

Химия - основы общей химии (теория)

Анатолий Анатольевич БАРУНИН - лектор

Литература курса химии (ОСНОВНАЯ - 1,2; дополнит.3-6):

1. *А.П.КИСЕЛЕВ, А.А.КРАШЕНИННИКОВ. Основы общей химии: -Уч.пос.2012 г. Номер в библиотеке БГТУ- (1262) - в текстовом формате (книга) и в электронном виде в Курсе химии и в библиотеке БГТУ.*

2. *Учебные пособия и метод.указания кафедры – в электронном виде в Курсе химии, в библиотеке БГТУ <https://www.voenmeh.ru/> и ЭБС «Лань» <https://e.lanbook.com/>*

Учебники для вузов различных авторов:

3. *А.И. Горбунов, А.А. Гуров и др. Теоретические основы общей химии;* **4.** *А.В. Суворов, А.Б. Никольский;* **5.** *В.В. Фролов;* **6.** *Н.В. Коровин*

Химия

Строение вещества

1. Строение атома

2. Химическая связь

3. Строение твердого тела

Химический процесс

4. Химическая термодинамика

5. Химическая кинетика

6. Равновесие в химических системах

7. Электрохимия

8. Коррозия

9. Дисперсные системы

10. Высокомолекулярные соединения

11. Методы контроля и анализа веществ – Аналитическая химия

I. Строение атома

3 этапа развития учения о строении атома

1 – Натурфилософские представления об атомном строении материи.
(5 в. до н.э.) Демокрит – понятие «атом». Эпикур, Аристотель

2 – Химическая гипотеза об атоме, как наименьшей частице химического элемента. Атомы отличаются массой. Парацельс, Бойль, Берцелиус (16-17 в.). До конца 19 в. атом рассматривался как неделимая частица.

3 – Физические модели строения атома (появились на рубеже 19-20 в.)

Описывают сложное строение атома. Появились на основании открытий, исслед.:

Исследование электролиза(1832) Майкл Фарадей

Открытие каналовых (1886) и катодных лучей (1896) Уильям Крукс

Открытие и измерение свойств электрона (1897) Джозеф Джон Томсон

Открытие естественной радиоактивности (1896) Анри Беккерель

Оптические спектры атомов

Основной вывод из исследований и открытий 3-го этапа - **атомы содержат разноименно заряженные частицы (имеют сложное строение)**

Физические модели строения атома

Эрнест Резерфорд - планетарная модель атома (1911 г.)

Атом - сложная частица, состоящая из положительно заряженного ядра ($\sim 10^{-15}$ м, почти вся масса атома в ядре малого размера) и отрицательно заряженных электронов вращающихся вокруг ядра на расстоянии $\sim 10^{-10}$ м (по характеру рассеяния α -частиц тонкими Pt, Ag и Cu металлическими фольгами)

Нильс Бор – теория (модель) строения атома водорода (постулаты) (1913г.)

$E_n = -2\pi^2 e^4 k^2 m / h^2 \cdot 1/n^2$ ($n=1$ $E_1 = -13,6$ эВ; $E_n = -E_1 / n^2$
 $r_n = h^2 / 4\pi^2 e^2 k m \cdot n^2$ $n = 1, 2, 3, \dots$ Позволила рассчитать E эл-на (объясняла оптический линейчатый спектр атома водорода) и радиус r_n электронных орбит. Не объясняла тонкую структуру оптических спектров, образование хим.связи

Луи де Бройль, Вернер Гейзенберг, Макс Борн, Эрвин Шредингер и др. - квантово-механическая модель (1925-27 г.г. по настоящее время)

Квантовая (волновая) механика - теория, устанавливающая способ описания и законы движения микрочастиц. Базируется на 2-х основных гипотезах-постулатах Л.де Бройля (корпускулярно-волновой дуализм свойств материи) и В. Гейзенберга (принцип неопределенности для микрочастиц)

Корпускулярно-волновой дуализм свойств материи

[проблема природы лучистой энергии - эл.магн.излучения(ЭМИ)]

Частица (корпускула): m - масса
 $p = mv$ - импульс
 $E = mv^2/2$ - кинетическая энергия

Волна: λ - длина волны
 ν - частота
 T - период

Электромагнитное излучение

Макс Планк **$E = h \cdot \nu$** $h \cdot \nu$ – энергия кванта ЭМИ нагретого тела (дискретная порция, квант, частица)
1900 г.

$h = 6,6262 \cdot 10^{-34}$ Дж · с - постоянная Планка
 ν - частота излучения [s^{-1}]

Альберт Эйнштейн **$E = m \cdot c^2$** квант энергии любого ЭМИ – частица - **фотон**
1905 г.

m - масса фотона, кг

$c = 2,9979 \cdot 10^8$ м/сек - скорость света

$$h\nu = mc^2 \quad \nu = \frac{c}{\lambda} \quad \longrightarrow \quad m = \frac{h}{c\lambda} \quad \longrightarrow \quad \lambda = \frac{h}{m \cdot c} \quad \longrightarrow \quad \lambda = \frac{h}{p}$$

Корпускулярно-
волновой дуализм

$p = m \cdot c$ - импульс
фотона

Луи де Бройль (1925)

(дуализм-общее свойство материи, а не только ЭМИ) - гипотеза-постулат о связи импульса P любого движущегося материальн.объекта с длиной волны λ , представляющей волновой хар-р его движения

Материальный объект (частица): m - масса, v - скорость, λ - длина волны (наз. волна де Бройля)

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{m \cdot v}$$

Если электрон обладает волновыми свойствами должна наблюд. дифракция:

Кинетическая энергия - $E_k = \frac{m \cdot v^2}{2}$

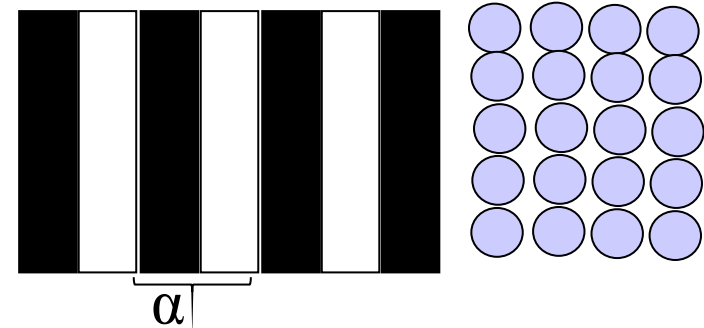
Длина волны - $\lambda = \frac{h}{\sqrt{2 \cdot m \cdot E_k}}$ $m = 9,11 \cdot 10^{-31}$ кг

Для эл-на $E_k = 100$ эВ ($1\text{эВ} = 1,602 \cdot 10^{-19}$ Дж), $\lambda = 1.2 \text{ \AA}$ ($1 \text{ \AA} = 10^{-10}$ м)

Дифракционная решетка для эл-на - кристалл. плоскости Ме монокристаллов

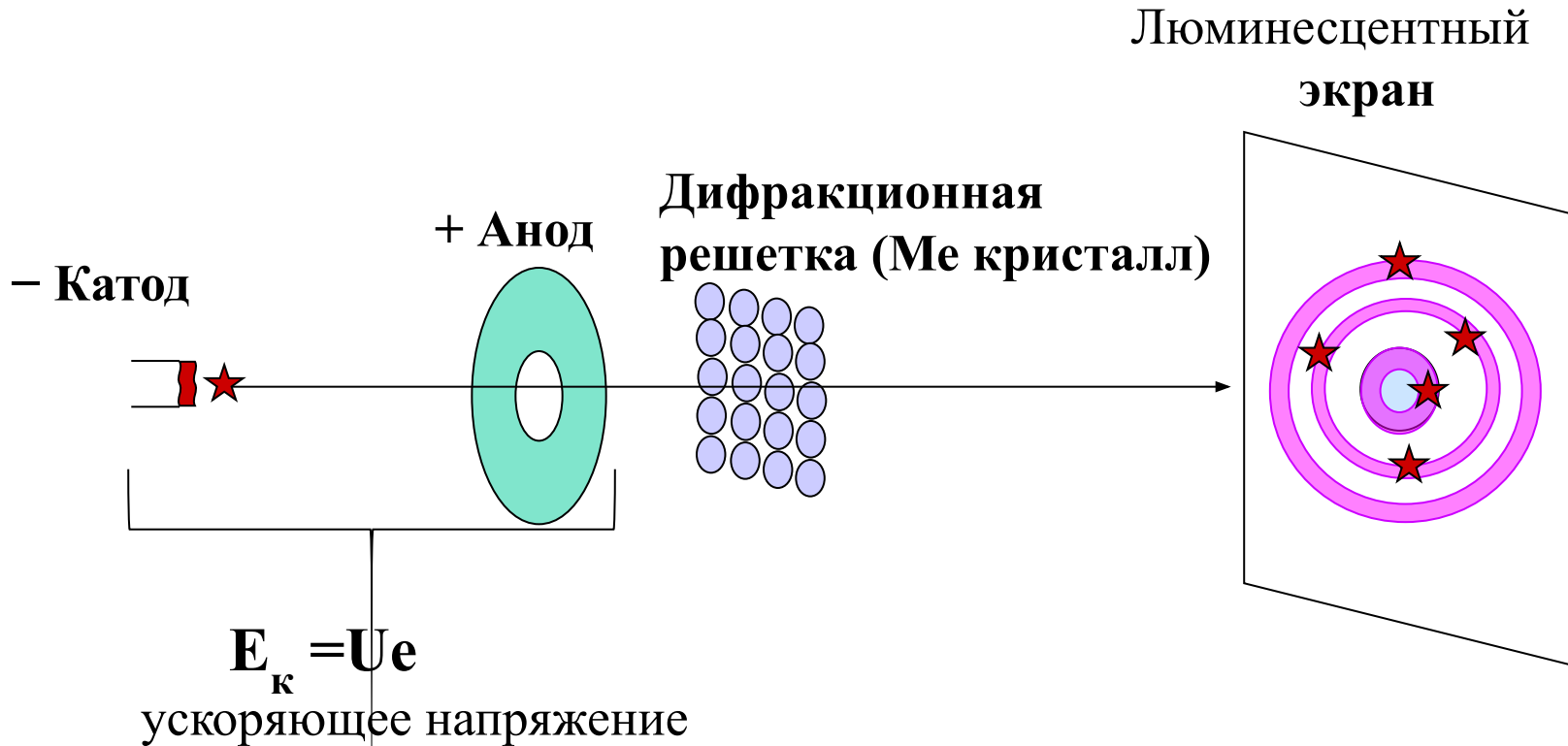
$\alpha \approx \lambda = 1.2 \text{ \AA}$ (Ni фольга)

