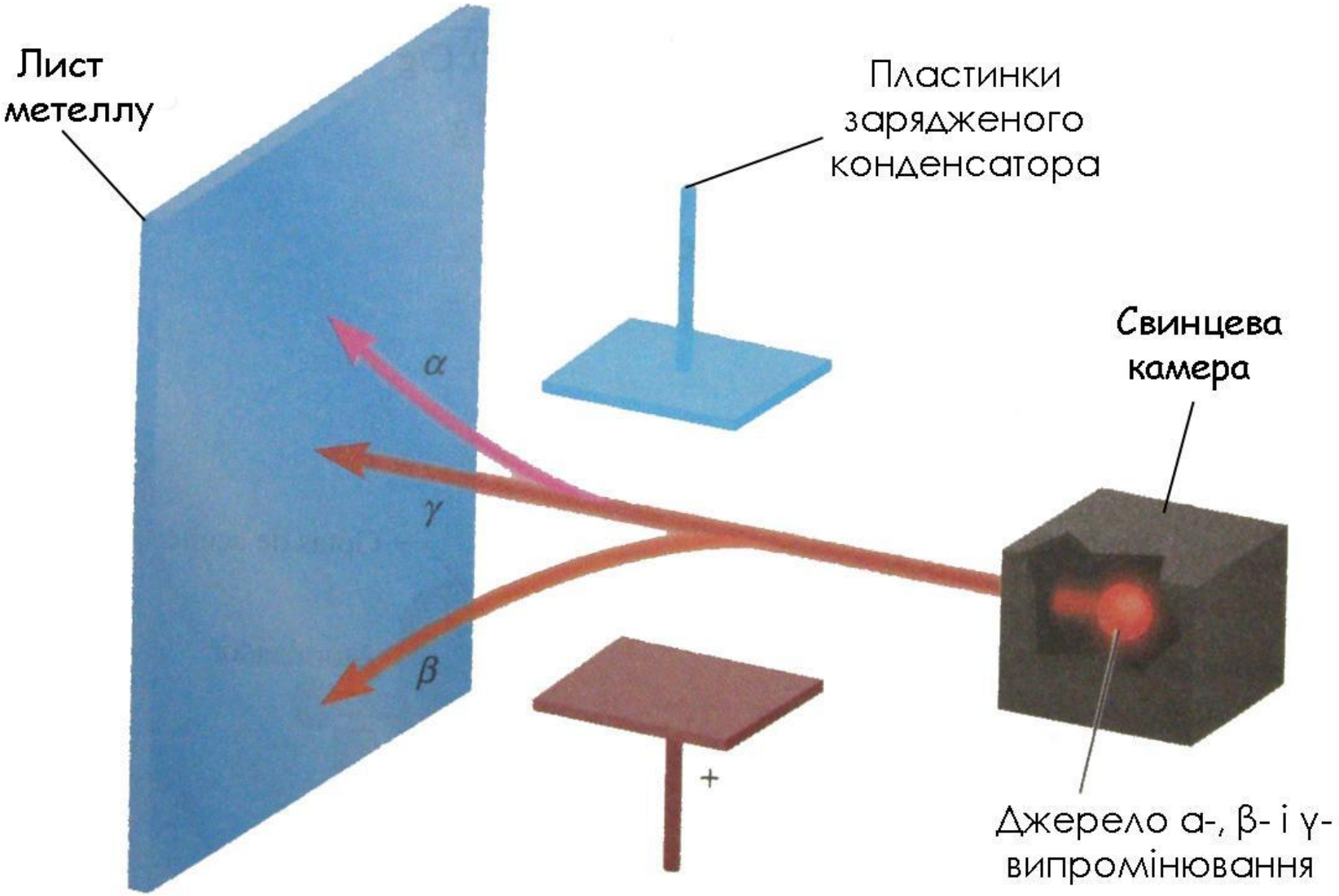
БУДОВА АТОМА

1879р.
Англійський хімік і фізик У. Крукс відкрив катодні промені, які пізніше були ідентифіковані як потік електронів.

1886р.
Німецький фізик Е. Гольдштейн відкрив каналові промені, які виявились потоком іонів з позитивним зарядом, кратним заряду електрона.

1895р.
Німецький фізик Вільгельм Конрад Рентген (Нобелівський лауреат 1901) відкрив
Х-промені, які виявились електромагнітним випромінюванням з дуже короткою довжиною хвилі,
($10^{-10} \div 10^{-11}$ м)

1896р.
Французький фізик Антуан Анрі Беккерель
(Нобелівський лауреат 1903) відкрив явище природного радіоактивного розпаду і розділив випромінювання, яке супроводжувало цей процес, на три складові: α-, β-, γ- промені.


Лист метеллу
Пластинки зарядженого конденсатора
Свинцева камера
α
γ
β
+
Джерело α-, β- і γ-випромінювання

1897р.
Англійський фізик Джозеф Джон Томпсон відкрив електрон і за відхиленням пучка катодних променів у електричному та магнітному полях знайшов відношення заряду електрона до його маси

$e/m = 5{,}273 \cdot 10^{-17}$ ел.ст.од./г

1903р.
Джон Томпсон запропонував кавуноподібну модель атома

1909р.
Роберт Маллікен визначив заряд і масу електрону

$e = 4{,}803 \cdot 10^{-10}$ ел.ст.од. = $1{,}601 \cdot 10^{-19}$ Кл

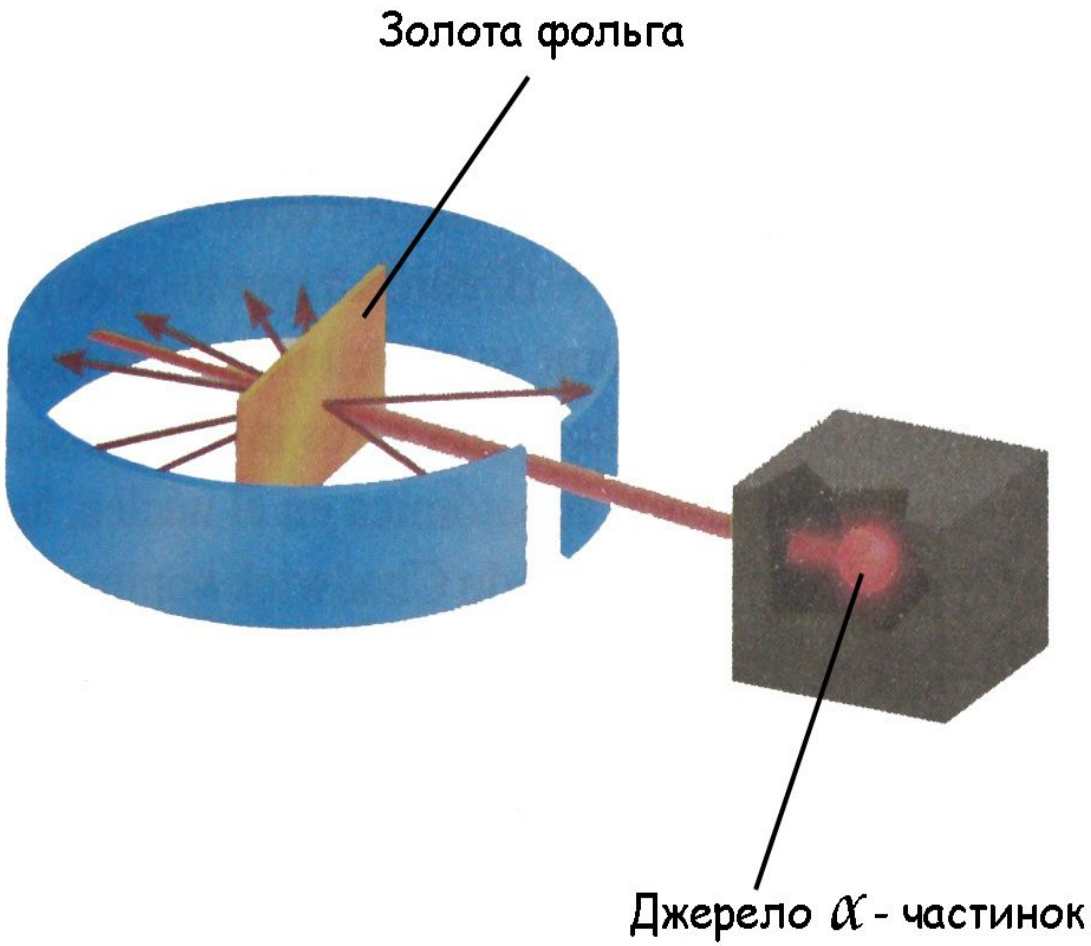
$m = 9{,}108 \cdot 10^{-31}$кг
(1/1836 m(H))

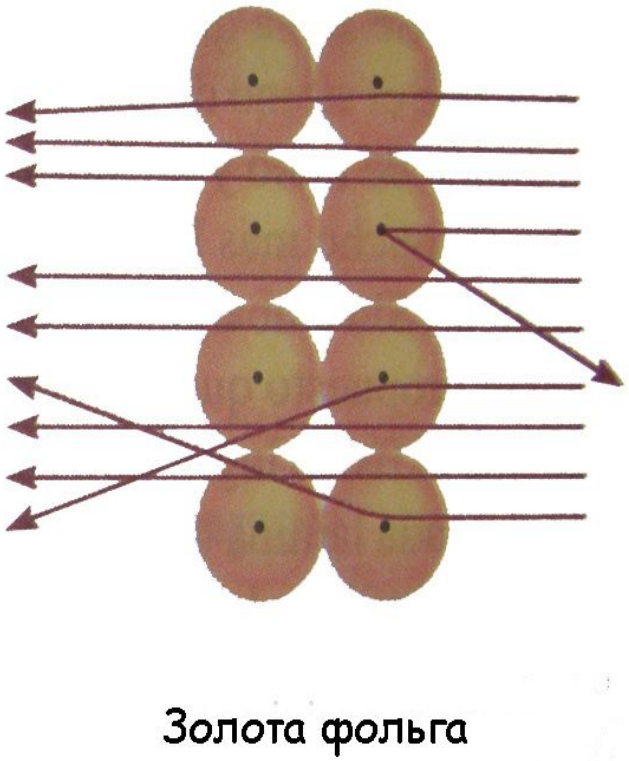
1911р.

