Будова атома

Експериментальні докази складності будови атома

Назва відкриття	Дата відкриття, ім’я вченого	Суть відкриття
Катодні промені	1879 р., У.Крукс (Англія)	Промені, які виникають у скляній трубці, що містить розріджений газ, під дією високої напруги. Викликають свідчення газів, відхиляються в магнітному і електричному полях
Явище фотоефекту	1887 р., Г.Герц (Німеччина), А.Столєтов (Росія)	Вибивання світлом із пластинок деяких металів заряджених частинок
Рентгенівське випромінювання	1895 р., І.Пулюй (Україна), К. Рентген (Німеччина)	Електромагнітне випромінювання з малою довжиною хвилі, що виникає при зіткненні катодних променів з атомами елементів
Радіоактивність	1896 р., А.Беккерель (Франція) 1898 р., П.Кюрі, М. Складовська-Кюрі (Франція)	Явище самочинного випромінювання ураном невидимих променів, які здатні проникати крізь різні речовини, засвічувати фотоплівку. Відкриття нових радіоактивних елементів – Полонію і Радію
Встановлення природи катодних променів	1897 р., Дж.Томсон (Англія)	Дж.Томсон довів, що катодні промені це частинки, які несуть від’ємний заряд і назвав їх електронами
Встановлення неоднорідності радіоактивного випромінювання і його природи	1899 р., Е Резерфорд (Нова Зеландія)	Під дією магнітного поля радіоактивне випромінювання розщеплюється на три пучки – α, β і γ-випромінювання.
Відкриття квантових властивостей світлової енергії	1900 р., М. Планк (Німеччина)	Випромінювання і поглинання електромагнітних хвиль відбувається певними порціями, які назвали квантами
Відкриття ядра атома	1911 р., Е. Резерфорд (Нова Зеландія)	При пропусканні α-частинок (ядер атома Гелію $^{4}_{2}He$) крізь тонку металеву фольгу змінюється траєкторія деяких α-частинок, а одна з 10 тис. α-частинок відбивається під кутом 180°
Дифракція електронів	1927 р., К.Девісон, Л.Джамер (США)	Явище відхилення потоку електронів від прямолінійності. Електрони відбивалися від нікелевої

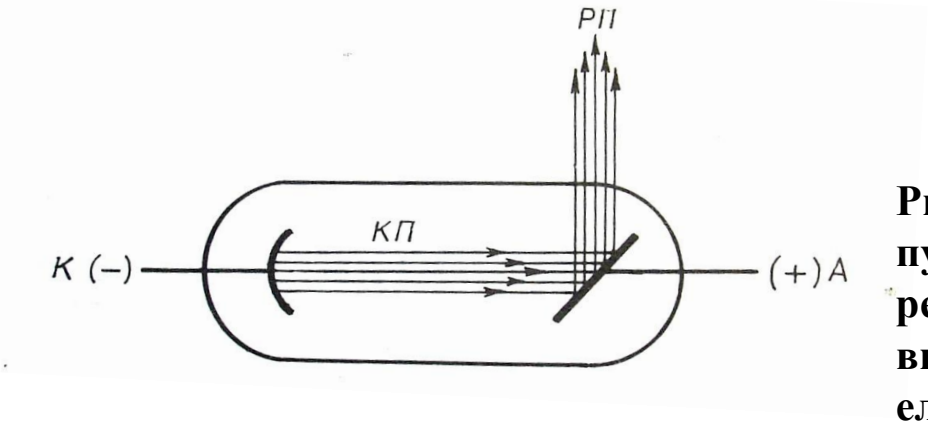
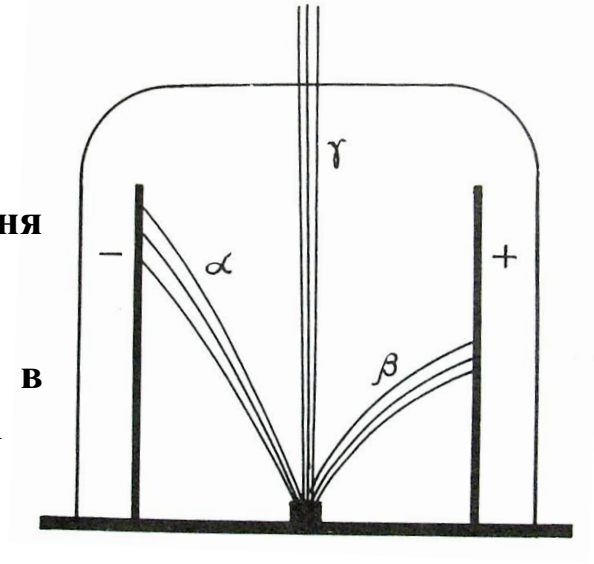


Рис.1. Катодні промені

Рис.2. Розщеплення пучка рентгенівського випромінювання в електричному полі



У. Крукс (1869) визначив значення відношення заряду елементарної частинки до маси:

$$\frac{e}{m} = 1{,}759 \cdot 10^{8}\ \textbf{Кл/г}$$

В 1910 р. Міллікен експериментально визначив заряд електрону методом зрівноваження зарядженої краплі в електричному полі. Виявилось, що незалежно від походження заряду та матеріалу крапель повний їхній заряд завжди кратний значенню $1{,}602 \cdot 10^{-19}$ Кл тобто елементарному заряду електрона

Звідси легко обчислити масу електрона: $\dfrac{e}{e/m} = 9{,}109 \cdot 10^{-28}$ **г.**

Суттєвий вклад провело відкриття явища **радіоактивності – здатності деяких елементів випромінювати невидиме проміння, яке проникає крізь речовини іонізує гази, засвічує фотоплівку. Такі елементи називають радіоактивними.**

Модель Томсона

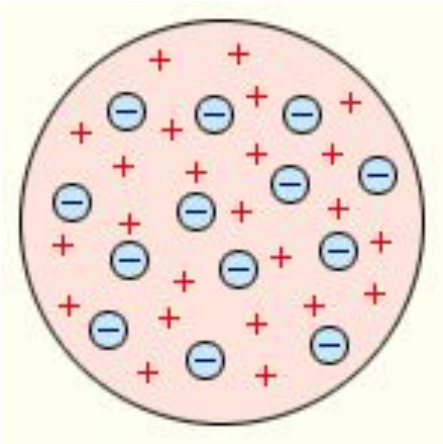


Рис. 3. Модель Томсона

Чичерін (1888) розглядав атом як систему, що складається з позитивно зарядженої маси та негативних оболонок, які її оточують. Перрен (1901) уявляв атом складеним із позитивно зарядженого ядра, оточеного негативними електронами, які рухаються по певних орбітах.