α - постоянная решетки
ширина щели +
промежуток между
щелями



Дифракция электронов

Дэвиссон, Джермер(1927 г.); Томсон, Рейд(1928 г.)



Для макробъектов волновая механика не применима ($m=1\text{г}$ и $v=1\text{ м/с}$) - $\lambda = 6,6 \cdot 10^{-29}\text{ м}$
Применима для описания микробъектов (электронов)

Принцип неопределенности [для микрочастиц(электрона)]

Вернер Гейзенберг постулировал этот принцип в 1927 г. для одномерного пространства в виде:

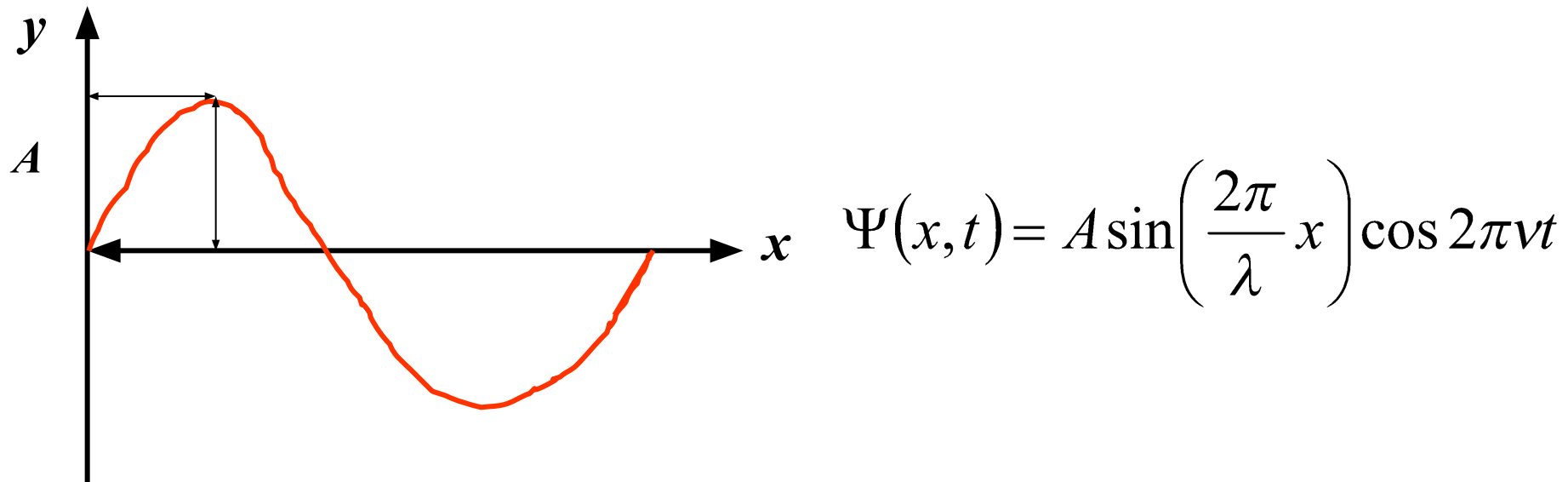
где Δx , Δp_x – неопределенность координаты частицы и соответствующего ей импульса по оси x (аналогично по оси y и z в 3-х мерном пространстве)

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

Одновременное точное определение координат частицы и ее импульса невозможно. Заменяется определением вероятности нахождения частицы в какой-то области пространства

*Эрвин Шредингер – квантово-механическая модель строения атома на основе квантовой (волновой) механики - теории, устанавливающей способ описания и законы движения микрочастиц - базируется на 2-х основных гипотезах-постулатах **Л. Де Бройля** и **В. Гейзенберга** [корпускул.-волновой дуализм микрочастиц и неопределенность в точном измерении корпускулярных свойств микрочастиц (координат и импульса)]*

График и уравнение *волновой функции* - плоской стоячей волны $\Psi(x,t)$ – для описания волнового характера движения электрона по координате x



A – макс. амплитуда колебаний (высота волны) по оси Y

x – текущая координата одномерной плоской волны

λ – длина волны

ν – частота, t – время

$\Psi(x,t)$ – текущая амплитуда волны по оси y при данном расстоянии x

При $\cos 2\pi\nu t = 1$ – стационарный процесс, $\Psi(x)$ – не зависит от времени

Уравнение Шредингера

1. Уравнение отображает волновой характер движения электрона в 3-х мерном пространстве с координатами (x,y,z) - $\Psi(x,y,z,t)$

$\Psi(x,y,z,t)$ - волновая функция - *пси функция* (стоячая волна) -
- текущая амплитуда, функция координат (x,y,z) и времени (t)

$\Psi(x,y,z)$ — (стоячая волна) для стационарного процесса не зависит от времени. $\Psi(x,y,z)$ - текущая амплитуда, функция координат (x,y,z) ; $[\cos 2\pi vt = 1]$

Дифф.уравнение 2-го порядка стоячей волны для стационарного процесса в 3-х мерном пространстве с координатами (x,y,z) (*):

$$\frac{\partial^2 \Psi(x, y, z)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi(x, y, z)}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi(x, y, z)}{\partial z^2} + \frac{4\pi^2}{\lambda^2} \cdot \Psi(x, y, z) = 0$$

λ - длина волны

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} = \nabla^2 \Psi \quad \nabla^2 - \text{оператор Лапласа (набла два)}$$

2. Уравнение должно содержать в себе характеристики электрона как волны - λ , так и частицы - m (дуализм микромира)

$$\lambda \rightarrow m, E_k = mv^2 / 2 = m^2 v^2 / 2m \quad mv = \sqrt{2mE_k}$$

Длина волны де Бройля $\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{m \cdot v} = \frac{h}{\sqrt{2 \cdot m \cdot E_k}} \Rightarrow \lambda^2 = \frac{h^2}{2 \cdot m \cdot E_k}$

λ^2 в (*) \rightarrow Волнов.уравнен.движения свободного электрона (потенц.эн. $U=0$):

$$\nabla^2 \Psi(x, y, z) + \frac{8\pi^2 m}{h^2} \cdot E_k \cdot \Psi(x, y, z) = 0$$

$E = E_k + U$, где E - полная энергия U - потенциальная E_k - кинетич.энергия

Уравнение Эрвина Шредингера (1926):

Волновое уравнение микрочастицы в потенциальном поле ($U \neq 0$), в частности, для описания состояния электрона в квантово-механической модели атома

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

Физический смысл волновой функции

Макс Борн, 1926 г.

$\Psi(x,y,z)$ - пси функция - волновая функция

• волновая функция (амплитудная) и физического смысла не имеет

• $\Psi^2(x,y,z)$ - квадрат волновой функции пропорционален вероятности (dP) нахождения частицы в элементарном объеме (dV)

$$dP = \Psi^2(x,y,z) \cdot dV$$

Вероятность P_V нахождения частицы в объеме V :

$$P_V = \int_V \Psi^2(x, y, z) dV$$

Плотность вероятности (электронная плотность для электрона) - вероятность нахождения микрочастицы в элементарном объеме dV с координатами dx, dy, dz :

$$\frac{dP}{dV} = \Psi^2(x, y, z)$$

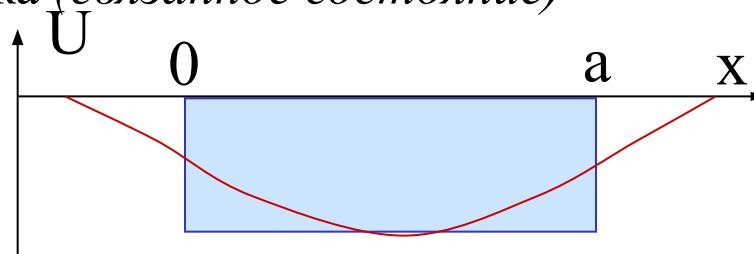
Принцип нормирования волновых функций

$$P_V = \int_V A^2 |\Psi(x,y,z)|^2 dV = 1,$$

A –нормирующий множитель

Электрон в одномерном потенциальном ящике(яме). Решение ур. Шредингера.