Англійський фізик Ернест Резерфорд (Нобелівський лауреат 1918) використав α - промені для вивчення будови атому

α - частинки - це ядра атому гелію (He^{2+})

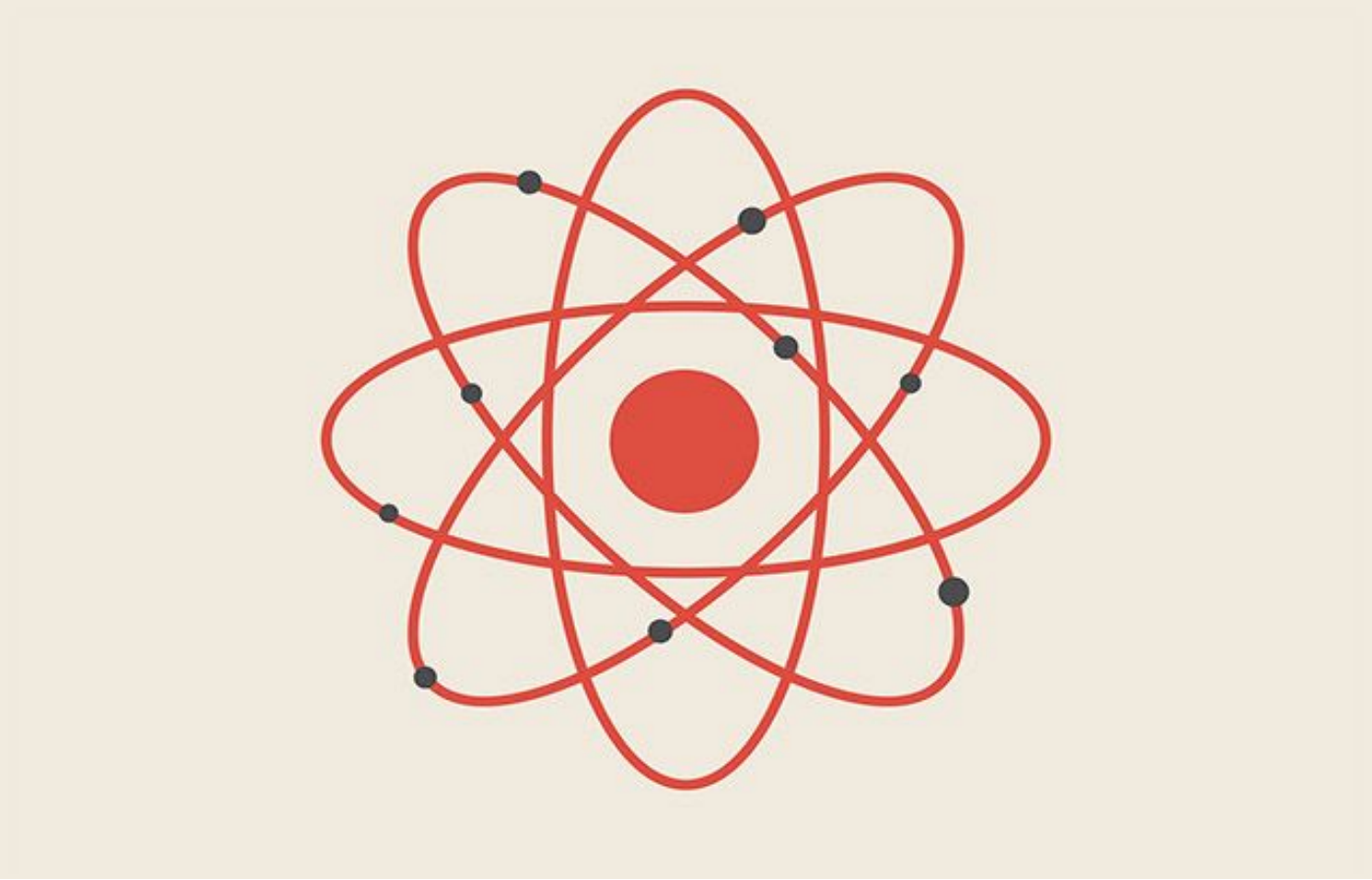
$A_r(Au) = 197$ $A_r(He) = 4$


Золота фольга
Джерело α - частинок


Золота фольга

$$r_{ядра} = (10^{-4}\text{-}10^{-5})\ r_{атома}$$

Е. Резерфорд запропонував планетарну модель атома.



Але дуже швидко теорія Резерфорда прийшла в протиріччя з багатьма експериментами.

Чому електрон не падає на ядро?
Чому спектри атомів лінійчасті?

1913р.
Видатний датський фізик–теоретик (Нобелівський лауреат 1922) запропонував на прикладі атому гідрогену модель атому, використавши для цього відомі, але розрізнені наукові факти і теорії:

лінійчасту структуру атомних спектрів, класичну механіку, електростатику та теорію Макса Планка про квантування енергії

$$E = h \cdot V$$

$h = 6{,}67 \cdot 10^{-34}$ Дж/с (стала Планка)

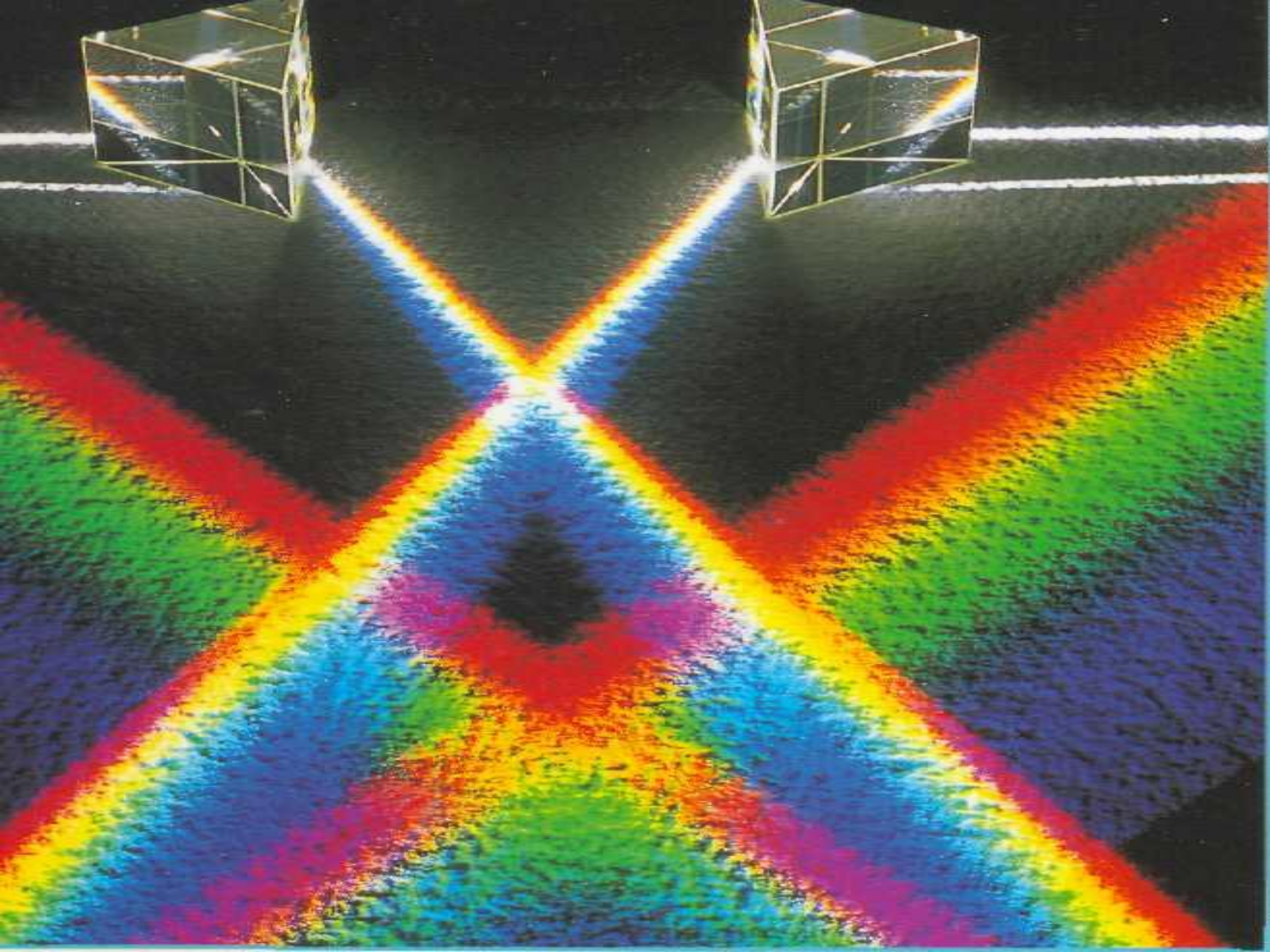
М.Планк – німецький фізик-теоретик (Нобелівський лауреат 1918)