Згодом на основі експериментальних даних **У.Томсон (Кельвін) запропонував розглядати атом як хмарку позитивної електрики з вкрапленими в неї електронами .**

Модель Резерфорда

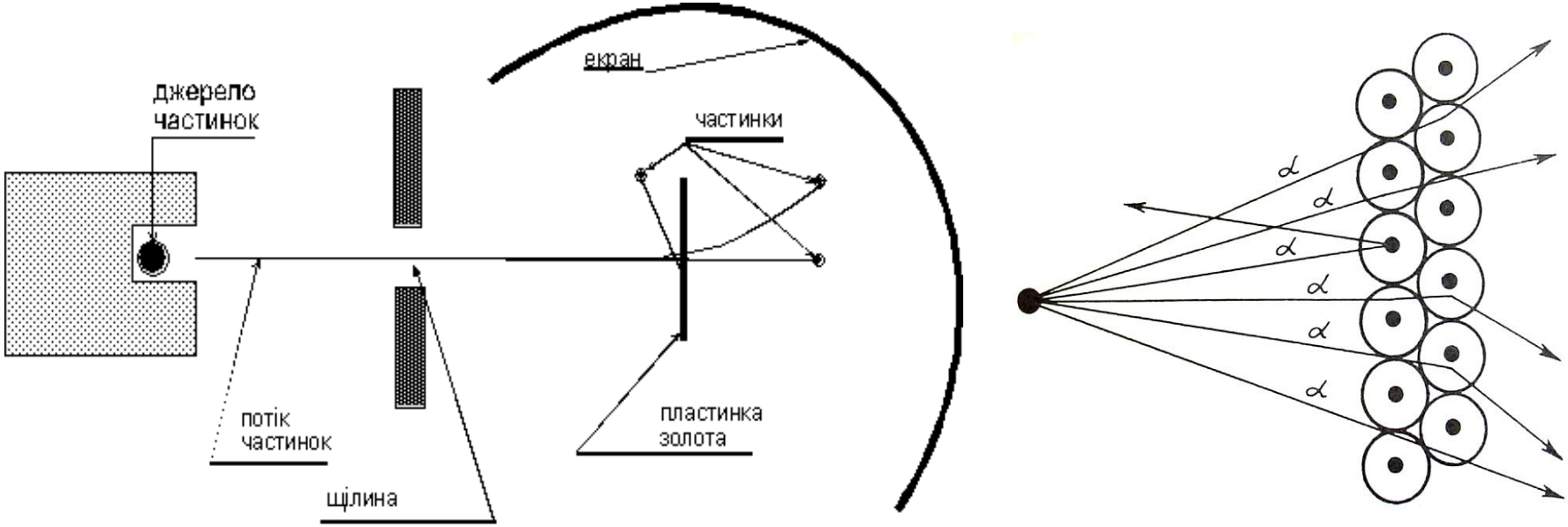


Рис. 4. Дослід Резерфорда 1911р.

Було встановлено, що більшість α-частинок проникла крізь металеві пластинки не змінюючи напрямку свого руху, деякі з них відхилились від прямолінійного шляху на невеликі кути і тільки окремі (одна з 10 тис.) були відкинуті назад. Це суперечило моделі Томсона, тому Резерфорд запропонував планетарну модель будови атома, відповідно якій – в центрі атома міститься невеличке але масивне ядро, навколо якого на значній відстані по орбітах рухаються електрони, сумарний негативний заряд яких чисельно дорівнює позитивному заряду ядра.

Між ядром і електронами діють електростатичні (кулонівські) сили , зрівноважені відцентровими силами, що виникають внаслідок руху електрону:

$$F_1 = \frac{e^2}{r^2} = \frac{m\upsilon^2}{r} = F_2$$

де :

- e **–заряд електрону,**
- m **–маса електрону,**
- υ **– швидкість електрону**
- r **– радіус орбіти по якій рухається електрон,**
- F_1 **– кулонівська сила,**
- F_2 **– відцентрова сила.**

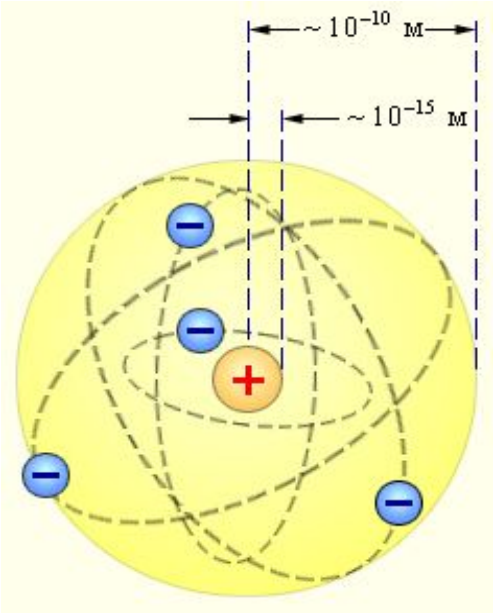


Рис. 5 Планетарна модель Резерфорда

Відхилення α-частинок, повинно бути тим більшим, чим більший заряд ядра.

За **гіпотезою Ван ден Брука (1913), заряд ядра чисельно дорівнює порядковому номеру елемента в періодичній системі.** Атоми – електронейтральні, а тому кількість електронів в кожному з них рівна відповідному порядковому номеру елемента:

$$Z = N_e = N_{por}$$

де:

Z – заряд ядра,

N_e – сумарна кількість електронів в атомі,

N_{por} – порядковий номер елемента.

Цю гіпотезу підтвердив Мозлі (1913), кількісно досліджуючи рентгенівське випромінювання.

Рентгенівські спектри поділяють на **неперервні (гальмівні)**, які не залежать від матеріалу аноду, та **лінійчасті (характеристичні)**, що складаються з невеликого числа серій ліній і залежать від матеріалу аноду. Частинка при гальмуванні може випромінювати довільну частину своєї енергії, тому спектр є неперервним. Рентгенівський спектр, що характеризує енергетичні переходи внутрішніх електронів атома є **лінійчастим**. Серії його ліній позначають літерами ***K*, *L*, *M*, *N*, *O*, *P*** відповідно до електронних шарів.