Потенциальная яма (ящик) - область пространства, вне которой потенциальная энергия V электрона обращается в бесконечность, т.е электрон не может выйти за границы ящика (*связанное состояние*)-
модель для электрона в атоме



•Одномерный потенциальный ящик

Граничные условия:

внутри ящика: $0 < x < a$ потенц.энергия $U = 0 \rightarrow \Psi(x)$

на границах ящика: в $(\cdot) 0$ и $(\cdot) a$ $U = \infty \rightarrow \Psi(0) = 0, \Psi(a) = 0$

$$\frac{d^2 \Psi(x)}{dx^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2} \cdot E \cdot \Psi(x) = 0$$

Решение – нахождение **собственных волновых функций**(должны быть **конечны, однозначны, непрерывны**) и расчет соответствующих этим функциям **собственных значений энергий**

•Нахождение волновой функции состояния электрона в потенц.ящике

$$\frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} + \frac{8\pi^2m}{h^2} \cdot E \cdot \Psi(x) = 0$$

Общее решение ур.
Шредингера
[стоячая волна $\Psi(x)$]

$$\Psi(x) = A \cdot \sin \frac{2\pi}{\lambda} x$$

Граничные условия \longrightarrow
$$\begin{cases} \Psi(0) = A \cdot \sin \frac{2\pi}{\lambda} 0 = 0 \\ \Psi(a) = A \cdot \sin \frac{2\pi}{\lambda} a = 0 \end{cases}$$

$$A \neq 0 \longrightarrow \sin \frac{2\pi}{\lambda} a = 0 \longrightarrow \frac{2\pi}{\lambda} a = \pi \cdot n \quad (n=1,2,3\dots) \longrightarrow \lambda = \frac{2a}{n}$$

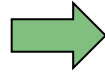
**Решение ур.Шредингера в явном виде –
набор волн.функций (собственных) $\Psi(x)$,**

где **a** - параметр потенц. ящика,
n = 1,2,3...- квантовое число

$$\Psi(x) = A \cdot \sin \frac{\pi \cdot n}{a} x$$

•Нахождение энергии электрона

$$\Psi(x) = A \cdot \sin \frac{\pi \cdot n}{a} x \neq 0$$



$$\frac{d\Psi(x)}{dx} = A \cdot \frac{\pi \cdot n}{a} \cdot \cos \frac{\pi \cdot n}{a} x$$

$$\frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} = A \cdot \frac{\pi^2 \cdot n^2}{a^2} (-\sin \frac{\pi \cdot n}{a} x)$$

$$\frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2} \cdot E \cdot \Psi(x) = 0$$

$$A \cdot \frac{\pi^2 \cdot n^2}{a^2} (-\sin \frac{\pi \cdot n}{a} x) + \frac{8\pi^2 \cdot m}{h^2} \cdot E \cdot A \cdot \sin \frac{\pi \cdot n}{a} x = 0$$

$$A \cdot (\sin \frac{\pi \cdot n}{a} x) \cdot [-\frac{\pi^2 \cdot n^2}{a^2} + \frac{8\pi^2 \cdot m}{h^2} \cdot E] = 0$$

$$-\frac{\pi^2 \cdot n^2}{a^2} + \frac{8\pi^2 \cdot m}{h^2} \cdot E = 0$$



$$E = \frac{h^2}{8a^2 \cdot m} \cdot n^2$$

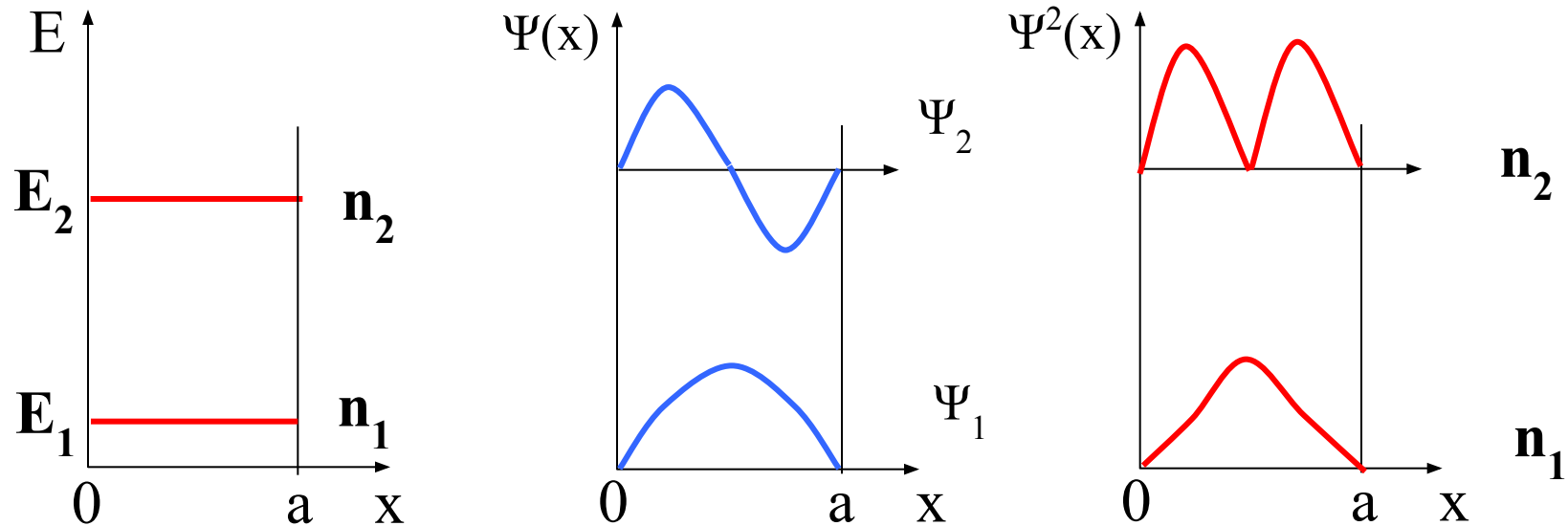
Набору $\Psi(x)$ соответствует набор E , $n = 1, 2, 3, \dots$ - квантовое число

Электрон в связанном состоянии (потенциальном ящике) – модель реального атома

Выводы:

• **Полная энергия электрона – квантована (дискретна): дискретные значения энергии $E_n - E_1, E_2, E_3, \dots$, определяются n , где $n = 1, 2, 3, \dots$ – квантовое число**

• **Распределение вероятности нахождения электрона (плотность вероятности) определяется энергией электрона $\frac{dP(x)}{dx} = \Psi^2(x)$**



• **Энергетическое состояние - $\{E_n - \Psi_n\}$ - определяют величина E и соответствующая ей волновая функция Ψ (распределение вероятности нахождения эл-на в пространстве. Каждому энергетическому состоянию соответствует своё квантовое число n , где $n = 1, 2, 3, \dots$ – квантовое число**

Электрон в трехмерном потенциальном ящике

Решение: электрон описывается

• *Набором волновых функций:*

$$\Psi(x, y, z) = \sqrt{\frac{8}{a \cdot b \cdot c}} \cdot \sin\left(\frac{n_x \cdot \pi}{a} \cdot x\right) \cdot \sin\left(\frac{n_y \cdot \pi}{b} \cdot y\right) \cdot \sin\left(\frac{n_z \cdot \pi}{c} \cdot z\right)$$

где **a, b, c** — параметры **n_x, n_y, n_z** (1, 2, 3, 4, ... — квантовые числа по осям x, y, z) потенц.ящика;

• *Набором энергий: (**)*
$$E = \frac{h^2}{8m} \cdot \left(\frac{n_x^2}{a^2} + \frac{n_y^2}{b^2} + \frac{n_z^2}{c^2} \right)$$