$$\nu = \frac{c}{\lambda}$$

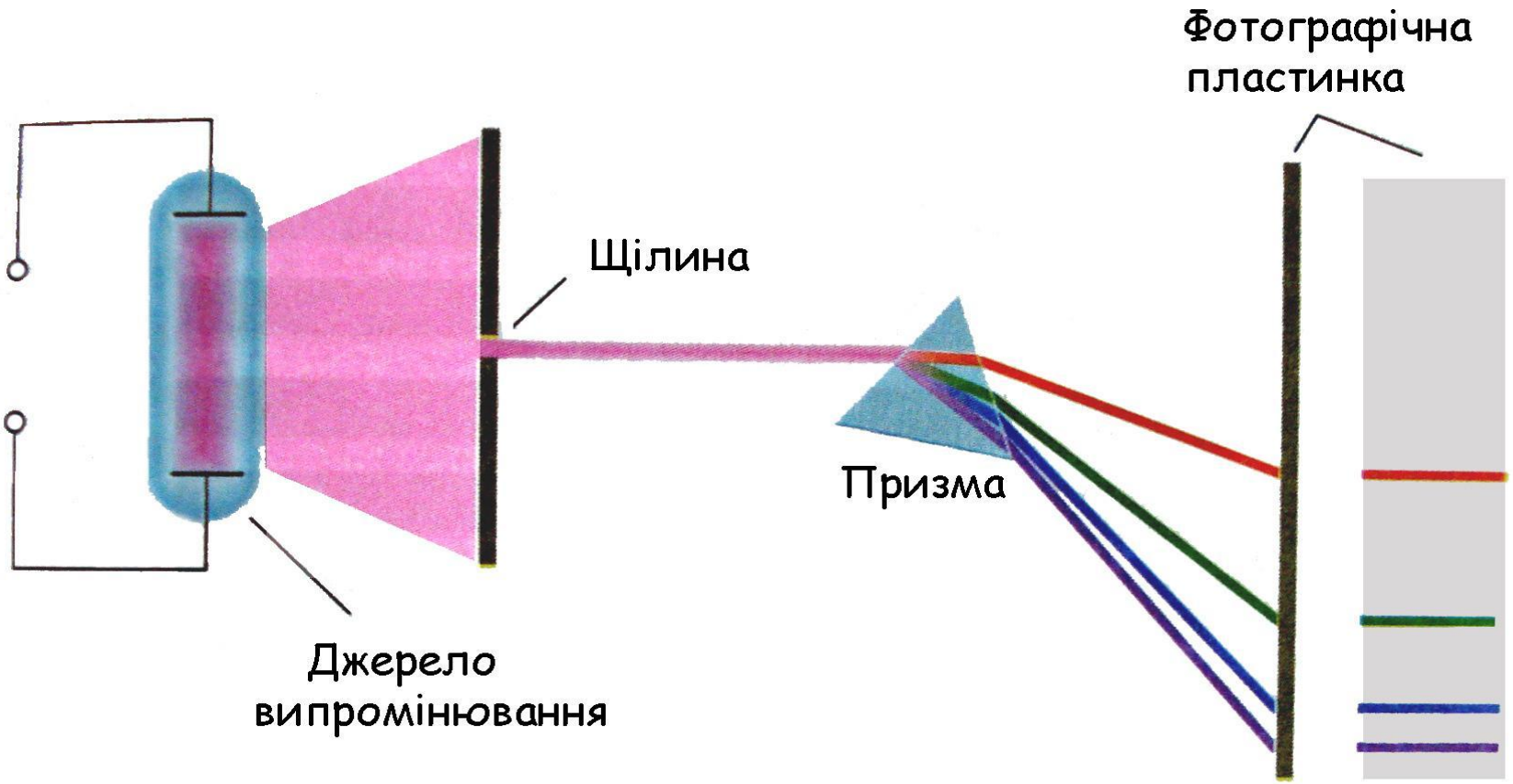
$C = 3 \cdot 10^{8}$ м/с

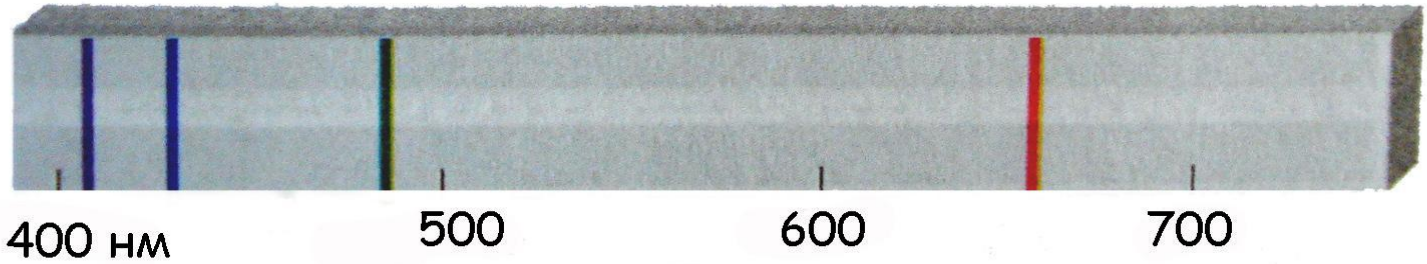
Кожній λ відповідає квант енергії з певною V та E

Поняття про спектр



Порядок довжини, м	Вид випромінювання
10^{-12}	Гамма - промені
10^{-10}	Рентгенівські промені
$2 \cdot 10^{-7}$	УФ - промені
$3{,}8 \cdot 10^{-7}$ - $7{,}6 \cdot 10^{-7}$	Видиме світло
$5 \cdot 10^{-6}$	Близьке ІЧ випромінювання





Спектр атому гідрогену

Основні положення теорії Бора

Атоми мають кулясту форму, електрони розміщуються навколо ядра атома шарами на стаціонарних орбітах, на яких їхня енергія не змінюється. Збудження атомів відбувається за рахунок поглинання ними дискретних порцій енергії, при чому електрон переміщується стрибкоподібно по дозволених стаціонарних орбітах.

Перший постулат Бора:

Електрон в атомі може обертатися лише по тих орбітах, на яких коловий момент руху є цілим числом, кратним сталій Планка, поділеній на 2π