Мозлі, вивчивши рентгенівські спектри 38 хімічних елементів, помітив, що для однотипних ліній відповідних серій зі зростанням атомних номерів елементів зменшуються довжини хвиль. На цій підставі він сформулював закон:

- **квадратний корінь із частоти певних ліній однакових серій характеристичного рентгенівського спектру пропорційний атомному номеру елемента:**

$$\sqrt{\nu} = a(Z - b)$$ де:

a – змінний коефіцієнт пропорційності, особливий для кожної лінії спектра;

b – поправка на екранування, яка залежить від лінії спектра і не змінюється від елемента до елемента

$\nu = \frac{c}{\lambda}$ – частота хвилі власного випромінювання елемента з атомним номером Z

c – швидкість світла, λ довжина хвилі.

Закон Мозлі давав змогу визначати точні значення порядкових номерів елементів, а також передбачати положення ще не відкритих елементів у періодичній системі. Для цього потрібно знайти частоту лінії випромінюючого елемента і порівняти її з графіком, одержаним для досліджених елементів.

Основний недолік планетарної моделі атома полягає в тому, що вона суперечить теорії руху електричних зарядів – класичній електродинаміці. Електрон що, обертається навколо ядра, повинен безперервно випромінювати електромагнітну енергію і по спіралі наближатися до ядра. Окрім цього, при безперервному випромінюванні енергії електроном спектр атома повинен бути суцільним а не лінійчастим.

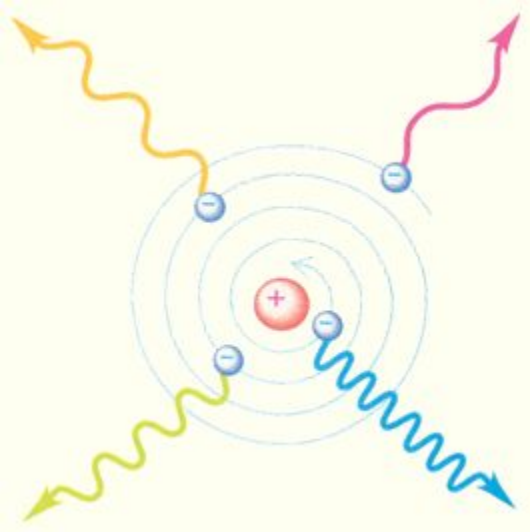


Рис. 7. Нестабільність атома згідно класичної моделі

Кожному хімічному елементу відповідає свій атомний спектр випромінювання, який характеризується певним числом і розташуванням ліній. Наприклад, у видимій частині спектра Гідрогену міститься лише чотири лінії, які позначаються: H_α – **в червоній частині спектра ,** H_β – **в синій та** H_γ **і** H_δ – **в фіолетовій. В ультрафіолетовій частині є ще ряд ліній, які разом із зазначеними утворюють серію Бальмера**.

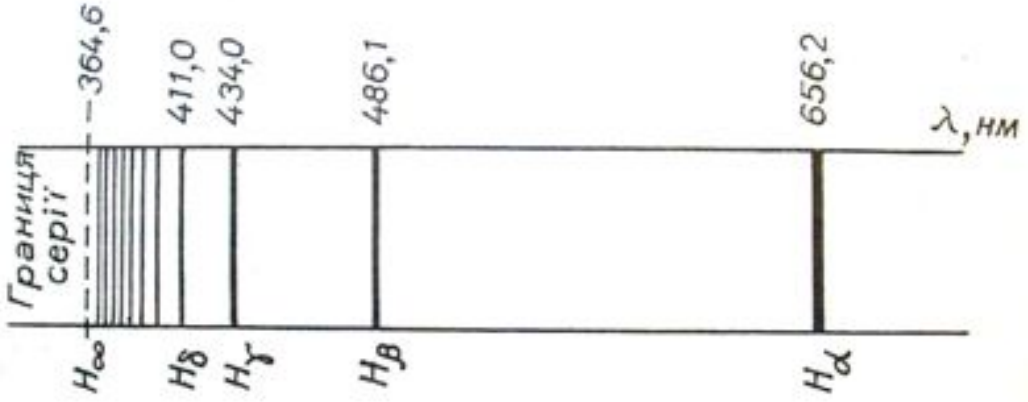


Рис.8. Спектр атома Гідрогену

Довжини хвиль і відповідні хвильові числа ($\tilde{v} = \frac{1}{\lambda}$), можна знайти за емпіричною формулою (Бальмер, 1885):

$$\frac{1}{\lambda} = \tilde{v} = R\left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2}\right),$$

де $R = 1{,}0973 \cdot 10^7$ м$^{-1}$ – стала Рідберга, n – ціле число більше двох.

Підставляючи $n=3$, одержуємо хвильове число для лінії H_α, підставляючи $n=4$ – хвильове число для лінії H_β і т.ін. Крім серії Бальмера ($n > 2$) в спектрі водню міститься ще чотири серії: одна розміщена в ультрафіолетовій області – серія Лаймана , а три в інфрачервоній частині – серії Пашена ($n > 3$), Бреккета ($n > 4$) і Пфунда ($n > 5$). Хвильові числа ліній серій записують формулами, аналогічними формулі Бальмера, але містять вони замість 2^2 відповідно 1^2, 3^2, 4^2, 5^2. Всі п'ять серій можна подати однією загальною формулою (рівняння Рідберга, 1890):

$$\frac{1}{\lambda} = \tilde{v} = R\left(\frac{1}{n_s^2} - \frac{1}{n_i^2}\right),$$

де n_s і n_i – цілі числа, причому $n_s < n_i$

Ці числа можуть набувати лише певних значень, що й зумовлює дискретність значень λ, тобто лінійчастість атомних спектрів.

М.Планк. вивчаючи природу випромінювання нагрітих твердих тіл висловив припущення, що енергія випромінюється і поглинається не безперервно, а дискретно – певними порціями – квантами:

$$E = h\nu$$

де $h = 6{,}626 \cdot 10^{-34}$ Дж/Гц – стала Планка. З рівняння видно, що чим більша частота коливань, або чим менша довжина хвилі, тим більша енергія кванта.

Постулат Планка був обґрунтований Ейнштейном. Аналізуючи явище фотоефекту, він встановив, електромагнітна (промениста) енергія існує лише у формі квантів і випромінювання є потоком фотонів, енергія яких визначається з рівняння Планка.

Квантова механіка вивчає рух мікрооб'єктів. Основна її особливість полягає у імовірнісному характері значень фізичних величин. Рух електрона навколо ядра атома в класичній механіці визначається векторною величиною – моментом кількості руху:

$$\overrightarrow{l} = m\upsilon \overrightarrow{r}$$

де m – маса електрона, υ – швидкість, r – радіус орбіти. Причому значення υ і r можуть змінюватися як завгодно і неперервно. У квантовій механіці енергія електрона, що рухається може змінюватися тільки квантами. Тому швидкість та радіус орбіти, від яких залежать енергія та момент кількості руху, можуть мати тільки певне значення, тобто змінюватися стрибками.