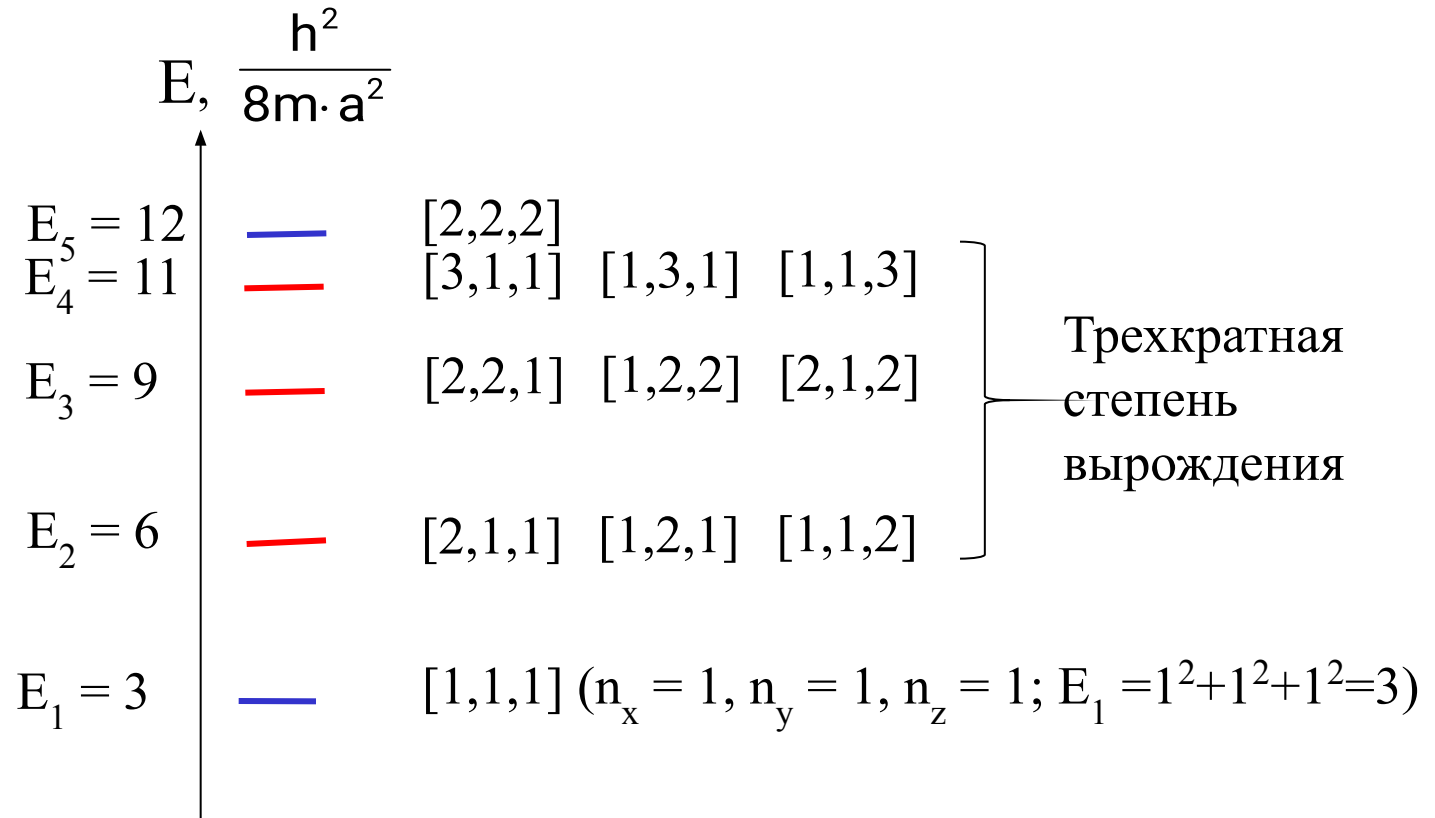
Выводы:

1. Энергия электрона дискретна (квантована). [Дискретность энергетических состояний распространяются и на реальный атом].
2. Энергетическое состояние определяется набором целочисленных параметров - **трех** квантовых чисел **n_x, n_y, n_z**.

Вырожденные энергетические состояния

Одно значение энергии – при нескольких наборах квантовых чисел (несколько наборов волновых функций). Пример вырождения - E_2 , E_3 и E_4

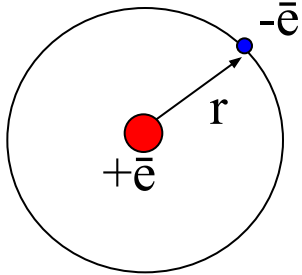
В (**) $a = b = c \longrightarrow E = \frac{h^2}{8m \cdot a^2} \cdot (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)$



Квантово-механическая модель атома.

Основное состояние атома водорода

$[k=1/4\pi\epsilon_0]$ - константа в з-не Кулона



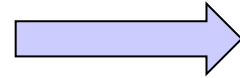
$$U = -\frac{k \cdot e^2}{r}$$

$$\nabla^2 \Psi(x, y, z) + \frac{8\pi^2 m}{h^2} \cdot \left(E + \frac{k \cdot e^2}{r} \right) \cdot \Psi(x, y, z) = 0$$

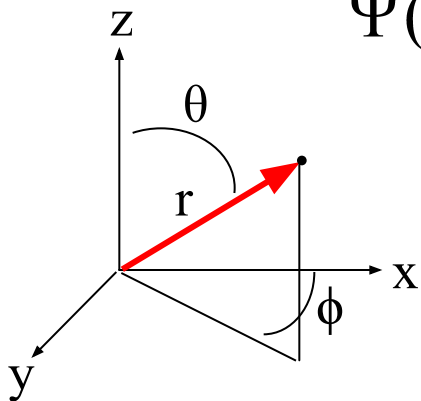
$$\Psi(x, y, z) \rightarrow \Psi(r, \vartheta, \varphi)$$

Основное состояние

E_{\min}



$\Psi(r)$



$$\frac{\partial^2 \Psi(r)}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \cdot \frac{\partial \Psi(r)}{\partial r} + \frac{8\pi^2 \cdot m}{h^2} \cdot \left(E + \frac{k \cdot e^2}{r} \right) \cdot \Psi(r) = 0$$

$$\begin{aligned} x &= r \cdot \sin\vartheta \cdot \cos\varphi \\ y &= r \cdot \sin\vartheta \cdot \sin\varphi \\ z &= r \cdot \cos\vartheta \end{aligned}$$

$$\Psi(r) = A \cdot e^{-a \cdot r}$$

$\Psi(r)$ — волновая функция (собственная функция), явл. решением ур. Шредингера,
 a — const, A — нормирующий коэффициент

Решение уравнения Шредингера для основного состояния атома водорода

$$\Psi(r) = A \cdot e^{-a \cdot r} \neq 0 \quad \longrightarrow \quad \frac{\partial \Psi(r)}{\partial r} = -A \cdot a \cdot e^{-a \cdot r} \quad \longrightarrow \quad \frac{\partial^2 \Psi(r)}{\partial r^2} = A \cdot a^2 \cdot e^{-a \cdot r}$$

подставляем в уравнение Шредингера

$$A \cdot a^2 \cdot e^{-a \cdot r} - \frac{2}{r} \cdot A \cdot a \cdot e^{-a \cdot r} + \frac{8\pi^2 \cdot m}{h^2} \cdot \left(E + \frac{k \cdot e^2}{r}\right) \cdot A \cdot e^{-a \cdot r} = 0$$

$$A \cdot e^{-a \cdot r} \neq 0 \quad \longrightarrow \quad a^2 - \frac{2 \cdot a}{r} + \frac{8\pi^2 \cdot m}{h^2} \cdot E + \frac{8\pi^2 \cdot m}{h^2} \cdot \frac{k \cdot e^2}{r} = 0$$

$$a^2 + \frac{8\pi^2 \cdot m}{h^2} \cdot E = \frac{1}{r} \cdot \left(2 \cdot a - \frac{8\pi^2 \cdot m \cdot k \cdot e^2}{h^2}\right)$$

Решение системы

$$E = -\frac{2 \cdot \pi^2 \cdot m \cdot k^2 \cdot e^4}{h^2}$$

$$a^2 + \frac{8\pi^2 \cdot m}{h^2} \cdot E = 0$$

$$2 \cdot a - \frac{8\pi^2 \cdot m \cdot k \cdot e^2}{h^2} = 0$$

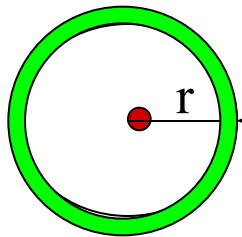
$$a = \frac{4\pi^2 \cdot m \cdot k \cdot e^2}{h^2}$$

ВЫВОД: Сходимость значений энергии E электрона расчетной и экспериментальной ($-13,6$ эВ в основном состоянии) – квантово-механическая модель для атома водорода имеет право на существование

Радиальное распределение электронной плотности. Понятие электронной орбитали

Наглядно вероятность нахождения электрона в пространстве характеризует функция распределения эл.плотности (вероятность в элементарном объеме dV)

В общем случае $dP = \Psi^2 \cdot dV \longrightarrow P = \int_V \Psi^2 dV \leq 1$



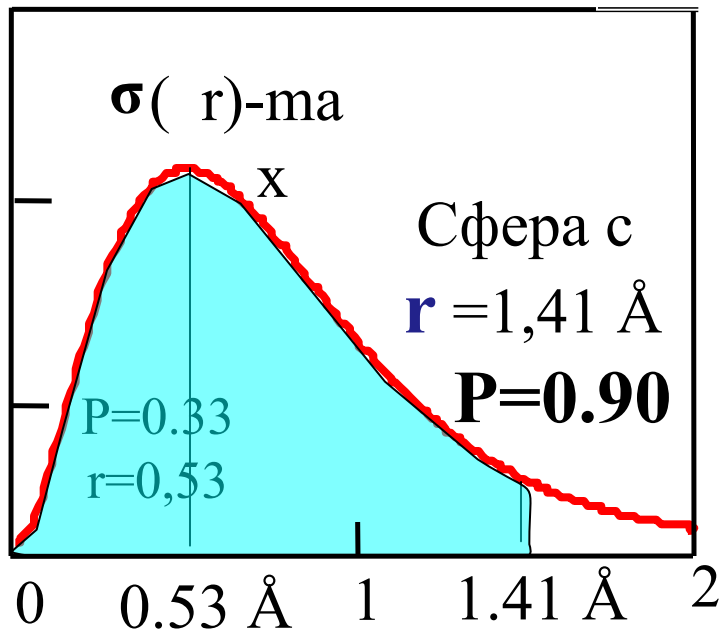
Для сферы: $dV = 4\pi r^2 dr \longrightarrow dP(r) = \Psi^2 \cdot 4\pi r^2 dr (*)$;

dV -объем сферич.слоя $P(r) = \int_0^r \Psi^2 \cdot 4\pi r^2 dr$

Из (*) \longrightarrow Радиальное распределение электр. плотности $\sigma(r)$ (зависимость вероятности нахождения эл-на в сферическом слое от r):