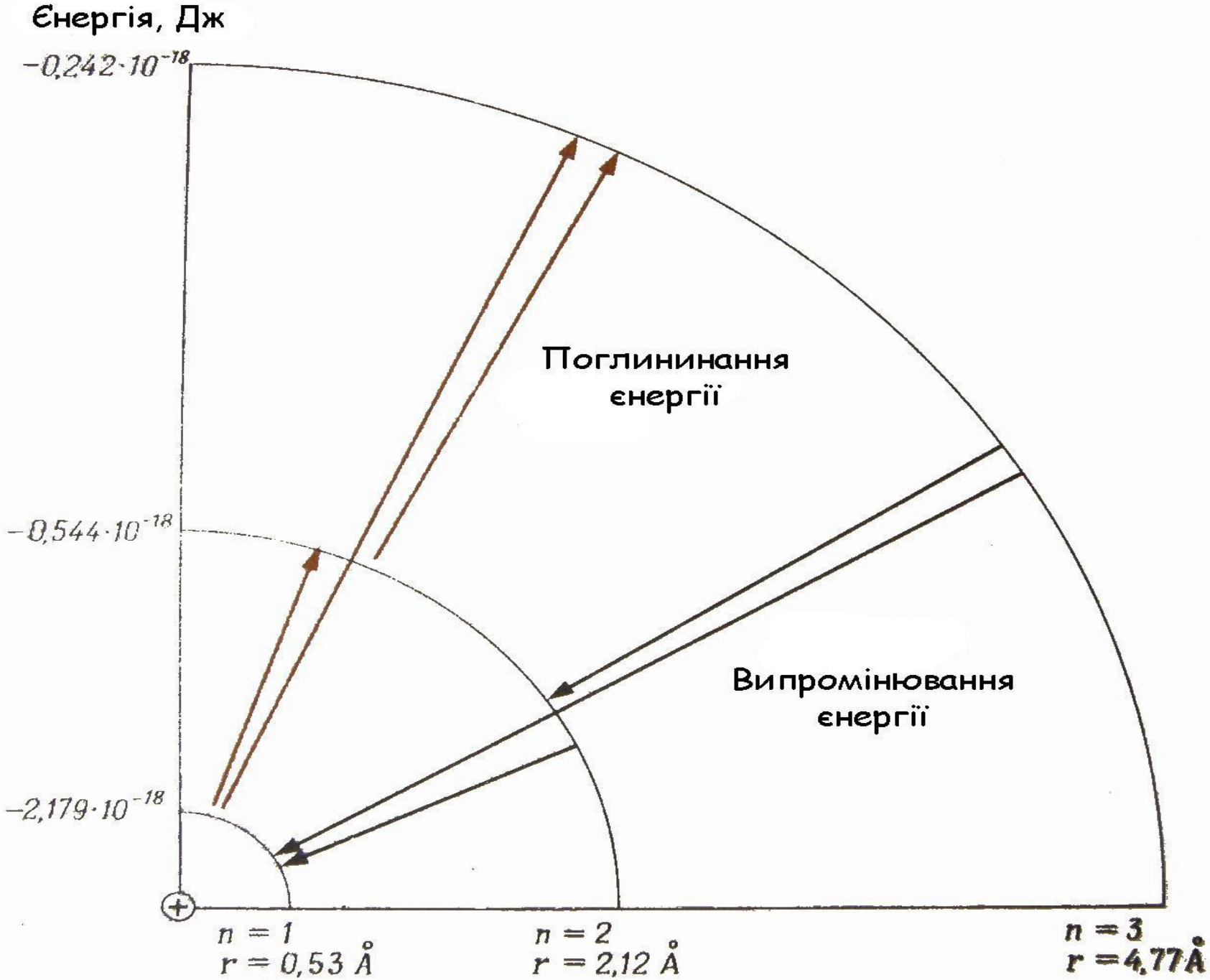
$$m\upsilon r = n\frac{h}{2\pi}$$

n = 1, 2, 3, ... ∞

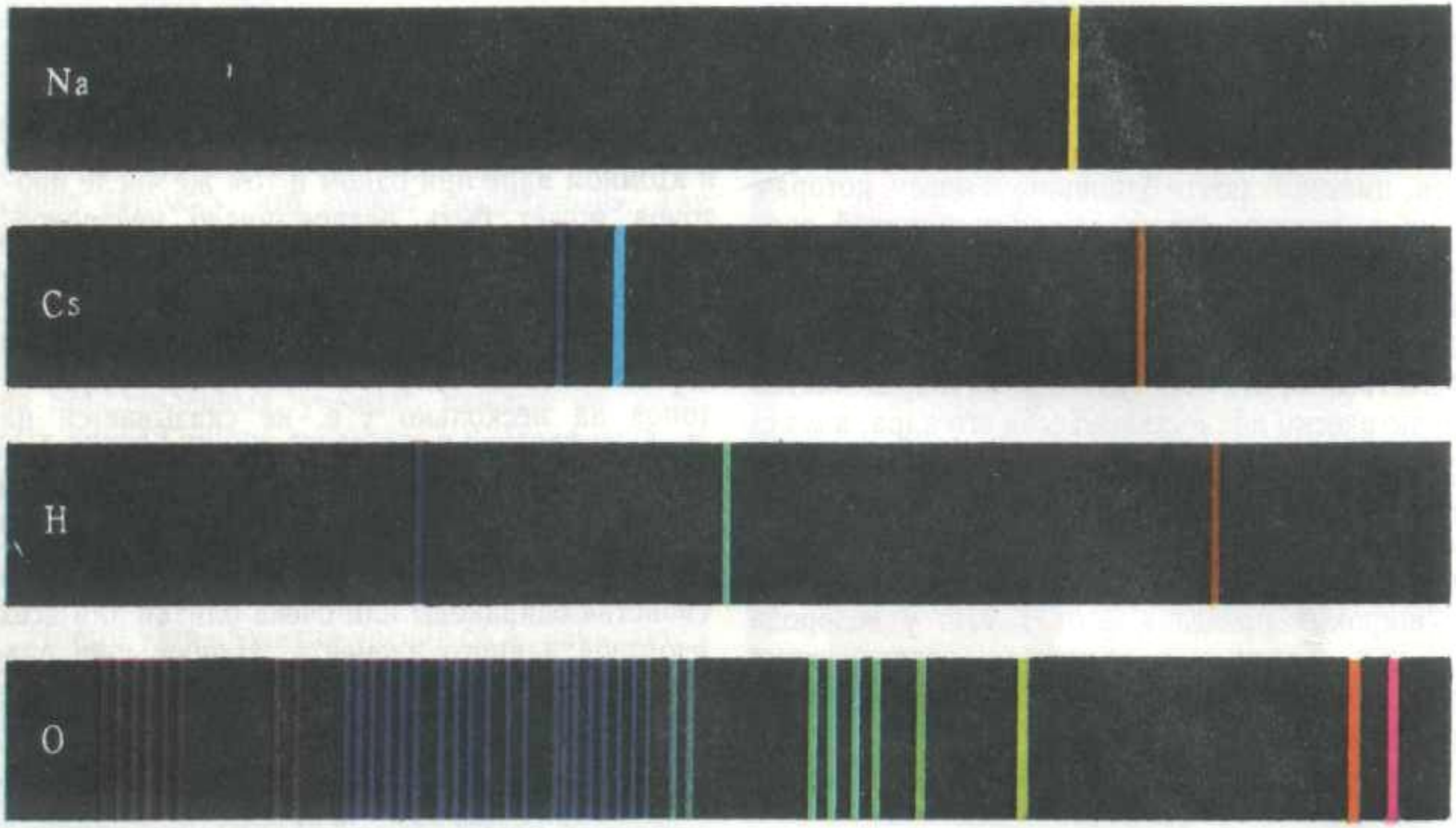
Другий постулат Бора:

Під час стрибкоподібного переходу електрона з більш віддаленого квантового рівня на ближчу до ядра орбіту атом випромінює квант енергії з певною частотою коливань V:

$$\Delta E = E_2 - E_1 = hV$$


Єнергія, Дж
−0,242·10⁻¹⁸
−0,544·10⁻¹⁸
−2,179·10⁻¹⁸
Поглининання
єнергії
Випромінювання
єнергії
n = 1
r = 0,53 Å
n = 2
r = 2,12 Å
n = 3
r = 4,77Å

Теорія Н. Бора пояснила спектр атома Н, але виявилася неспроможною пояснити спектри більш складних атомів.


Na
Cs
H
O

Хвильовий характер електрона

1924р.
Французький вчений Луї де Бройль (Нобелівський лауреат 1929) висловив ідею про хвильову природу електрону.

Будь-яка частинка з масою m та швидкістю v може розглядатись як хвиля з довжиною λ

$$E = h\nu = h\frac{c}{\lambda}$$

М. Планк

$$E = m \cdot c^2$$

Енштейн

$$h\frac{c}{\lambda} = mc^2$$

$$\frac{h}{\lambda} = mc \qquad \lambda = \frac{h}{mc}$$

$$\lambda = \frac{\mathrm{h}}{\mathrm{m}\upsilon}$$

Студент m = 50кг

v = 10 м/с

$$\lambda = \frac{6{,}6 \cdot 10^{-34}}{50 \cdot 10} = 1{,}2 \cdot 10^{-36} m$$

$r_{атома} \approx 10^{-9}$м

Хвильовими властивостями великих об`єктів можна знехтувати.

Електрон $v \approx 10^{6}$ м/с

$$\lambda = \frac{6{,}6 \cdot 10^{-34}}{9{,}1 \cdot 10^{31} кг \cdot \upsilon} \approx 10^{-10} м$$

Принцип невизначеності Гейзенберга

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{h}{2\pi}$$

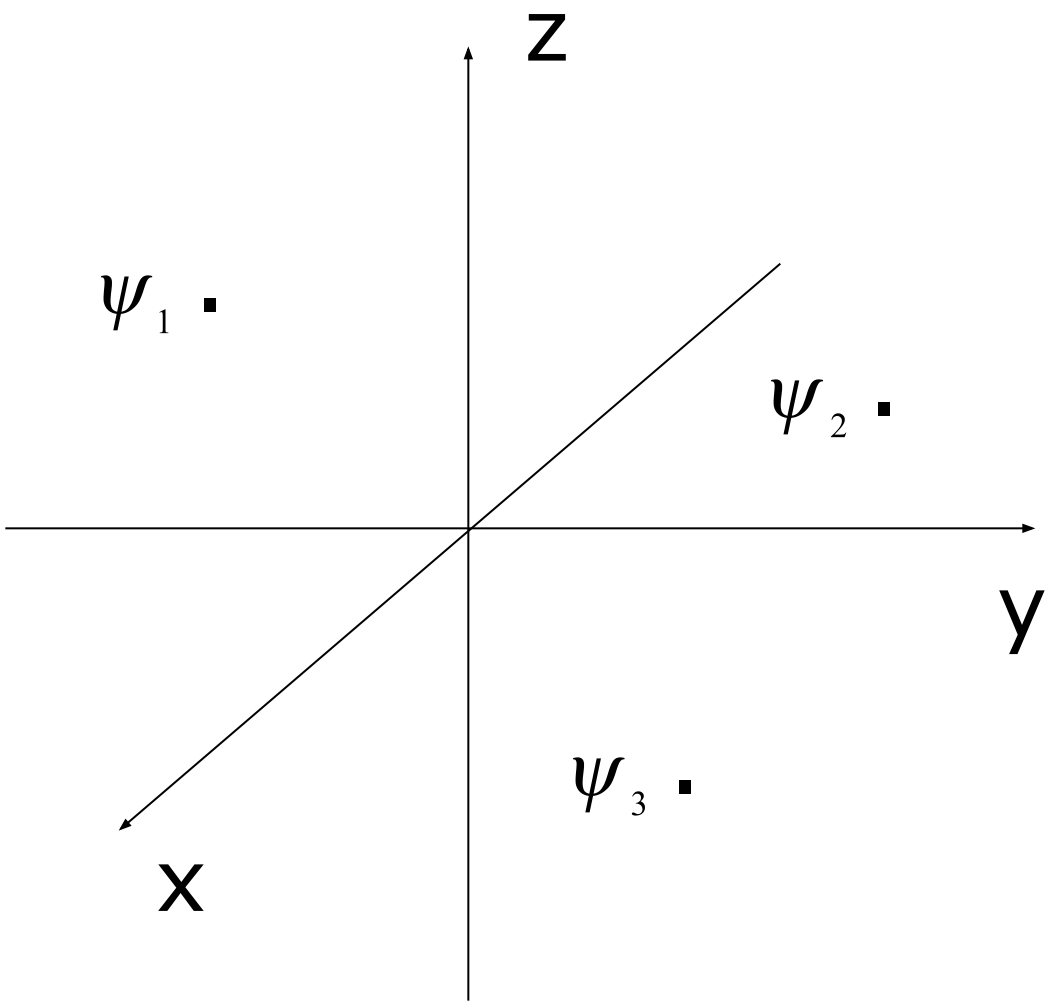
Для мікрочастинок існує обмеження точності визначення положення Δx та імпульсу Δp.

Визначити точно одночасно імпульс і положення в просторі електрона в атомі принципово неможливо, тому неможливо говорити про рух електронів навколо ядра атома по окремих колових орбітах.

Хвильова механіка
(теорія руху мікрочастинок)

1926р.
Австрійський фізик Е. Шредінгер (Нобелівський лауреат 1933) запропонував описувати стан електрона в атомі як стоячу електромагнітну хвилю. Основне рівняння хвильової механіки – рівняння Шредінгера

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



Результатом розв’язання хвильового рівняння є хвильова функція ψ

ψ^2 показує ймовірність (вірогідність) знаходження електрона в певному об’ємі простору навколо ядра, тобто електронну густину

