



**Кафедра Химии и электрохимической энергетики
поздравляет Вас, первокурсников, с
поступлением в НИУ Московский
Энергетический институт**

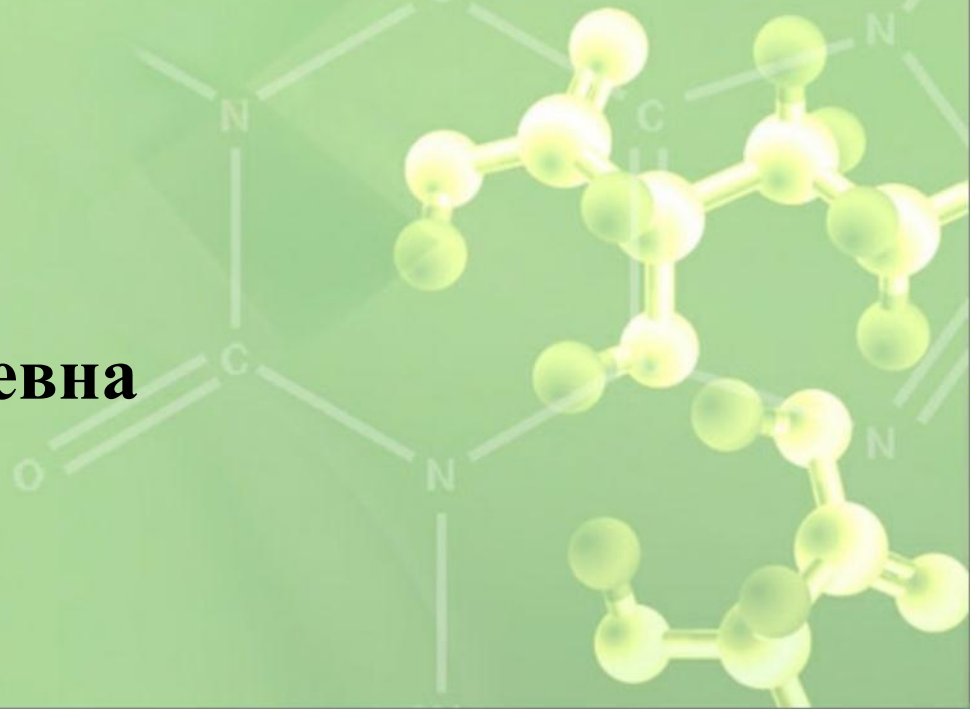


*Национальный исследовательский университет МЭИ
Кафедра Химии и электрохимической энергетики*

Лекция 1

Строение атома

Григорьева Оксана Юрьевна



План лекции

1

Химия – дисциплина в МЭИ.

2

Строение атома.

3

Квантово-механические представления.

4

Квантовые числа.

Химия

```
graph TD; A(Химия) --> B[В энергетическом институте – фундаментальная, общетеоретическая дисциплина]; A --> C[Естественная наука, изучающая состав, строение, свойства и превращения веществ, а также явления, сопровождающие эти превращения.];
```

В энергетическом институте – фундаментальная, общетеоретическая дисциплина

Естественная наука, изучающая состав, строение, свойства и превращения веществ, а также явления, сопровождающие эти превращения.



М.В.Ломоносов (1741 г.)

“Химическая наука рассматривает свойства и изменения тел..., состав тел...,объясняет причину того, что с телами при химических превращениях происходит”.