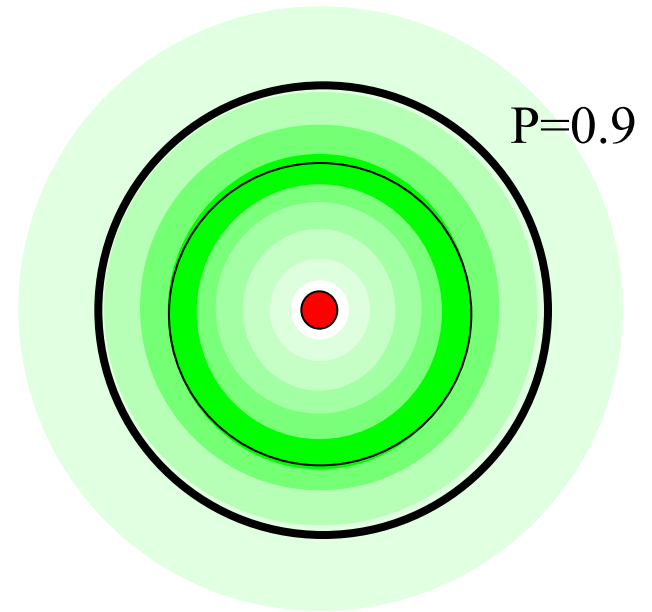
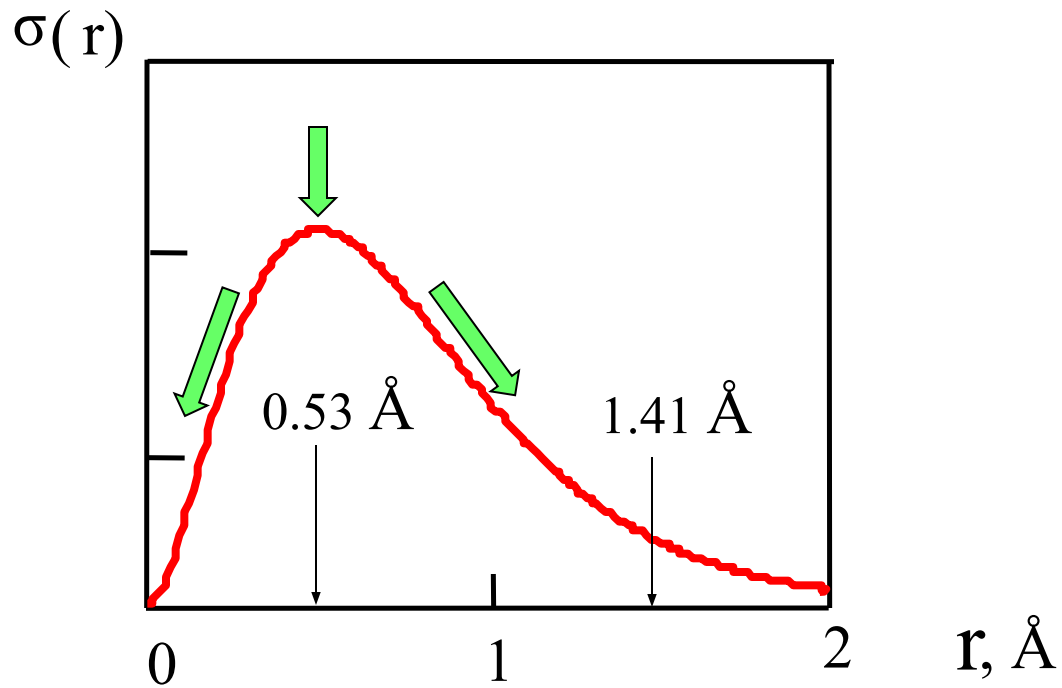
$\sigma(r)$

$$\frac{dP(r)}{dr} = \sigma(r) = \Psi^2 \cdot 4\pi r^2$$



Орбиталь электрона – (объем) область пространства (для атома водорода в основном состоянии это сфера) в которой вероятность нахождения электрона $P=0.90$ (90 %)

Атом водорода в основном состоянии



Возбужденные состояния атома водорода – более сложный вид волновых функций, чем $\Psi(\mathbf{r})$

Общий вид таких волновых функций - $\Psi(\mathbf{r},\theta,\phi)$. Используя метод разделения переменных $\Psi(\mathbf{r},\theta,\phi)$ представляют в виде произведения функций $R(\mathbf{r}) \cdot Y(\theta,\phi)$

$R(\mathbf{r})_{n,l}$ - функция радиального распределения электронной плотности в явном виде (получают при решении ур. Шредингера) содержит n и l
 $Y(\theta,\phi)_{l,m}$ - функция углового распределения электронной плотности в явном виде (получают при решении ур. Шредингера) содержит l и m , где

n, l, m - целочисленные параметры волновых функций $R(\mathbf{r})_{n,l}$ и $Y(\theta,\phi)_{l,m}$ в явном виде – наз. квантовыми числами

Квант. числа определяют набор собственных волн. функций (решений ур. Шредингера) и соответствующий им набор энергетических состояний $\{E_n - \Psi_{n,l,m}\}$ в атоме водорода

Квантовые числа:

главное – $n = 1, 2, 3, 4, \dots, \infty$

орбитальное – $l = 0, 1, 2, 3, \dots, (n - 1)$

магнитное – $m = -l, (-l+1), \dots, 0, \dots, (+l-1), +l$

спиновое – $m_s = \pm 1/2$ (1933 г.) Поль Дирак, модель Уленбека и Гаудсмита

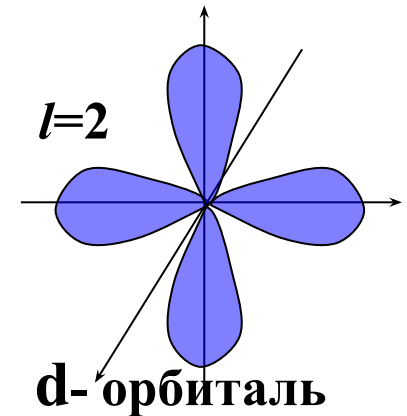
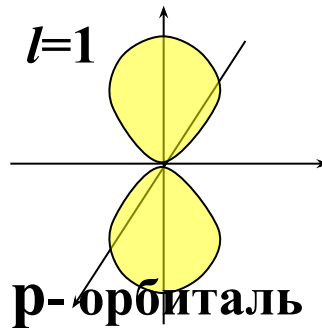
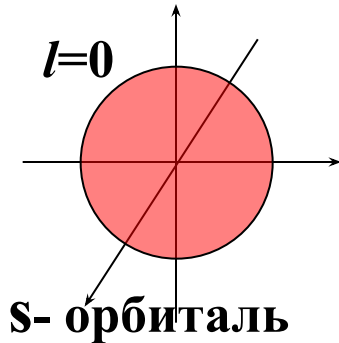
Квантовые числа

главное: $n = 1, 2, 3, 4, \dots, \infty$

Определяет разрешенные (квантованные, дискретные) значения **полной энергии электрона**, размер орбитали (расстояния e до ядра)

$$E_n = -\frac{2\pi^2 \cdot m \cdot k^2 \cdot e^4}{h^2} \cdot \frac{1}{n^2}$$

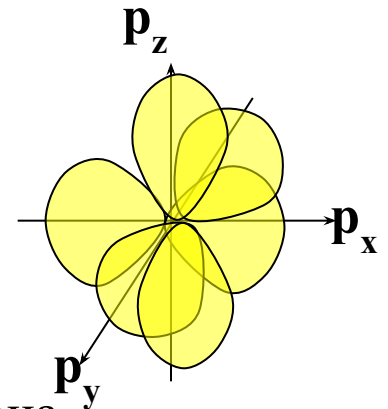
орбитальное: $l = 0, 1, 2, 3, \dots, (n-1)$ Возможные квантовые значения орбитального момента кол. движения электрона ($E_{кин}$ - **форма орбитали**)