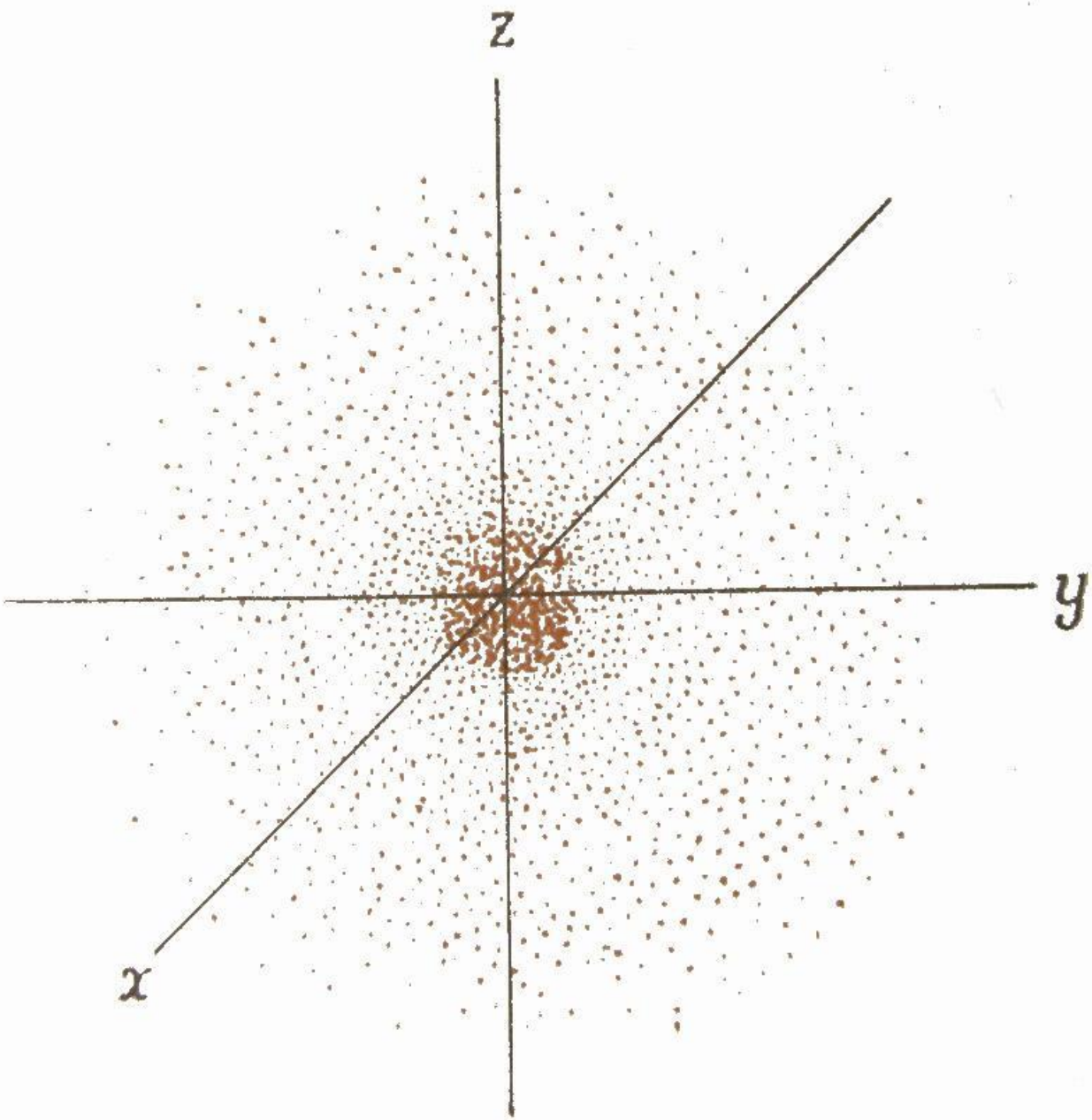
Хвильова механіка не вказує швидкості руху електрону і його траєкторію, а лише ймовірність знаходження електрона в тій чи іншій зоні біля ядра

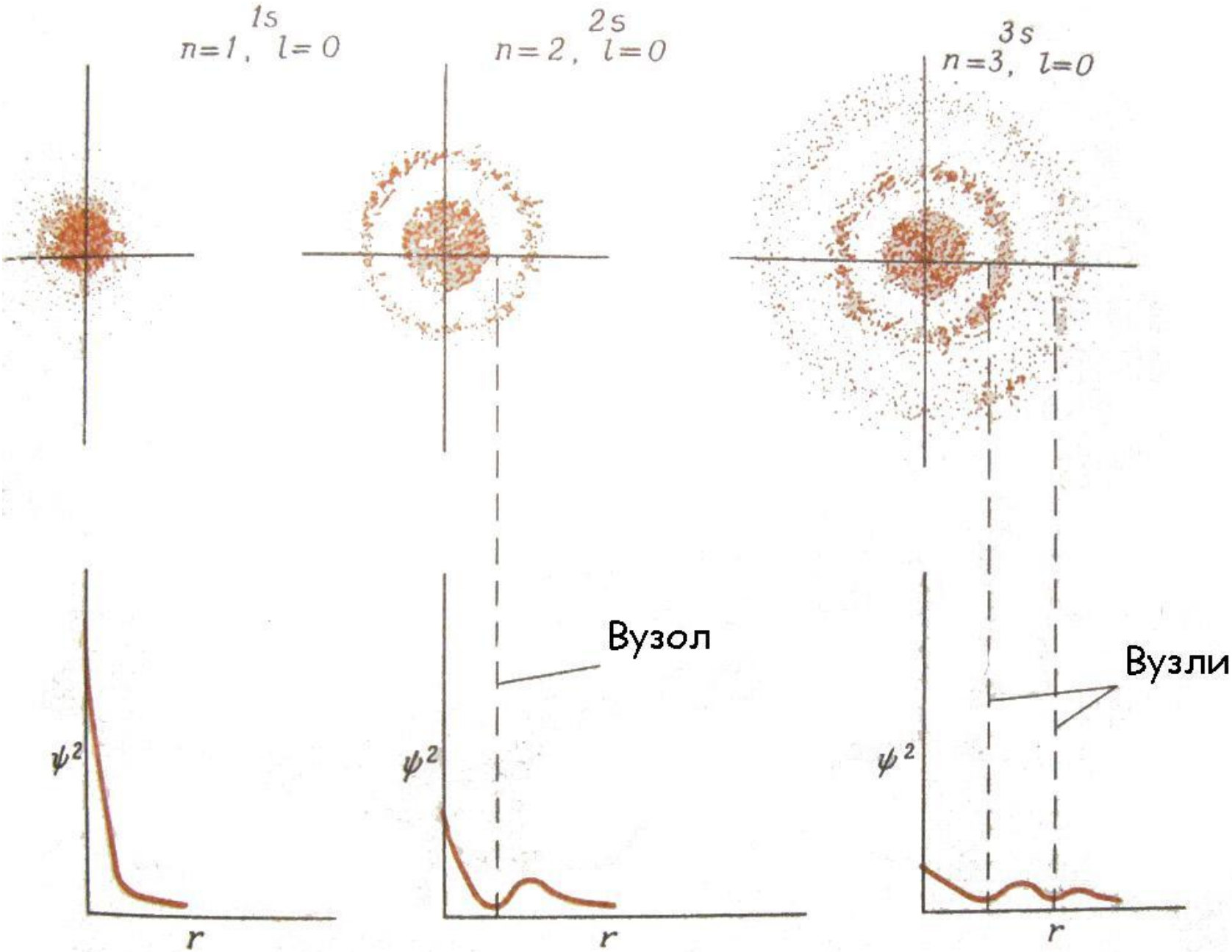
Зону навколо ядра, в якій ймовірність перебування електрону найбільша, називають орбіталлю

Хвильове рівняння має багато рішень, але стаціонарному стану електрона відповідає тільки одна дозволена комбінація трьох квантових чисел

(n, ℓ, m), яка однозначно описує одну орбіталь.

Квантово-механічні розрахунки показують, що для атома гідрогену максимальна електронна густина зосереджена на такій відстані від ядра атома, яка відповідає радіусу орбіти електрона згідно з теорією Н. Бора.


z
y
x


1s
n=1, l=0
2s
n=2, l=0
3s
n=3, l=0
Вузол
Вузли
ψ²
r
ψ²
r
ψ²
r

Квантові числа

Головне квантове число n

Головне квантове число n визначає енергетичний рівень та загальний запас енергії електрона в атомі

n	1	2	3	4	5	6	... ∞
	K	L	M	N	O	P	

Від головного квантового числа залежить також розмір орбіталі

Залежність енергії електрона від головного квантового числа

$$E = -\frac{const}{n^2}$$

E – це та енергія, яку необхідно витратити, щоб відірвати електрон від атома (перевести електрон з n-ного енергетичного рівня на бескінечну відстань)

Const для кожного атома своя і залежить від зряду ядра (Z)

для атому H

$$E = -\frac{13,6}{n^2} ев$$

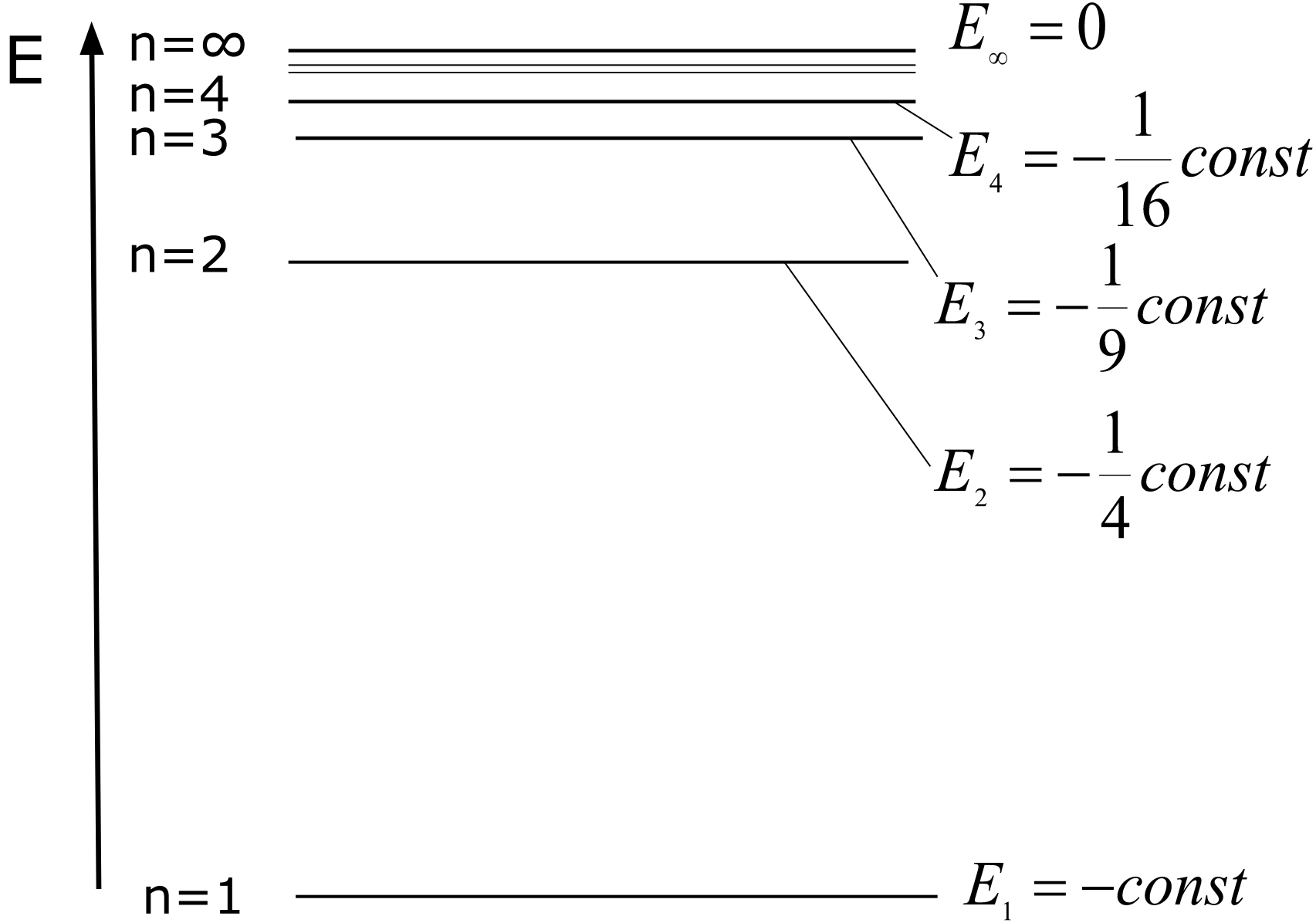
E змінюється дискретно, оскільки n змінюється дискретно