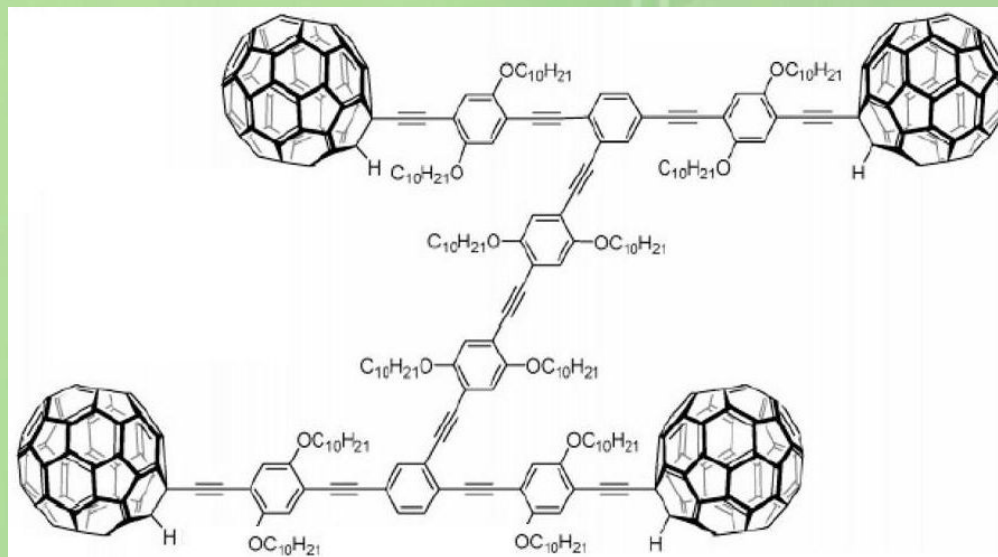
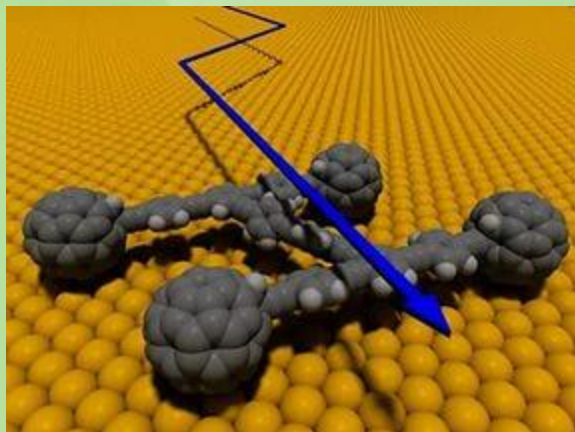


Д. И. Менделеев (в “Основах химии” 1871 г.)

“Химия – это учение об элементах и их соединениях”

Особенности химии как науки

- Многообразие изучаемых объектов.
- Создание собственных объектов для изучения



Пример создания собственного объекта - наноавтомобиль на фуллереновых колесах.

Физика – изучает общие свойства и законы движения объектов материального мира

Химия – наука о веществах, их строении, свойствах и превращениях

Масштабы химии и физики

	Диапазон времен, с	Диапазон расстояний, м	Диапазон энергий, эВ
Химия	$10^{-14} - 10^{13}$ (27 порядков)	$10^{-11} - 10^{-1}$ (10 порядков)	$10^{-3} - 10^1$
Физика	$10^{-35} - 10^{18}$ (> 50 порядков)	$10^{-18} - 10^{26}$ (> 40 порядков)	до 10^{10}

Электронное строение атома

Джозеф-Джон Томсон

- 1897г - открытие электрона
- 1904г - модель строения атома (пудинг с изюмом)

Эрнест Резерфорд

- 1910г – ядерная планетарная модель атома

Нильс Бор

- 1910г – модель атома водорода.

Д. Д. Иваненко, Е. Н. Гапон, В. Гейзенберг

- 1932 протонно-нейтронная теория

Электронное строение атома

Атом:

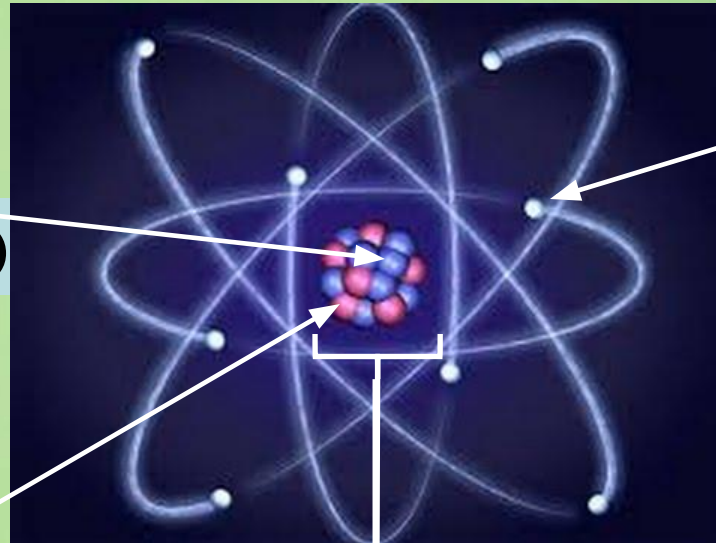
сложная электромагнитная микросистема, являющаяся носителем свойств химического элемента.

ЯДРО

ЭЛЕКТРОНЫ (e^-)

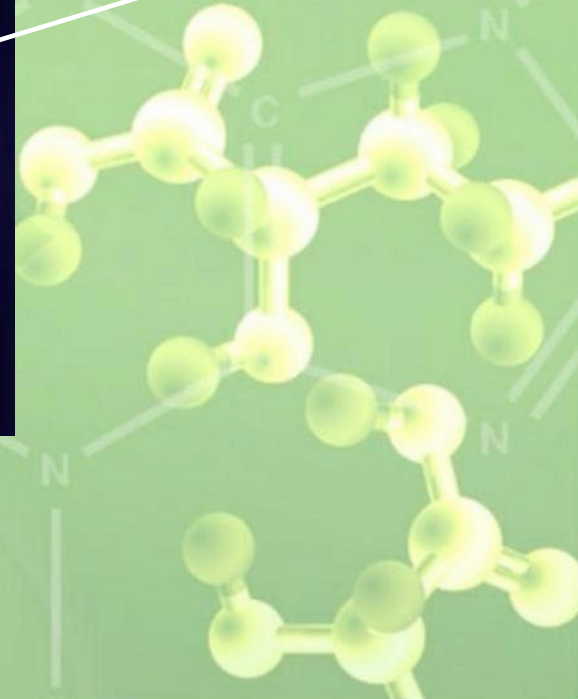
ПРОТОНЫ (p, p^+)

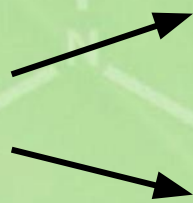
НЕЙТРОНЫ (n, n^0)



$^{16}_8\text{O}$

ЯДРО





ЯДРО

ПРОТОНЫ (p, p^+)

НЕЙТРОНЫ (n, n^0)

ЭЛЕКТРОНЫ (e^-)

массовое число

заряд ядра



$^{35}_{17}\text{Cl}$ ($17p^+, 18n, 17e^-$) (75,43%)

$^{37}_{17}\text{Cl}$ ($17p^+, 20n, 17e^-$) (24,57%)

Молярная масса: $M(\text{Cl}) = 35 \cdot 0,7543 + 37 \cdot 0,2457 = 35,491$

Химический элемент – вид атомов с одинаковым зарядом ядра

Почему атом –
устойчивая,
стабильная
система?



Почему электрон не
излучает энергии при
движении?

Квантовая механика

**основана на представлении о
квантовании энергии, волновом характере
движения микрообъектов и
вероятностном методе описания их
движения.**

Основные положения квантовой механики

• Волна

М. Планк (1900 г.)

h – постоянная Планка ($6,626 \cdot 10^{-34}$ Дж·с);

ν – частота излучения (колебания); $\nu = c/\lambda$

c – скорость света, λ – длина волны.

$$E_2 = h\nu = hc / \lambda$$

• Частица

А. Эйнштейн (1905 г.)

m – масса фотона,

c – скорость света, $3 \cdot 10^8$ м/с

$$E_1 = mc^2$$

Луи де Бройль (1924 г.)