магнитное: $m = -l, (-l+1), \dots, 0, \dots, (l-1), +l$ Разрешенные направления в пространстве вектора орбит. момента кол. движения - определяет **число орбиталей** ($E_{пот}$ - зависит от положения e в пространстве)

s-орбиталь - $m = 0$ **p-орбиталь** - $m = 1, 0, -1$

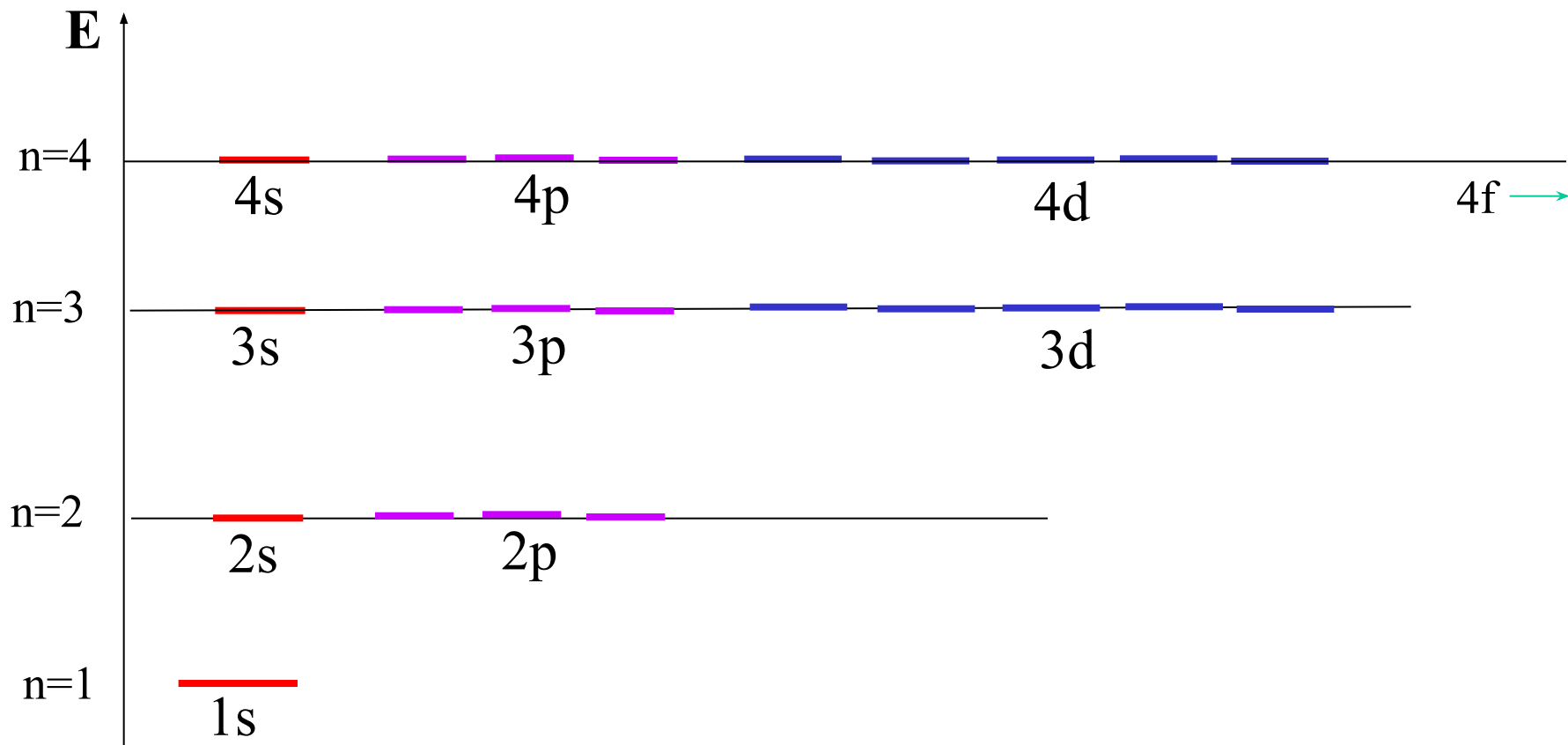
спиновое: $m_s = \pm 1/2$ Собственный момент кол. движения электрона



Электрон.орбитали ат. водорода(комбинация 3-х кв.ч.)

n	$l = 0, 1 \dots (n-1)$	$m = -l, \dots 0, \dots +l$	Число орбиталей	Энергия E_n
1	0 – 1s	0	1	E_1
2	0 – 2s 1 – 2p	0 +1, 0, -1	1 3	E_2
3	0 – 3s 1 – 3p 2 – 3d	0 +1, 0, -1 +2, +1, 0, -1, -2	1 3 5	E_3
4	0 – 4s 1 – 4p 2 – 4d 3 – 4f	0 +1, 0, -1 +2, +1, 0, -1, -2 +3, +2, +1, 0, -1, -2, -3	1 3 5 7	E_4

Энергетическая диаграмма орбиталей в атоме водорода

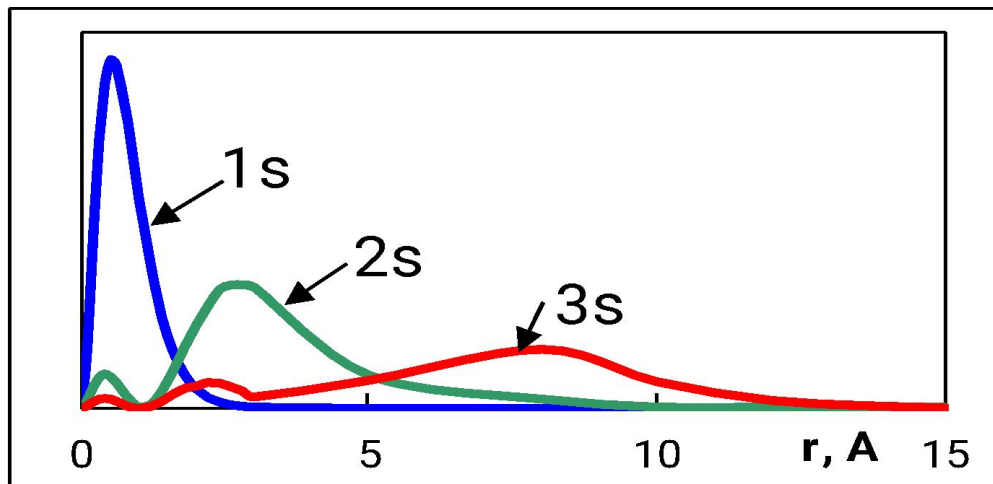


$E_{1s} < E_{2s} = E_{2p} < E_{3s} = E_{3p} = E_{3d} < E_{4s} = E_{4p} = E_{4d} = E_{4f} < E_{5s} \dots$
 (вырождение по орбит.кв.ч. l и по магн.кв.ч. m . Энергия E
 электрона зависит только от значения главного кв.ч. n)

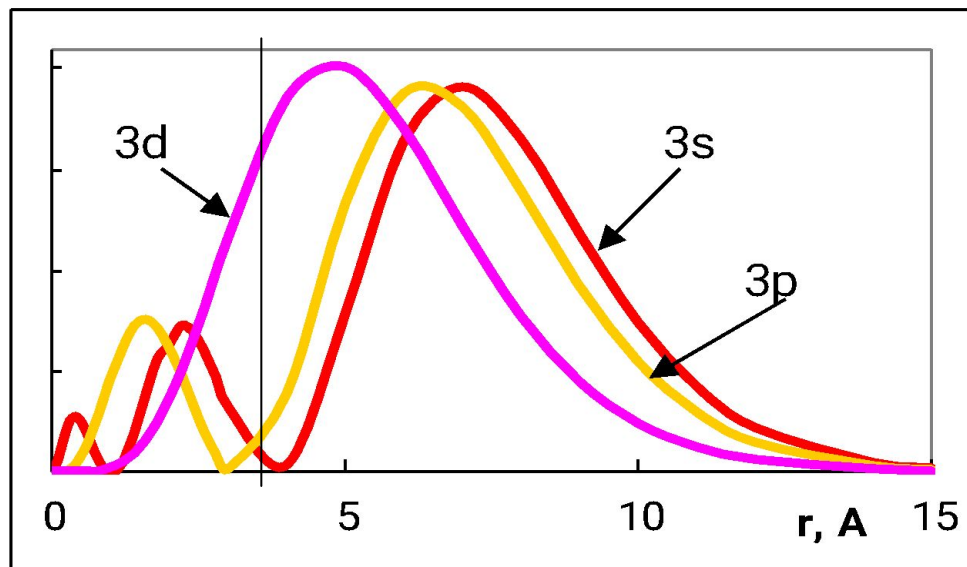
Функции радиального распределения электронной плотности для различных энергетических состояний атома водорода.