$$n = 1 \qquad E_1 = -const$$

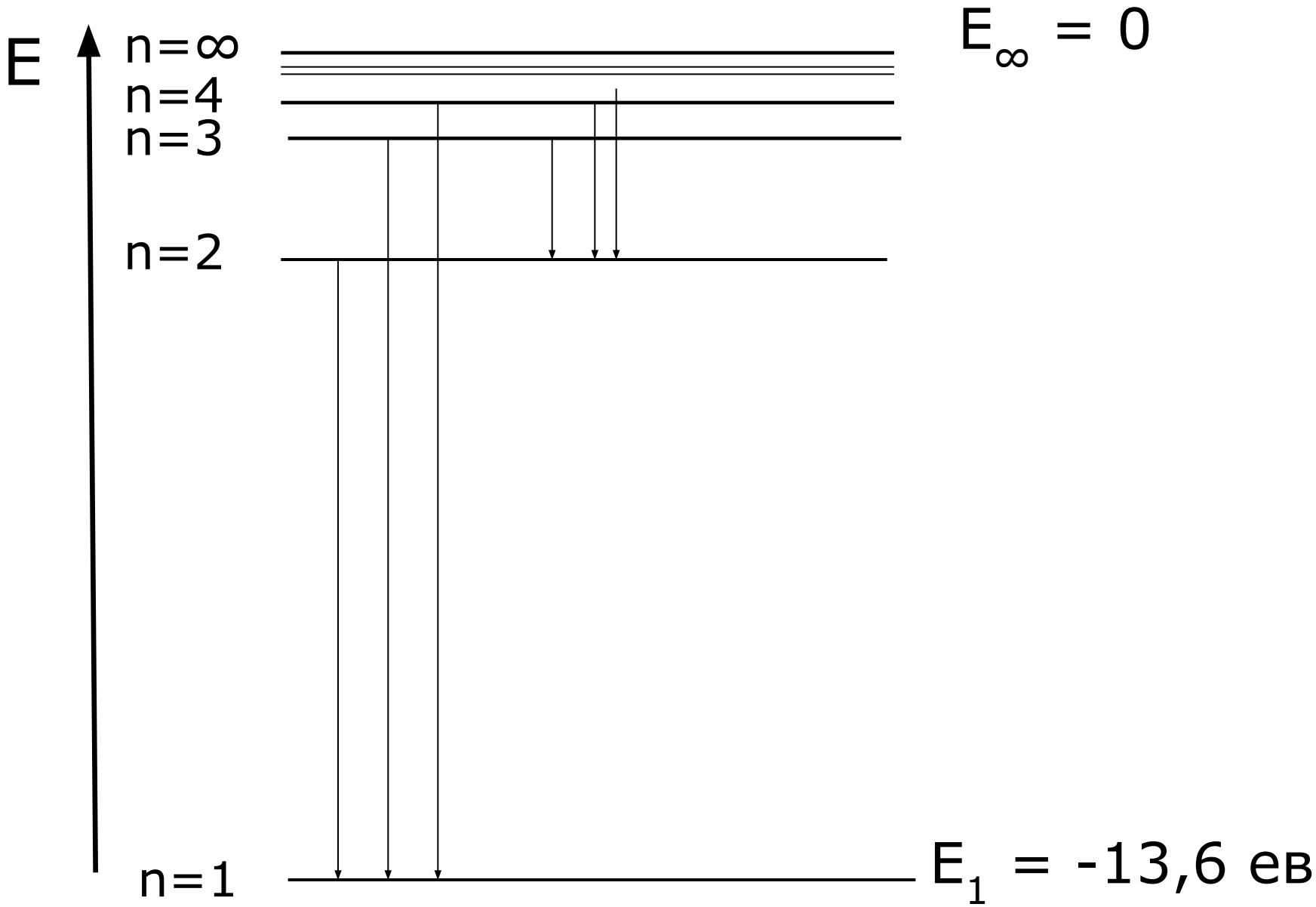
$$n = 2 \qquad E_2 = -\frac{const}{4}$$

$$n = 3 \qquad E_3 = -\frac{const}{9}$$

$$n = \infty \qquad E_\infty = 0$$


E
n=∞
n=4
n=3
n=2
n=1
$E_\infty = 0$
$E_4 = -\frac{1}{16} const$
$E_3 = -\frac{1}{9} const$
$E_2 = -\frac{1}{4} const$
$E_1 = -const$

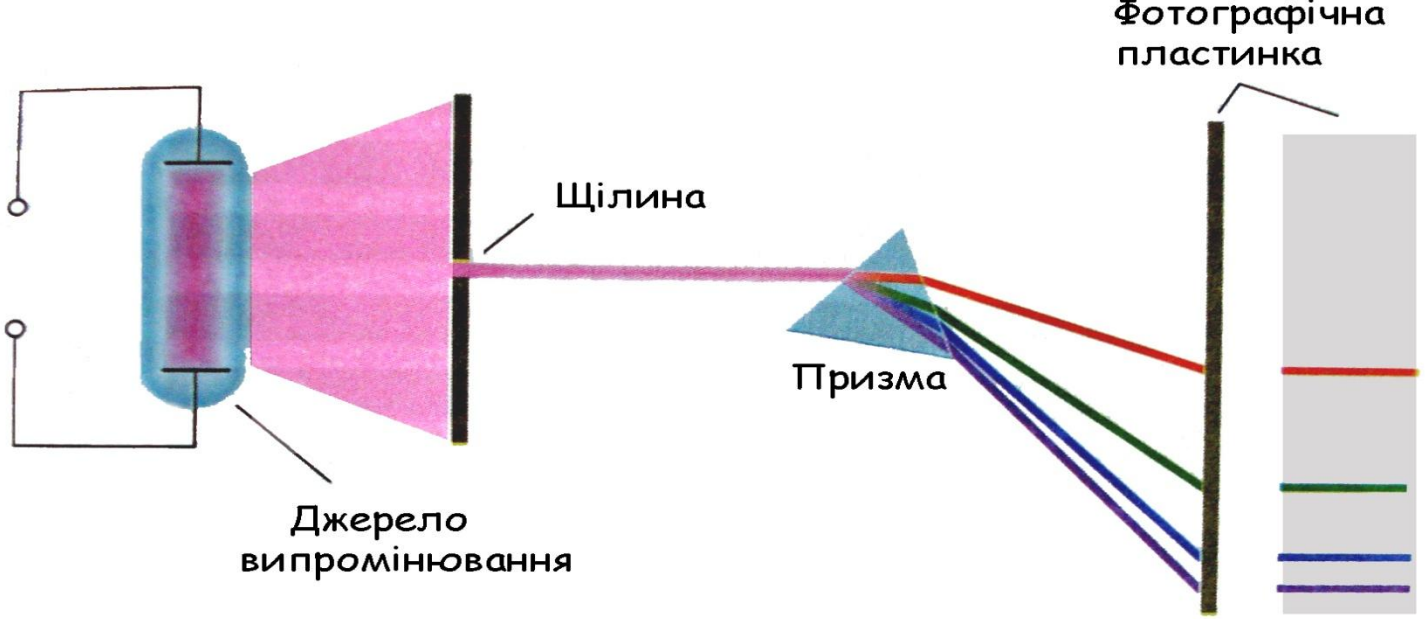
Пояснення спектру атому H

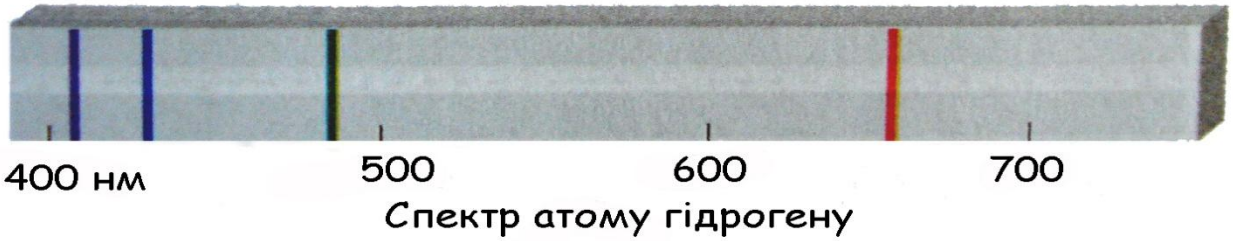


Переходи на К-рівень
(2→1, 3→1, 4→1,...)
К-серія ліній (Серія Лаймана)
для Н знаходиться в ультрафіолетовій частині спектра

Переходи на L-рівень
(3→2, 4→2, 5→2,...)
L-серія ліній (серія Бальмера),
для Н знаходиться у видимій частині спектра