Закони класичної механіки придатні для опису макрооб'єктів, для опису ж мікрооб'єктів використовують квантову механіку.

Модель Бора

Основні положення теорії будови атома на прикладі Гідрогену Бор сформулював у вигляді постулатів:

Перший постулат Бора (умова квантування орбіт): **електрон в атомі може перебувати, не випромінюючи енергії, тільки на стаціонарних, або квантових орбітах з дискретними значеннями енергії.** Таким чином, кутовий момент кількості руху $\overrightarrow{l}$ електрона може дорівнювати тільки цілому числу квантів $\frac{h}{2\pi}$ тобто змінюватися стрибкоподібно:

$$\overrightarrow{l} = n\frac{h}{2\pi} = n\hbar$$

де n – ціле число, $\hbar = 1{,}05 \cdot 10^{-34}$ Дж/Гц – стала Дірака.

Мінімальний радіус орбіти та енергія електрона відповідають значенню $n=1$. Стан атома Гідрогену за цих умов називають нормальним, або основним. Атом Гідрогену, електрон якого перебуває на будь-якій іншій орбіті, називають збудженим. Атоми в основному стані можуть лише поглинати кванти енергії, переходячи при цьому в збуджений стан. Збуджений атом може і поглинати. і випромінювати фотони. Тривалість перебування атома в збудженому стані порядку 10^{-8} с.

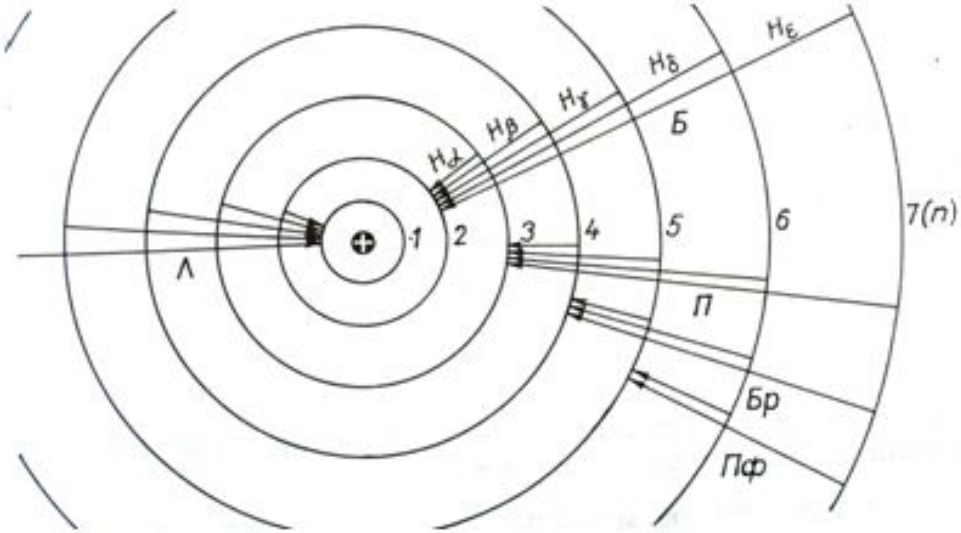


Рис. 9. Модель Бора

Оскільки за Бором, електрон обертається навколо ядра по колових дозволених орбітах, то, комбінуючи квантову умову з класичним виразом $m\upsilon r = n\hbar$ і враховуючи рівність кулонівської сили притягання електрона до ядра та сили відцентрового прискорення електрону,

$$\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r^2} = \frac{m\upsilon^2}{r}$$

можна одержати вирази для радіуса орбіти та швидкості руху електрона:

$$r = \frac{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}{me^2}\cdot n^2$$

$$\upsilon = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0\hbar}\cdot\frac{1}{n}$$

Підставивши в дані рівняння числові значення постійних величин, після обчислень одержимо:

$$r = 5{,}29 \cdot 10^{-11} \cdot n^2 \text{ м}, \quad \upsilon = 2{,}187 \cdot 10^6 \cdot \frac{1}{n} \text{ м/с}.$$

Для $n=1$ радіус першої орбіти атома Гідрогену $r_1 = 0{,}053$нм, для $n=2$ радіус другої орбіти $r_2 = 0{,}053 \cdot 2^2 = 0{,}212$нм, для $n=3$ радіус третьої орбіти $r_3 = 0{,}053 \cdot 3^2 = 0{,}476$нм і т.ін. Тобто радіуси стаціонарних орбіт співвідносяться як квадрати цілих чисел:

$$r_1 : r_2 : r_3 : \ldots : r_n = 1^2 : 2^2 : 3^2 : \ldots : n^2$$

Швидкість руху електрона із збільшенням n зменшується:

$$\upsilon_1 : \upsilon_2 : \upsilon_3 : \ldots : \upsilon_n = 1/1 : 1/2 : 1/3 : \ldots : 1/n$$

Ціле n число називають **головним квантовим числом** і в моделі атома Бора воно відповідає порядковому номеру дозволеної орбіти.

Другий постулат Бора (умова частот): **перехід електрона з одного стаціонарного стану в інший супроводжується випромінюванням або поглинанням кванта електромагнітної енергії, частота якої визначається співвідношенням:**

$$\Delta E = E_2 - E_1 = h\nu$$

Це рівняння дає змогу обчислювати частоти випромінювань, які супроводжують переходи електрона, тобто знаходити спектр атома.

Величини E_1 і E_2 виражають повну енергію електрона тобто суму його кінетичної і потенціальної енергій:

$$E_{kin} = \frac{m\upsilon^2}{2} \text{ та } E_{pot} = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r} = -m\upsilon^2,$$

де $\varepsilon_0 = 8{,}85 \cdot 10^{-12}$ Ф/м – електрична стала. Знак (-) означає, що потенціальна енергія електрона при переході з більш віддаленої орбіти на ближчу до ядра зменшується від максимального значення, умовно прийнятого за нуль за межами атома. Повна енергія електрона:

$$E = E_{kin} + E_{pot} = \frac{m\upsilon^2}{2} - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r} = -\frac{m\upsilon^2}{2}$$

$$E = -\left(\frac{me^4}{32\pi^2\varepsilon_0^2\hbar^2}\right)\cdot\frac{1}{n^2}$$

Із рівняння $\Delta E = E_2 - E_1 = h\nu$, частоту випромінювання можна визначити як $\nu = \frac{E_2 - E_1}{h}$, комбінуючи з виразами вище одержимо вираз для обчислення частоти випромінювання при переході електрону з одного рівня на інший:

$$\nu = \left(\frac{me^4}{64\pi^3\varepsilon_0^2\hbar^3}\right)\cdot\left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2}\right)$$

На основі своєї теорії Н.Бор розрахував спектр атома Гідрогену. Ці теоретичні розрахунки добре співпали з експериментальними даними. Отже теорія будови атома Бора не лише пояснювала фізичну природу атомних спектрів як наслідок електронних переходів, а й давала змогу розраховувати їх.