Проникающая способность орбиталей: $ns > np > nd$; Энергия $ns < np < nd$

Число максимумов ns -орбиталей равно n

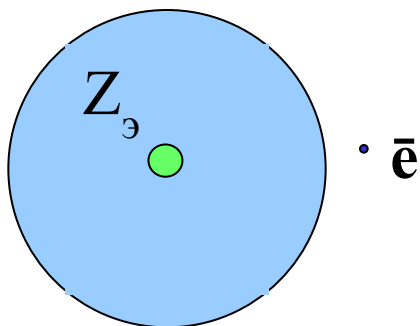


Число максимумов орбиталей равно $n - 1$



1.7 Многоэлектронный атом

(одноэлектронное приближение - водородоподобная система, описание многоэлектронного атома похоже на описание атома водорода). Электрон в поле эффективного заряда $Z_{\text{э}}$



$$Z_{\text{э}} = Z - \sigma_{n,l}$$

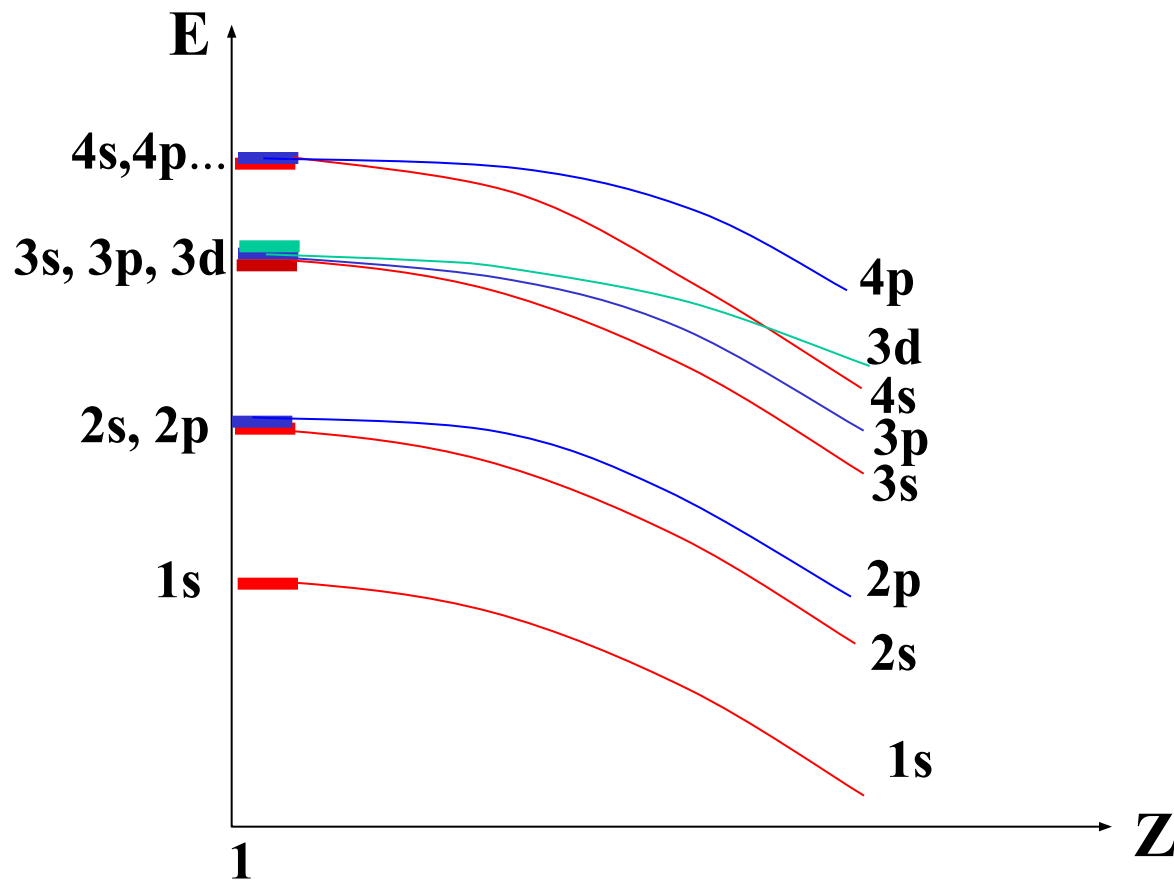
Z – заряд ядра

$Z_{\text{э}}$ - эффективный заряд ядра

$\sigma_{n,l}$ - константа экранирования

Атом	H	He	Li	Be	B	C
Z	1	2	3	4	5	6
$\sigma_{n,l}$	0	0.3	2.70	2.05	2.40	2.75
$Z_{\text{э}}=Z - \sigma$	1	1.7	1.30	1.95	2.60	3.25

Зависимость энергии орбиталей E от Z (заряда ядра) и от различия радиального распределения электронной плотности s,p и d-орбиталей (проникающей способности орбиталей)



**$E_{1s} < E_{2s} < E_{2p} < E_{3s} < E_{3p} < E_{4s} < E_{3d} < E_{4p} < E_{5s} < E_{4d} < \dots$
снятие вырождения по орбит.кв.ч. l . E е зависит от n и l**

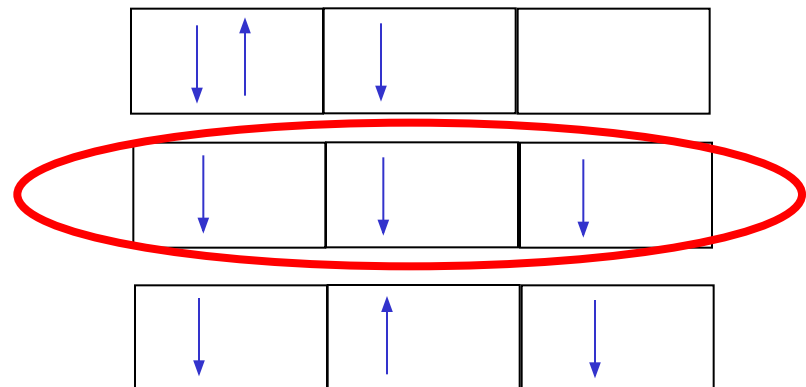
Электронные конфигурации многоэлектронных атомов. Правила заселения электронами орбиталей

1. Принцип минимума энергии электронов.

2. Принцип (запрет) Паули



3. Правило Хунда



1.8 Периодическая таблица элементов (1869)

периоды	ГРУППЫ																	
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	0
1	1 H Водород 1,0079																	2 He Гелий 4,0026
2	3 Li Литий 6,941	4 Be Бериллий 9,0122											5 B Бор 10,81	6 C Углерод 12,011	7 N Азот 14,0067	8 O Кислород 15,9994	9 F Фтор 18,9984	10 Ne Неон 20,179
3	11 Na Натрий 22,9898	12 Mg Магний 24,305											13 Al Алюминий 26,9815	14 Si Кремний 28,0855	15 P Фосфор 30,9738	16 S Сера 32,06	17 Cl Хлор 35,453	18 Ar Аргон 39,948
4	19 K Калий 39,0983	20 Ca Кальций 40,08	21 Sc Скандий 44,9559	22 Ti Титан 47,88	23 V Ванадий 50,9415	24 Cr Хром 51,996	25 Mn Марганец 54,9380	26 Fe Железо 55,847	27 Co Кобальт 58,933	28 Ni Никель 58,69	29 Cu Медь 63,546	30 Zn Цинк 65,39	31 Ga Галлий 69,72	32 Ge Германий 72,59	33 As Мышьяк 74,9216	34 Se Селен 78,96	35 Br Бром 79,904	36 Kr Криптон 83,80
5	37 Rb Рубидий 85,4678	38 Sr Стронций 87,62	39 Y Иттрий 88,9059	40 Zr Цирконий 91,22	41 Nb Ниобий 92,9064	42 Mo Молибден 95,94	43 Tc Технеций [97]	44 Ru Рутений 101,07	45 Rh Родий 102,91	46 Pd Палладий 106,4	47 Ag Серебро 107,868	48 Cd Кадмий 112,41	49 In Индий 114,82	50 Sn Олово 118,69	51 Sb Сурьма 121,75	52 Te Теллур 127,60	53 I Иод 126,9044	54 Xe Ксенон 131,29
6	55 Cs Цезий 132,9054	56 Ba Барий 137,33	57 La Лантан 138,9055	72 Hf Гафний 178,49	73 Ta Тантал 180,9479	74 W Вольфрам 183,85	75 Re Рений 186,207	76 Os Осмий 190,2	77 Ir Иридий 192,2	78 Pt Платина 195,08	79 Au Золото 196,9665	80 Hg Ртуть 200,59	81 Tl Таллий 204,3	82 Pb Свинец 207,21	83 Bi Висмут 208,9804	84 Po Полоний [209]	85 At Астат [210]	86 Rn Радон [222]
7	87 Fr Франций [223]	88 Ra Радий 226,03	89 Ac Актиний 227,03	104 Rf Резерфордий [261]	105 Db Дубний [262]	106 Sg Сиборгий [263]	107 Bh Борий [262]	108 Hs Хассий [265]	109 Mt Майтнерий [266]	110	111	112	113	114	115	116	117	118

58 Ce Церий 140,12	59 Pr Прометий 140,908	60 Nd Неодим 144,24	61 Pm Прометий [145]	62 Sm Самарий 150,36	63 Eu Европий 151,96	64 Gd Гадолий 157,25	65 Tb Тербий 158,925	66 Dy Дипрасий 162,50	67 Ho Гольмий 164,930	68 Er Эрбий 167,26	69 Yb Йттербий 173,04	70 Lu Лютеций 174,967	
90 Th Торий 232,038	91 Pa Празмий 231,036	92 U Уран 238,029	93 Np Нептуний 237,048	94 Pu Плутоний [244]	95 Am Америций [243]	96 Cm Кюрий [247]	97 Bk Берклий [247]	98 Cf Калифорний [251]	99 Es Эйнштейний [252]	100 Fm Фермий [257]	101 Md Менделеевский [258]	102 No Нобелий [259]	103 Lr Лоренцский [260]