Поведение движущихся микрообъектов (в том числе и **электронов**) – одновременное проявление, как свойств **частиц** так и свойств **волн**.

частица → **ЭЛЕКТРОН** ← **волна**

$$E_1 = m_e v^2 \quad E_1 = E_2 \quad E_2 = h v / \lambda_e$$

$$\lambda_e = h / m_e v$$

m_e – масса электрона ($9,1 \cdot 10^{-31}$ кг); h – постоянная Планка ($6,626 \cdot 10^{-34}$ Дж · с)
 v – скорость движения электрона ($3 \cdot 10^8$ м/с).

$$\lambda_e = (6,626 \cdot 10^{-34}) / 9,1 \cdot 10^{-31} \cdot 3 \cdot 10^8 = 2,4 \cdot 10^{-11} \text{ м}$$



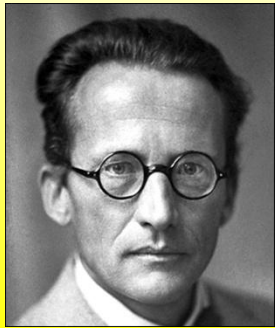
Принцип неопределенности – Вернер Гейзенберг (1927г.):

Произведение неопределенностей положения Δx и импульса $\Delta(mv)$ не может быть меньше $h / 2\pi$:

- $\Delta x \cdot \Delta(mv) \geq h / 2\pi$

- Δ – погрешность, неопределенность в измерении

Точное нахождение частицы (электрона) заменяется понятием статистической **вероятности нахождения ее в определенном объеме** (околоядерного) пространства.



Эрвин Шрёдингер

математическое описание состояния электрона в атоме

1933 год – Нобелевская премия за создание волновой механики

Движение e^- → волновой характер → волновая функция:

$$\psi = \psi(x, y, z) = \psi(n, l, m_l)$$

Макс Борн: *вероятность найти электрон в той или иной точке пространства в данный момент времени равна $|\psi|^2$.*

$$|\psi|^2 dv$$

$|\psi|^2$ – плотность вероятности нахождения e^- в определенном объеме околоядерного пространства.

Это пространство называется **атомной орбиталью (АО)**.

Атомные орбитали (АО)