Зоммерфельд (1916) аналізуючи тонку структуру спектральних ліній обґрунтував можливість руху електрону і по еліптичних орбітах, що по різному розташовані у просторі. Модель Бора була наочною і зручною, але придатною лише для одно електронних систем (атома Гідрогену). Для складних систем не були враховані сили відштовхування між електронами.

Квантово-механічна модель атома – Хвиля де Бройля. Принцип невизначеності Гейзенберга. Рівняння Шредінгера.

Двоїста природа світла наштовхнула де Бройля (1924) на думку про те, що корпускулярно-хвильовий дуалізм властивий будь-яким матеріальним частинкам. З рівнянь Планка ($E = h\nu$) та Ейнштейна ($E = mc^2$) випливає $h\nu = mc^2$, враховуючи $\nu = c/\lambda$ одержуємо основне рівняння хвильової механіки (рівняння де Бройля):

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

– **частинці з масою m, яка рухається з швидкістю υ, відповідає хвиля з довжиною λ.**

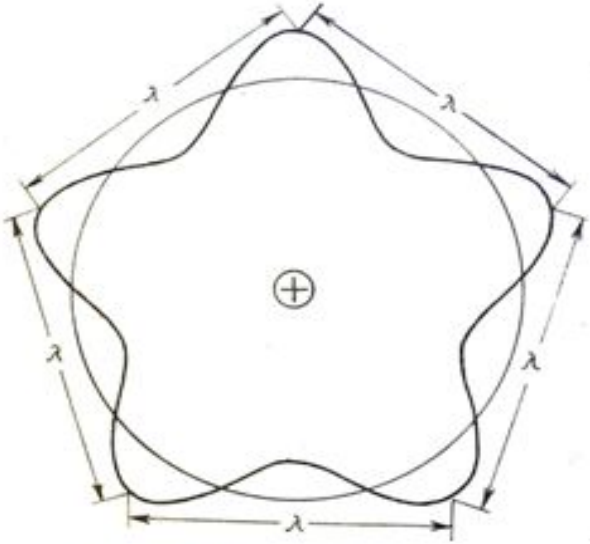


Рис. 10. Хвиля де Бройля

У хвильових властивостях електрона закладено перший принцип квантової механіки. **Другим є принцип невизначеності Гейзенберга (1927), згідно з яким неможливо одночасно точно визначити місце перебування мікрочастинки у просторі та її швидкість або імпульс. Добуток невизначеностей координати та швидкості (або імпульсу) мікрочастинки не може бути меншим від певного значення:**

$\Delta x \cdot \Delta \upsilon \geq \hbar / m$ або $\Delta x \cdot \Delta p \geq \hbar / m$

де Δx, $\Delta \upsilon$,Δp – невизначеності (похибки) у значеннях координати, проекції швидкості та проекції імпульсу на вісь X у даний момент. Аналогічні співвідношення справедливі і для координат Y, Z.

Оскільки рух електрона має хвильовий характер то цей рух описує **хвильова функція** ψ. Щоб знайти таку функцію в просторі потрібно знати її координати (x,y,z). Математично це – $\psi = f(x,y,z)$. Так як рух електрону хвилеподібний то визначення хвильової функції зводиться до знаходження амплітуди електромагнітної хвилі, яку можна визначити із **диференціального рівняння Шредінгера (1926), яке пов'язує хвильову функцію** ψ **з потенціальною і повною енергією електрону**. Для одноелектронного атома рівняння Шредінгера має вигляд $-\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial z^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2}\cdot(E-U)\psi = 0$

Це диференціальне лінійне рівняння другого порядку в частинних похідних, де E – повна енергія електрона, U – потенціальна енергія електрона. Згідно цього рівняння можна обчислити ψ-амплітуду (хвильову функцію). ψ-фунція має обмежений фізичний зміст, проте ψ^2 виражає ймовірність перебування електрону в точці атомного простору, $\psi^2 dv$ – ймовірність перебування електрону в елементі об'єму dv.

Квантові числа

Згідно з квантово-механічною теорією стан електрона в атомі описується значенням чотирьох квантових чисел:

n – головного *l* – орбітального m_l – магнітного s – спінового.

Головне квантове число. Основною характеристикою електрона, який обертається навколо ядра є його енергія. У реальному атомі ця енергія квантова на, тобто набуває певних дискретних значень. Перехід електрону з одного стану в інший пов'язаний із стрибкоподібною зміною його енергії. Головне квантове число визначає радіус квантового рівня (середню віддаль від ядра до ділянки підвищеної електронної густини) або загальну енергію електрону на певному рівні. Межі головного квантового числа n =1,2,3,…∞.

При n = 1 електрон має мінімальну енергію, цей стан називають основним. Квантові стани з E_2 , E_3…E – збуджені. **Стан електрона, який характеризується певним значенням головного квантового числа називають енергетичним рівнем**.

Головне квантове число	1	2	3	4	5	6	7
Енергетичний рівень	*K*	*L*	*M*	*N*	*O*	*P*	*Q*

Максимальна кількість рівнів, яку може мати атом в основному стані, відповідає номеру періода хімічного елементу.

Орбітальне квантове число (n).

При вивчені тонкої структури спектрів було виявлено, що при переході електрону з рівня на рівень, лінійчасті спектри , що виникають складаються з кількох близько розміщених тонких лінії. Це означає що енергетичні рівні складаються з певного числа підрівнів, – **явище мультиплетності**.

Для характеристики енергії електрона на підрівні, або форми електронних орбіта лей, введено орбітальне квантове число. Це число відповідає значенню орбітального моменту кількості руху електрона:

$$M = \frac{h}{2\pi}\sqrt{l(l+1)}$$

l набуває значень l = 1,2,3,…n-1. Кожному значенню відповідає певний підрівень.

l	0	1	2	3
	s	p	d	f

Максимально можлива кількість підрівнів відповідає номеру цього енергетичного рівня n.