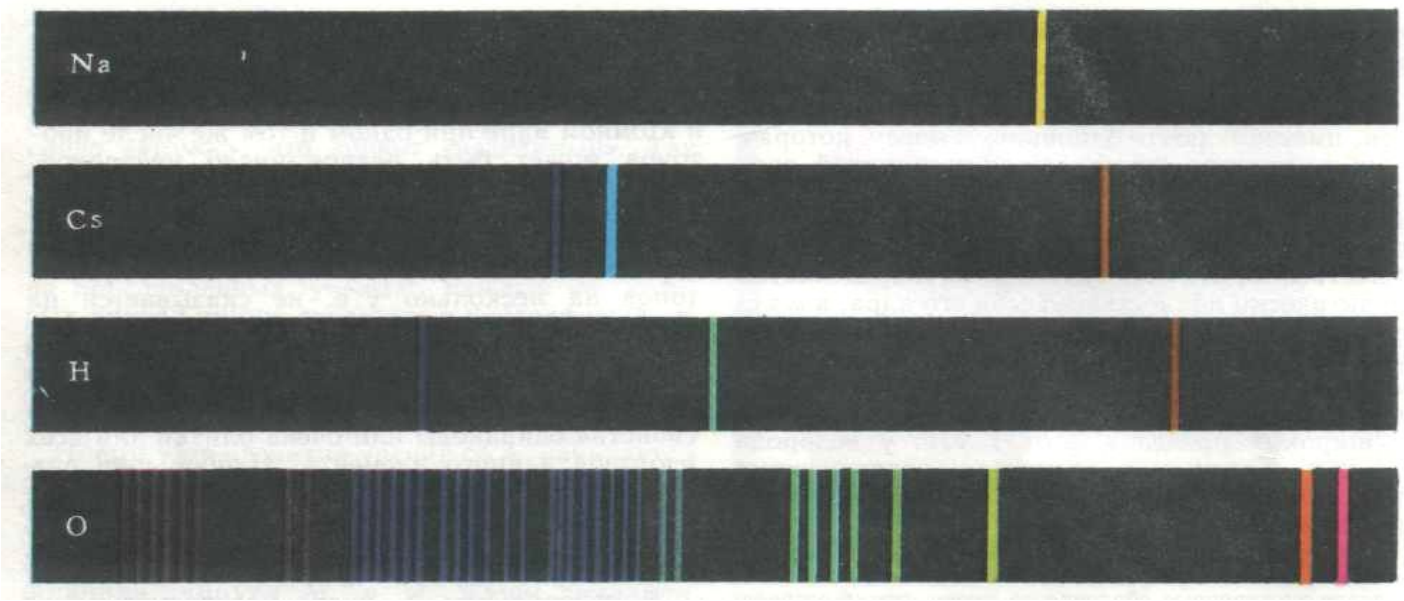
М-серія ліній (серія Пашена),
для Н знаходиться в інфрачервоній частині спектра





3→2	4→2	5→2	6→2
червона	зелена	синя	фіолетова
656нм	486нм	434нм	364нм

Для багатоелектронних атомів спектри виявлялися мультиплетними,



а це означає, що енергія електрона залежить не тільки від n

Орбітальне квантове число ℓ

Орбітальне квантове число ℓ визначає підрівень. Орбітальне квантове число ℓ пов'язане з головним квантовим числом n і набуває значень відповідно до номера енергетичного рівня

В межах рівня ℓ набуває значень від 0 до n-1

0	1	2	3
s	p	d	f

Від орбітального квантового числа залежить форма і енергія орбіталі

$n = 1 \quad \ell = 0(1s)$

$n = 2 \quad \ell = 0(2s) \quad \ell = 1(2p)$

$n = 3 \quad \ell = 0(3s) \quad \ell = 1(3p) \quad \ell = 2(3d)$

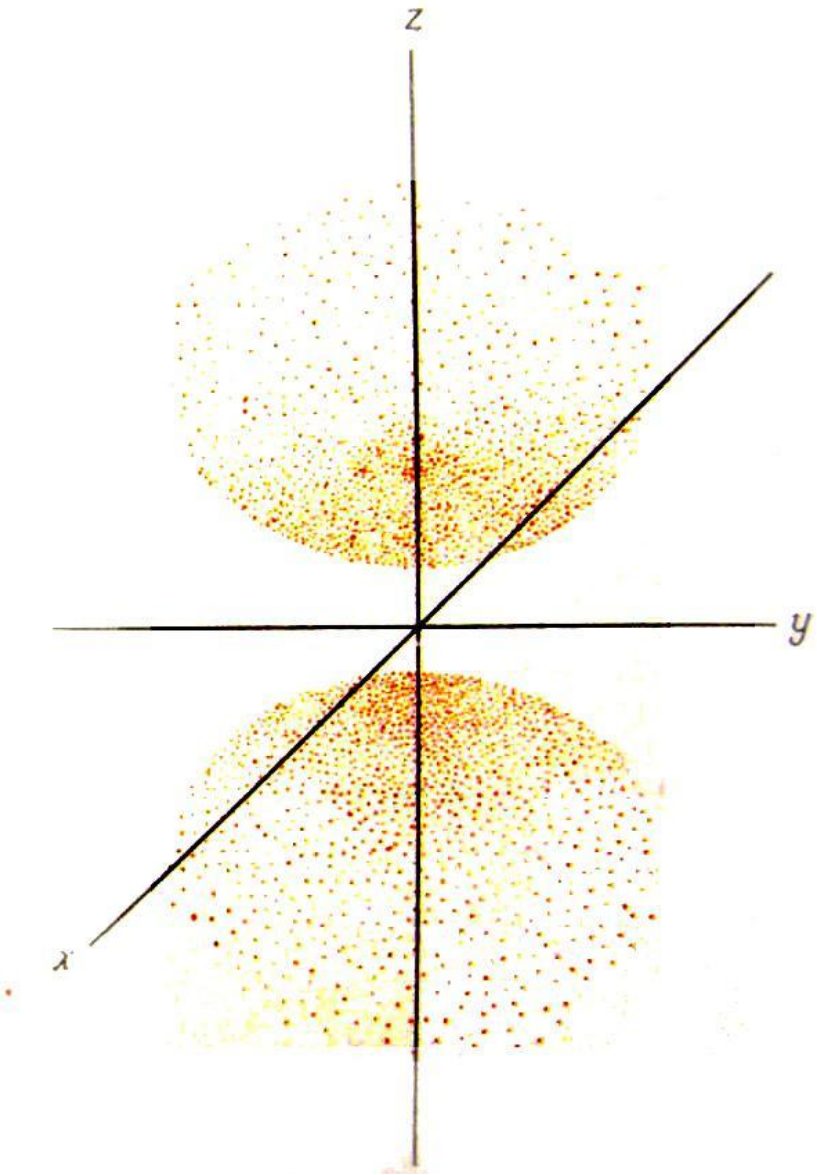
1s

2s

3s

$\ell = 1$

p- орбіталь



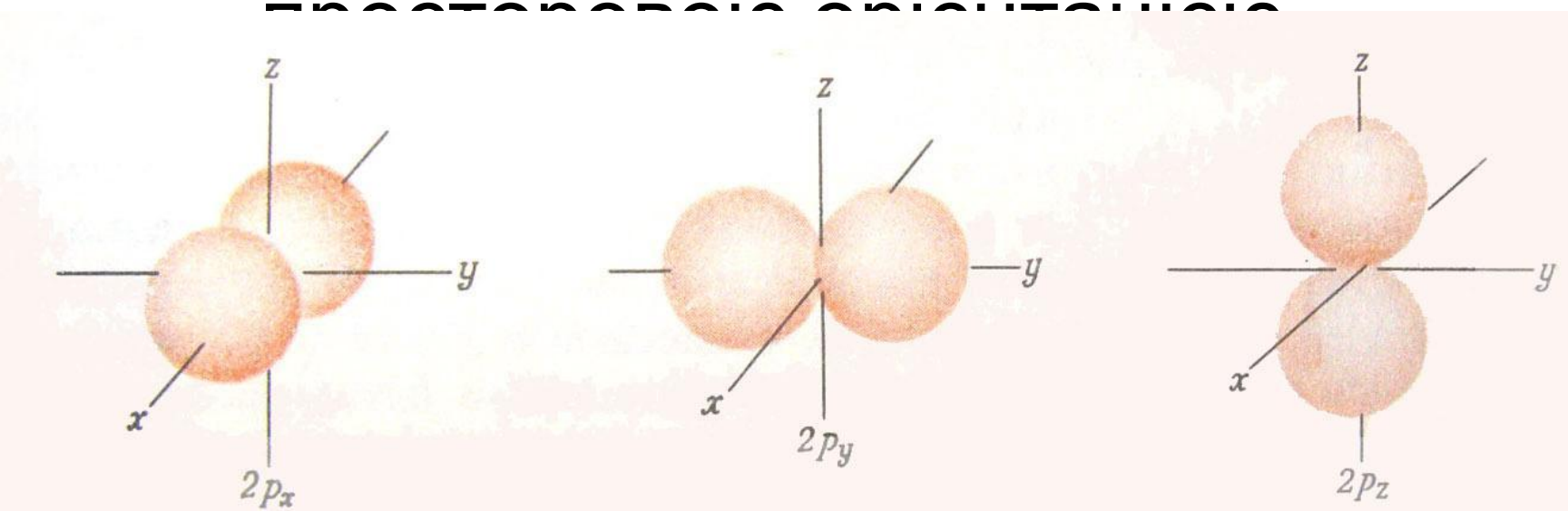
Магнітне квантове число m

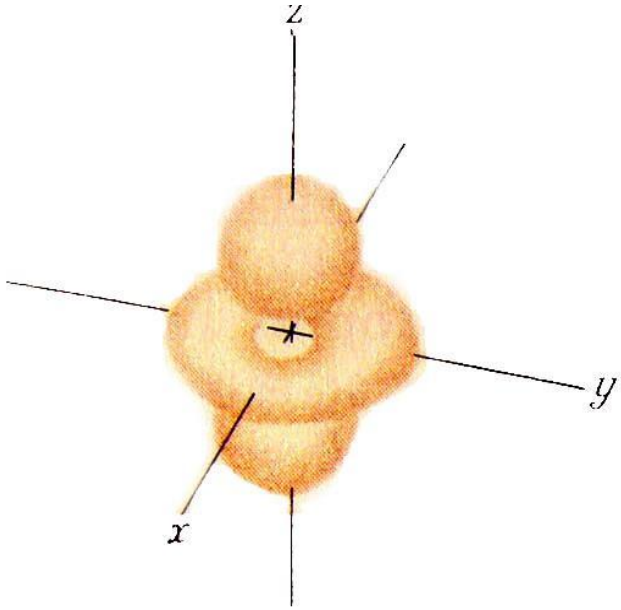
Магнітне квантове число m пов'язане з просторовою орієнтацією електронних орбіталей атома. Воно набуває значень від - ℓ до + ℓ, у тому числі й 0

