^2\ 4s^0$; $_{22}Ti^{4+}$ - … $3d^0\ 4s^0$.