Згідно квантово механічних розрахунків s-орбіталі мають форму кулі, p-орбіталі – гантелі, для d- і f-орбіталей характерна дещо складніша форма. Під формою орбіталі розуміють просторову геометричну модель, в межах якої перебування електрона найімовірніше.

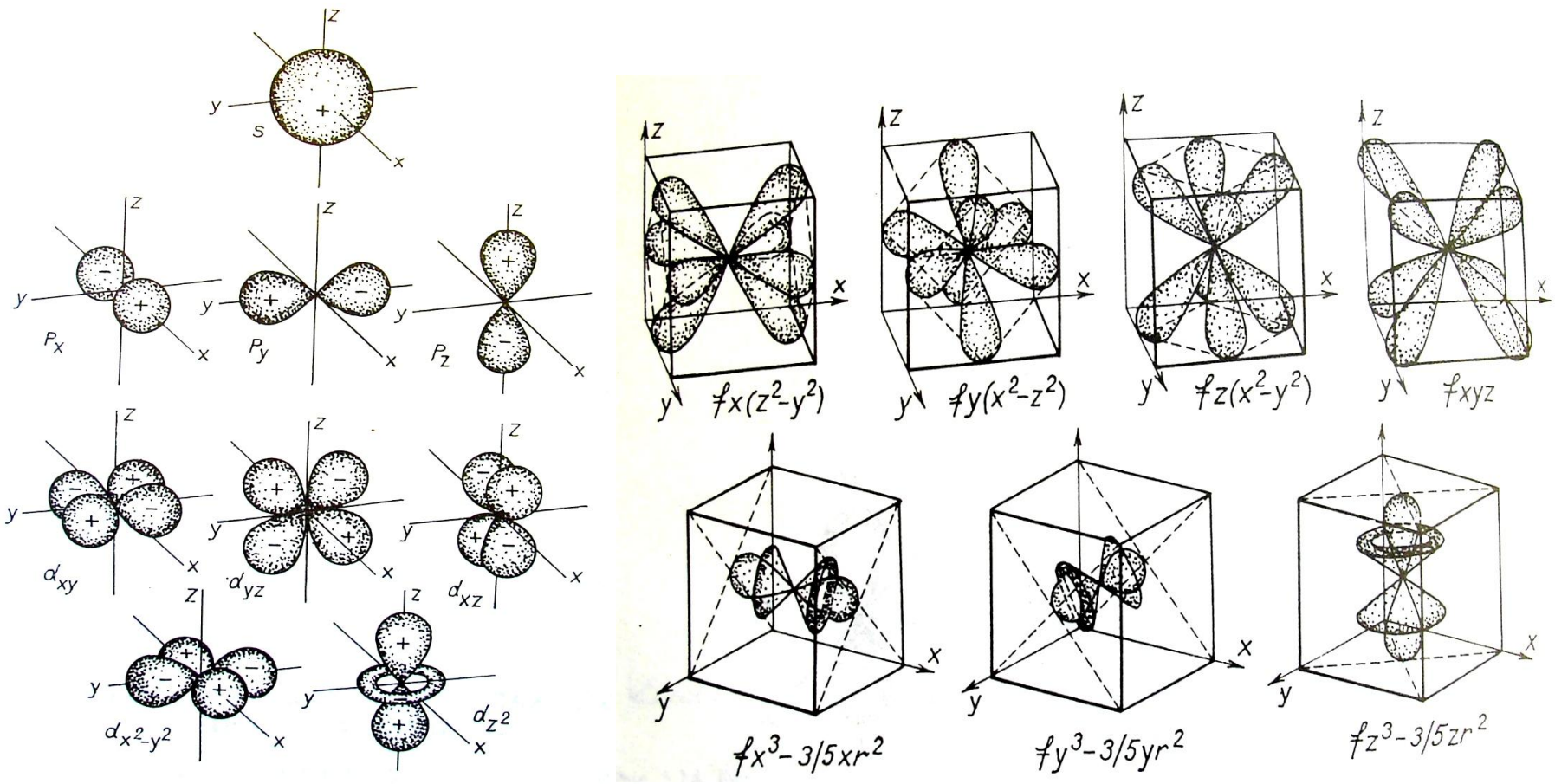


Рис. 11. Просторове представлення орбіталей

Магнітне квантове число (m_l).

У магнітному полі спектральні лінії розщеплюються, тобто з'являються нові близько розташовані (збільшується мультиплетність). Це пояснюється тим, що електрон у атомі на всіх підрівнях (крім *s*) поводить себе подібно до магніту і тому крім орбітального моменту має ще й магнітний. Енергетичні зміщення електрону можна пояснити різним розміщенням орбіта лей одна відносно одної у просторі.

Просторове розміщення електронних орбіталей відносно напрямленості магнітного поля характеризується магнітним квантовим числом m_l. Число m_l приймає значення $m_l = (-l \ldots 0 \ldots + l)$.

Для *s*-електронів – $m_l = 0$

p- електронів – $m_l = -1,0,1$

d- електронів – $m_l = -2,-1,0,1,2$

Повному значенню l відповідає $(2l + 1)$ можливих значень m_l.

Орбіталі з однаковою енергією називають виродженими. Так (*p*-стан тричі вироджений). На відміну від кулястої *s*-орбіталі, *p*-, *d*-, *f*-орбіталі мають у просторі певні напрямки:

p_x – вздовж осей xx', p_y – yy' p_z – zz'. Іноді кожну орбіталь зображують як енергетичну комірку, як квадрат □.

s – одна □ , *p* – три □□□ , *d* – п'ять □□□□□, …

Спінове квантове число (*s*).

На основі вивчення тонкої структури атомних спектрів встановлено, що стан електрона в атомі крім обертання навколо ядра залежить також від їхнього власного руху – спіну. **Спін – це рух електрона навколо своєї осі і цей рух характеризується спіновим квантовим числом** – $+\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$ $\boxed{\uparrow}$ $\boxed{\downarrow}$ $\boxed{\uparrow\downarrow}$

Спіни електрону напрямлені в один бік називають паралельними, в протилежні – антипаралельні.

– Розподіл електронів на енергетичних рівнях і підрівнях.

У багатоелектронних системах електронні оболонки формуються з обов'язковим дотриманням принципу мінімуму енергії, принципу виключення або заборони Паулі, принципу максимальної мультиплетності.

Принцип мінімуму енергії стверджує, що електрони в першу чергу заповнюють вакантні орбіталі з найменшим значенням енергії.