Номер

20 Ca Кальций 40,08
p
d
f

- ← Символ
- ← Название
- ← Атомная масса, относительная

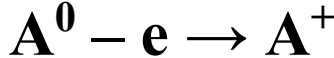
Физико-химические характеристики атома

Ковалентный радиус ($R_A = r_{\text{CB}}/2$) и радиус иона

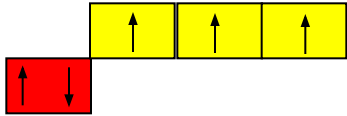
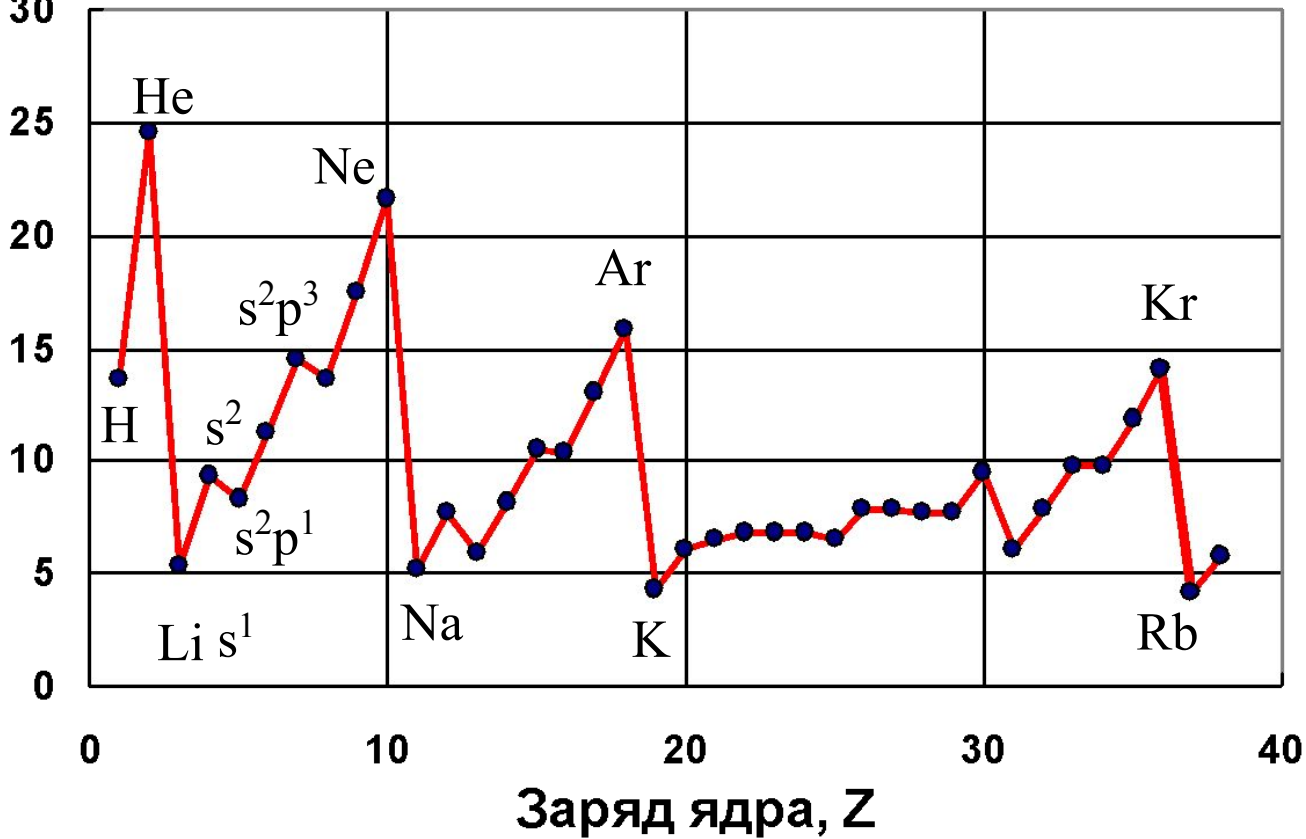
$$R_{A^+} < R_{A^0} < R_{A^-}$$

Частица	Na⁰	Na⁺	Cl⁰	Cl⁻
Радиус, Å	1.54	1.02	0.99	1.81
Частица	Sr⁰	Sr⁺²	S⁰	S⁻²
Радиус, Å	1.91	1.18	1.02	1.84

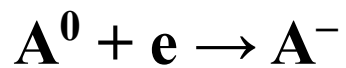
• Энергия ионизации - $E_{и}$ (эВ)



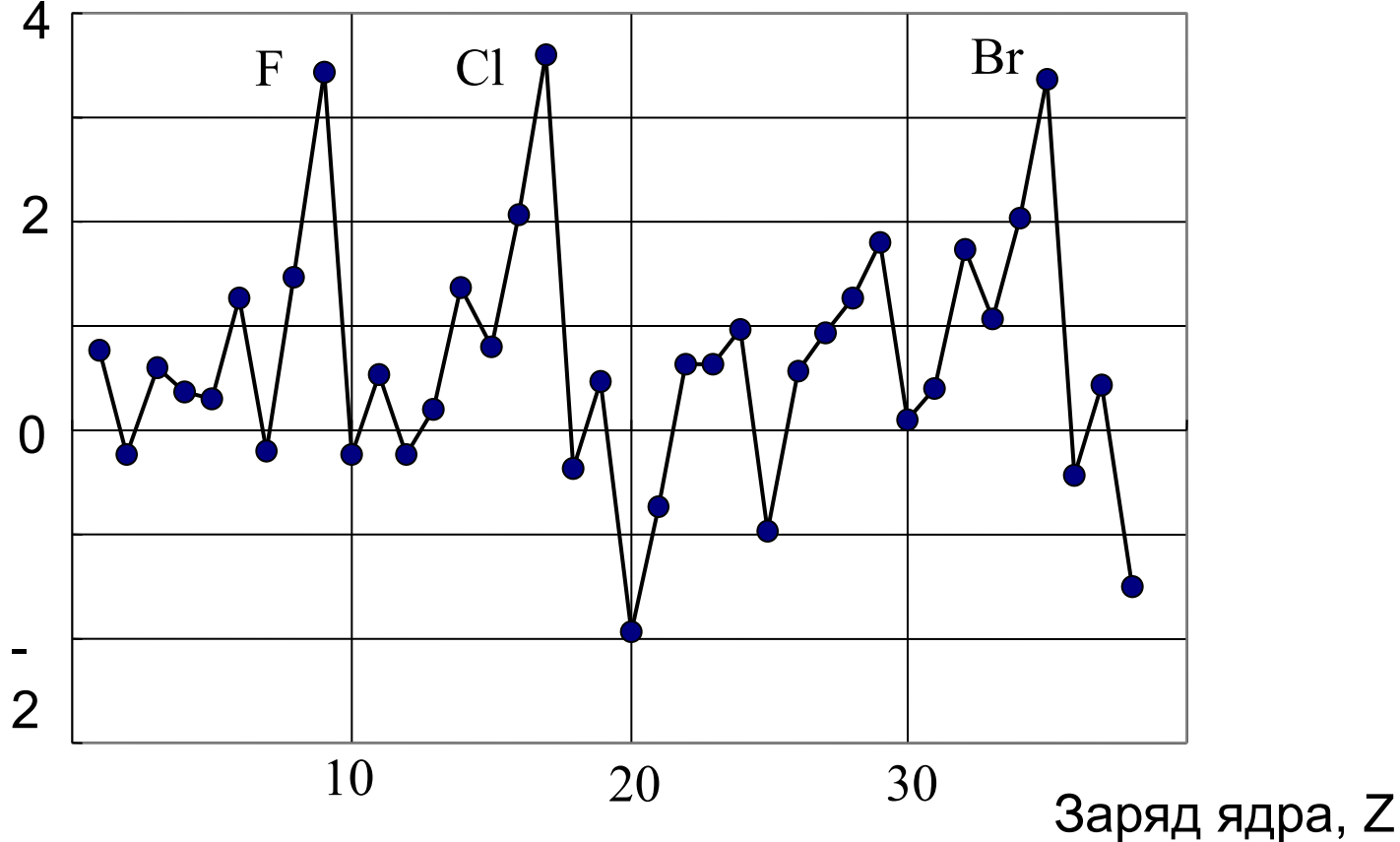
$E_{и}$,
эВ



• Энергия сродства к электрону – $E_{\text{сэ}}$ (эВ)



$E_{\text{сэ}}$
эВ



• Электроотрицательность (способность атома притягивать к себе электронную плотность при образовании хим.связи с другим атомом)

- по Малликену
- Существует также шкала Олреда-Рохова

$$\chi = \frac{E_u + E_{сэ}}{2} \quad (\text{эВ})$$

- по Полингу

$$\chi_{\text{F}} = 1.0, \quad \chi_{\text{F}} = 4.0 \text{ (y.e.)}$$

	Li	Be	B	C	N	O	F
М	2.96	2.86	3.83	5.61	7.34	9.99	12.3
П	1.0	1.5	2.0	2.5	3.0	3.5	4.0
	Na	Mg	Al	Si	P	S	Cl
М	2.94	2.47	2.97	4.35	5.72	7.60	9.45
П	0.9	1.2	1.5	1.8	2.1	2.5	3.0