Всього на підрівні магнітне квантове число m має (2ℓ + 1) значень, а на рівні – n^2 значень

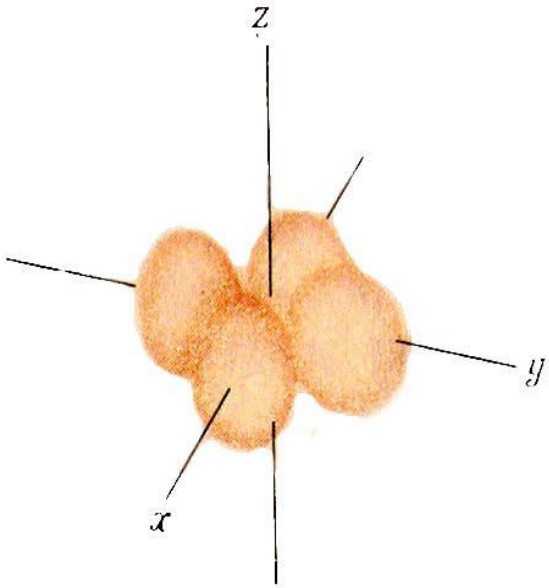
ℓ	Підрі-вень	m	Число орбіталей $2\ell + 1$	Схематичне позначення
0	s	0	1	
1	p	-1 0 1	3	
2	d	-2 -1 0 1 2	5	
3	f	-3 -2 -1 0 1 2 3	7	

Кожному значенню магнітного квантового числа m відповідає одна електронна орбіталь з визначеною

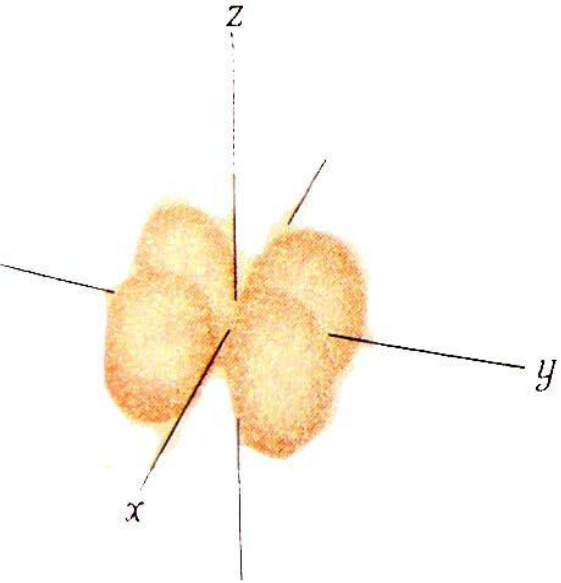




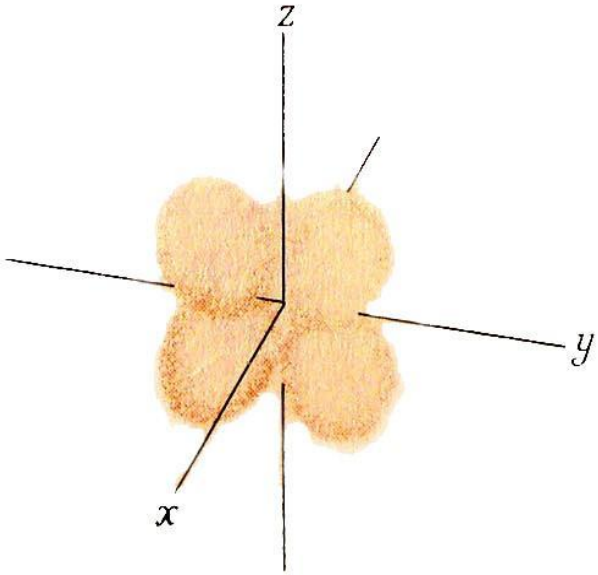
d_{z^2}



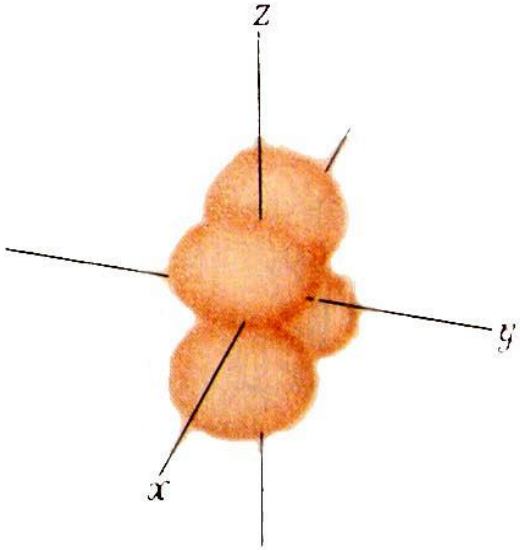
$d_{x^2-y^2}$



d_{xy}



d_{yz}



d_{xz}

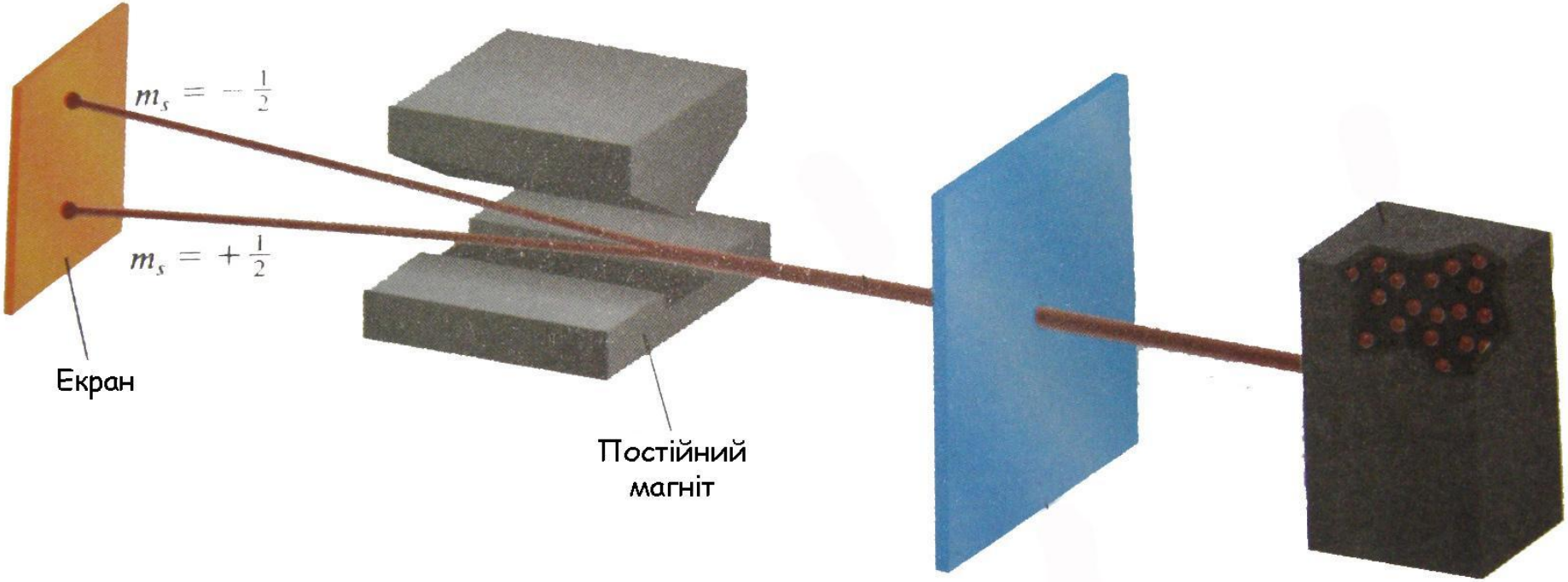
Кожній орбіталі певного підрівня відповідає визначений набір трьох квантових чисел

{ n, ℓ, m}

3p

n	3	3	3
ℓ	1	1	1
m	-1	0	+1

Спін електрона



Було встановлено, що електрон в атомі має власну фундаментальну властивість, яку назвали спіном.

Спін виявляється в існуванні в електронів власного моменту імпульсу і спорідненого з ним магнітного моменту.

В теорію будови атома введене ще спінове квантове число m_s.

Воно може мати тільки два значення: +1/2 і -1/2

$$\uparrow m_s = +\frac{1}{2} \qquad \downarrow m_s = -\frac{1}{2}$$

Принцип Паулі

1924р.

Німецький фізик В. Паулі сформулював важливий квантово-механічний закон, названий принципом заборони Паулі :

В атомі не може бути двох електронів, у яких усі чотири квантові числа були б однакові.

Фізичний зміст цього принципу полягає в тому, що в одному й тому самому місці простору два однакові електрони одночасно знаходитись не можуть. Саме тому два електрони можуть займати одну орбіталь лише за умови, що вони мають протилежні спіни. Кожна орбіталь незалежно від того, де вона розміщена, в атомі чи молекулі, може мати максимум два електрони.

Їх позначають так ↓↑

Електронна оболонка	n	Під-рівень		Енергетичні стани на підрівнях		n^2	$2(2\ell+1)$	$2n^2$
		ℓ	Позначення	m	$2\ell+1$			
K	**1**	**0**	**1s**	**0**	**1**	**1**	**2**	**2**
L	**2**	**0** **1**	**2s** **2p**	**0** **-1 0 1**	**1** **3**	**4**	**2** **6**	**8**
M	**3**	**0** **1** **2**	**3s** **3p** **3d**	**0** **-1 0 1** **-2 -1 0 1 2**	**1** **3** **5**	**9**	**2** **6** **10**	**18**
N	**4**	**0** **1** **2** **3**	**4s** **4p** **4d** **4f**	**0** **-1 0 1** **-2 -1 0 1 2** **-3 -2 -1 0 1 2 3**	**1** **3** **5** **7**	**16**	**2** **6** **10** **14**	**32**