Згідно з **принципом виключення або заборони Паулі (1925),** кожний електрон в атомі має індивідуальний набір чотирьох квантових чисел. Це означає, що на кожній орбіталі може бути не більше двох електронів, спіни яких протилежно напрямлені (антипаралельні). Якби не було заборони, то всі електрони розташувалися б на орбіталі з найменшою енергією.

Тобто в атомі не може бути двох електронів з однаковим значенням всіх чотирьох квантових чисел:

$$n = 1,\ l = 0,\ m_l = 0,\ s = +\tfrac{1}{2}$$

$$n = 1,\ l = 0,\ m_l = 0,\ s = -\tfrac{1}{2}$$

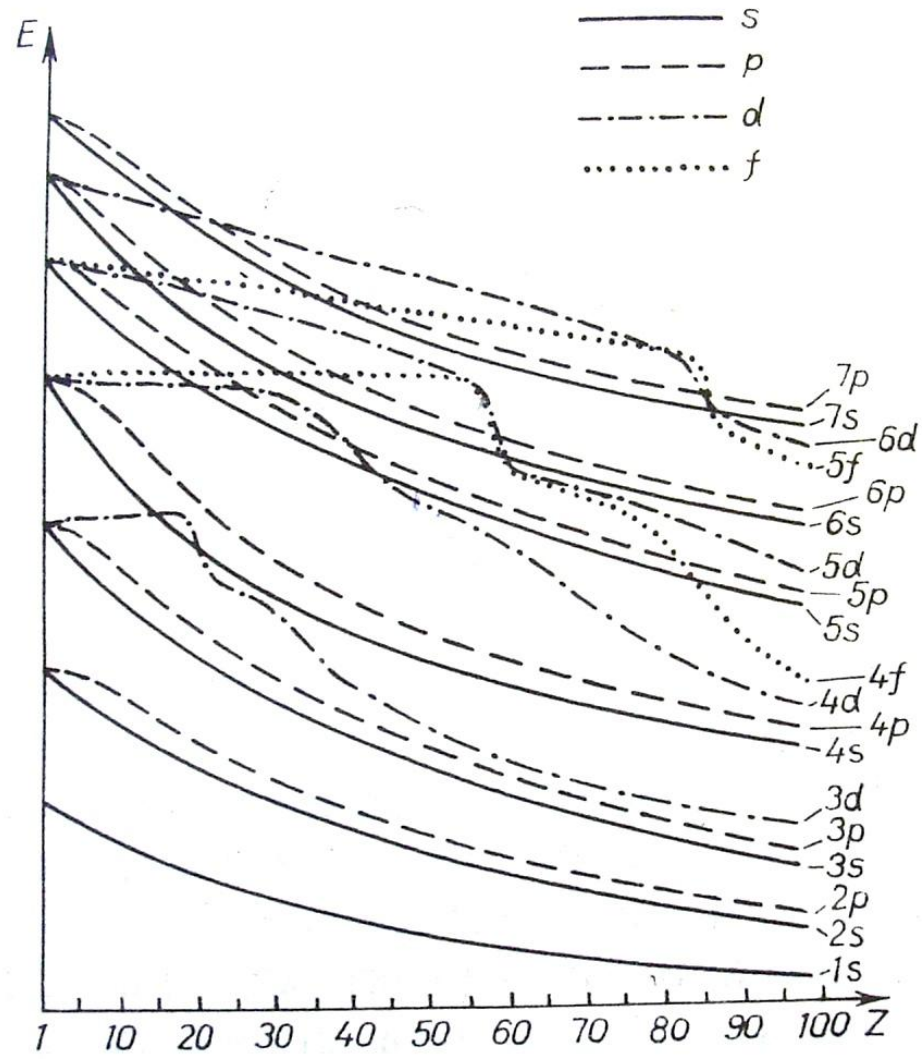
Число можливих енергетичних станів електронів на певному рівні є $N = n^2$, а максимальне число електронів на рівні відповідно $N_{max} = 2n^2$.

Послідовність заповнення атомних електронних орбіта лей залежно від значень n і l проводиться згідно **правил Клечковького**. Він встановив, що енергія електрону зростає із збільшенням суми цих двох квантових чисел (n +l).

- **При збільшенні заряду ядра атома послідовне заповнення електронних орбіталей відбувається від меншого значення суми (n +l) до орбіталей з більшим значенням (n +l).**
- **При однакових значеннях суми (n +l) заповнення відбувається послідовно у напрямку зростання головного квантового числа (n).**

Послідовність заповнення:

$$1s \to 2s \to 2p \to 3s \to 3p \to 4s \to 3d \to 4p \to 5s \to 4d \to 5p \to 6s \to 5d \to 4f \to 6p \to 7s \to 6d \to 5f \to 7p$$

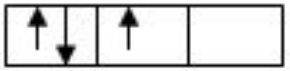


Відповідно до цієї схеми послідовності заповнення енергетичних рівнів електронами змінюватиметься і енергія електронів. На кожному наступному рівні енергія електрона більша ніж на попередньому , а зв'язок з ядром відповідно слабший.

Рис.12. Характеристика енергетичних підрівнів за енергією

Заповнення електронами еквівалентних орбіталей відбувається згідно з **правилом Гунда** – сумарне спінове число електрона певного підрівня має бути максимальним: $s = 1\frac{1}{2}$

$s = \frac{1}{2}$



Приклад:

1. Який підрівень 3d- чи 4p- буде заповнюватися швидше?

$3d - n = 3, l = 2 \quad (n + l) = 5$

$4p - n = 4, l = 1 \quad (n + l) = 5$

Швидше буде заповнюватися 3d-підрівень , тому що в нього менше головне квантове число n.

Сучасне вчення про будову атома

Згідно сучасних уявлень атомні ядра складаються з елементарних частинок **протонів p і нейтронів n**. **Ці частинки (протони і нейтрони) називають нуклонами. Природа p і n визначається масою, зарядом, магнітним моментом і спіном.**

Протон – стабільна елементарна частинка з масою спокою $1{,}673 \cdot 10^{-24}$ г і відносною атомною масою 1,00727 а.о.м., додатнім зарядом +1, $s = +\frac{1}{2}$.

Нейтрон – елементарна частинка з масою спокою $1{,}675 \cdot 10^{-24}$ г, відносною атомною масою 1,00867 а.о.м, без заряду, $s = +\frac{1}{2}$.

Протони і нейтрони утримуються в ядрі специфічними **ядерними силами**, які значно більші за кулонівські сили відштовхування протонів. Ядерні сили короткодіючі (r дії $\approx 10^{-13}$ см). Міцність ядра характеризується енергією яка необхідна для розділення ядра на нуклони (в мільйони раз перевищує енергію хімічного зв'язку)

Масове число (A) визначається кількістю протонів (Z) та нейтронів (N):

$A = Z + N$

Число протонів рівне величині сумарного позитивного заряду, рівне числу електронів, і порядковому номеру елемента:

$Z = N_e = N_{por}$

Приклад:

$^{16}_{8}O \rightarrow (8p, 8n)$ $A = 16$

$Z = 8$

$N_e = 8$

$N = 8$

$^{209}_{84}Po \rightarrow (84p, 125n)$ $A = 209$

$Z = 84$

$N_e = 84$

$N = 125$

В ядрі зосереджена основна маса атома ≈ 99,9%. Якщо просумувати маси протонів і нейтронів, то розрахована маса ядра виявиться більшою. Різницю між ними називають – **дефект маси**.

Маса ядра нукліда гелію $^{4}_{2}He$ = 4.001506 а.о.м., сума мас двох протонів та двох нейтронів складає 4,031882 а.о.м, Δ =0,030376 а.о.м.

Дефект маси характеризує стійкість атомних ядер і енергію зв'язків нуклонів в ядрі.

Ізотопи – атоми з однаковим числом протонів (Z): $^{40}_{20}Ca$, $^{42}_{20}Ca$.

Ізобари – атоми з різним числом протонів (Z) і нейтронів (N), але однаковим числом нуклонів (A): $^{40}_{18}Ar$ (18p, 22 n), $^{40}_{19}Ca$ (19p, 21n).

Ізотони – атоми з однаковим число нейтронів (N):

$^{138}_{56}Ba$ (56p, 82 n), $^{139}_{57}La$ (57p, 82n).

З відкриттям ізотопі було по новому сформульовано поняття хімічний елемент.

Хімічний елемент – вид атомів, що характеризується однаковим зарядом ядра.

Радіоактивні елементи

Радіоактивні елементи – хімічні елементи, всі ізотопи яких є радіоактивні.

Радіоактивні елементи поділяють на **природні** і **штучні**.

Природна радіоактивність – виявляють природні ізотопи (А. Бекерель, 1896).

Штучні радіоактивні елементи – радіоактивні ізотопи, які добувають в лабораторних умовах внаслідок ядерних реакцій (Ф.Жоліо-Кюрі, 1934)

Основні види радіоактивного розпаду:

1.α-розпад – ядро випромінює два протони і 2 нейтрони (ядра Гелію $^{4}_{2}He$)

$^{234}_{92}U \rightarrow ^{230}_{90}Th + ^{4}_{2}He$

2. β-розпад – ядро випромінює електрон (β^-)

$^{210}_{83}Bi \rightarrow ^{210}_{84}Po + \beta^- + \bar{\nu}$, де $\bar{\nu}$ – антинейтрино, елементарна частинка без заряду і маси, але володіє спіном.

$^{11}_{6}C \rightarrow ^{11}_{5}B + \beta^+ + \nu$, де ν – нейтрино, β^+ – позитрон, елементарна частинка з масою електрона та на відміну зарядом (+).

Частинки $\bar{\nu}$ та ν відрізняються між собою лише спіном.

3.Електронне захоплення.

$^{40}_{19}K + e^- \rightarrow ^{40}_{18}Ar + \gamma$

4. Спонтанний поділ ядер – характерний для трансуранових елементів (U^{235}, Th^{232}), – самочинне перетворення ядер, до утворення стійких ізотопів (Pb^{206}, Pb^{208}).

Радіоактивний розпад характеризується періодом піврозпаду ($T_{1/2}$), –час, протягом якого розпадається половина початкової кількості радіоактивного елемента. Для прикладу $T_{1/2}$ $U^{238} = 4{,}5 \cdot 10^9$ р., $T_{1/2}$ $U^{235} = 7 \cdot 10^8$ р.

Радіоактивний розпад підпорядковується закону :

$N_t = N_0 \cdot e^{-\lambda t}$, де N_0 – кількість ядер в початковий момент часу, N_t – кількість ядер що не розпалися в час t, λ – const (ймовірність розпаду ядра, за 1 сек).

Висновки

До кінця XIX ст. вважали, що атом – найменша частинка простої речовини, що він неподільний і незмінний. Однак відкриття катодних променів, рентгенівського випромінювання, лінійчастих спектрів, явища радіоактивності, явища фотоефекту суттєво змінило уявлення про атом, зрозумівши що це складна система.

Модель атома протягом цілого століття зазнавала змін та вдосконалень від теорії Томсона до сучасного представлення засобами квантової механіки.

Ідея Планка про квантування енергії була розвинута Бором, який означив у двох постулатах основні положення теорії будови атома (умова квантування орбіт, та умова частот). Розрахований спектр атома водню добре співпав з експериментальними даними, що спричинило "тріумф Бора"). Зоммерфельд вдосконалив модель Бора, обґрунтувавши можливість руху електрону і по еліптичних орбітах, що по різному розташовані у просторі. Однак модель залишалася придатною лише для одно електронних систем.

Двоїста природа світла наштовхнула де Бройля на думку про те, що корпускулярно-хвильовий дуалізм властивий будь-яким матеріальним частинкам : частинці з масою m , яка рухається з швидкістю υ , відповідає хвиля з довжиною λ. Другими принципом квантової механіки став принцип Гейзенберга про неможливість одночасно точно визначити місце перебування мікрочастинки у просторі та її швидкість або імпульс.

Певний розв'язок запропонував Шредінгер , ввівши поняття хвильової функції, квадрат якої описував ймовірність знаходження електрона в точці навколо атома. Було введено поняття орбіталі – місця найбільш імовірного перебування електрона.

Згідно з квантово-механічною теорією стан електрона в атомі описується значенням чотирьох квантових чисел:

n – головного l – орбітального m_l – магнітного s – спінового.

Головне квантове число характеризує енергетичний рівень, орбітальне – підрівень, магнітне квантове число вказує на просторове розміщення орбіталей, а спінове враховує власний момент руху електрона.

Згідно принципу Паулі, правил Клечковського та Гунда відбувається заповнення електронами орбіталей атома, утворюючи стабільну систему. Згідно сучасних уявлень атом складають елементарні частинки: протони, нейтрони, електрони. Дефект маси вказує на стабільність та міцність такої складної системи. Також з'являються дані про нові елементарні частинки: позитрони, нейтрино, антинейтрино і т.ін, що утворюються в процесі радіоактивного розпаду чи ядерних реакцій. Тепер ми розуміємо, наскільки складною виявилася ще недавно *неподільна* система.