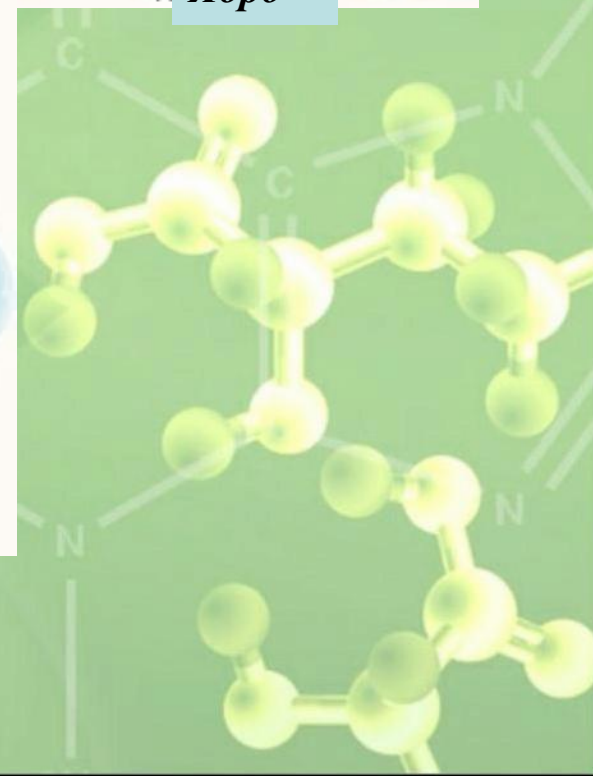


**Графически
АО –**



Ядро

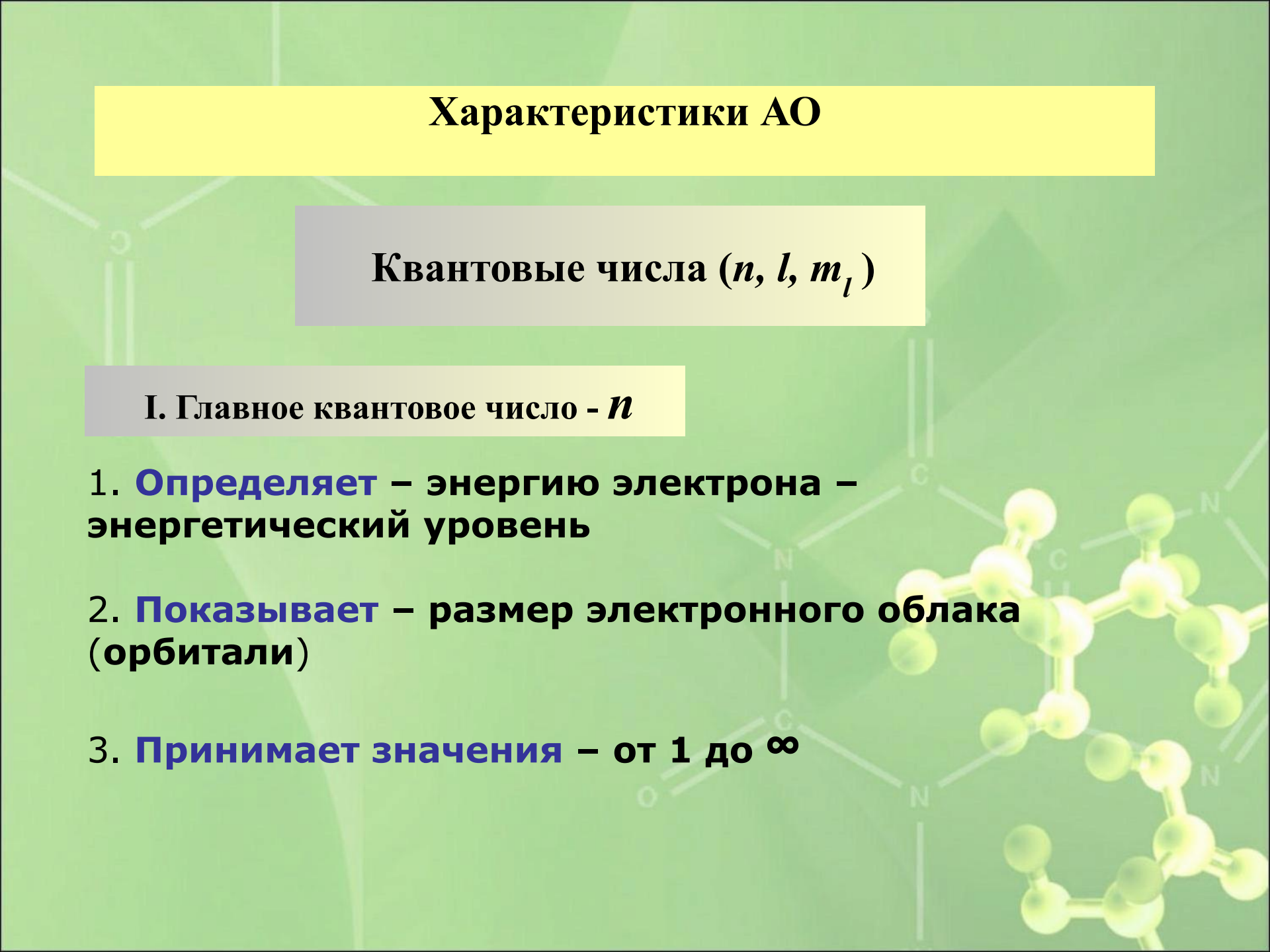
The diagram shows a d-orbital with a central nucleus labeled 'Ядро'.



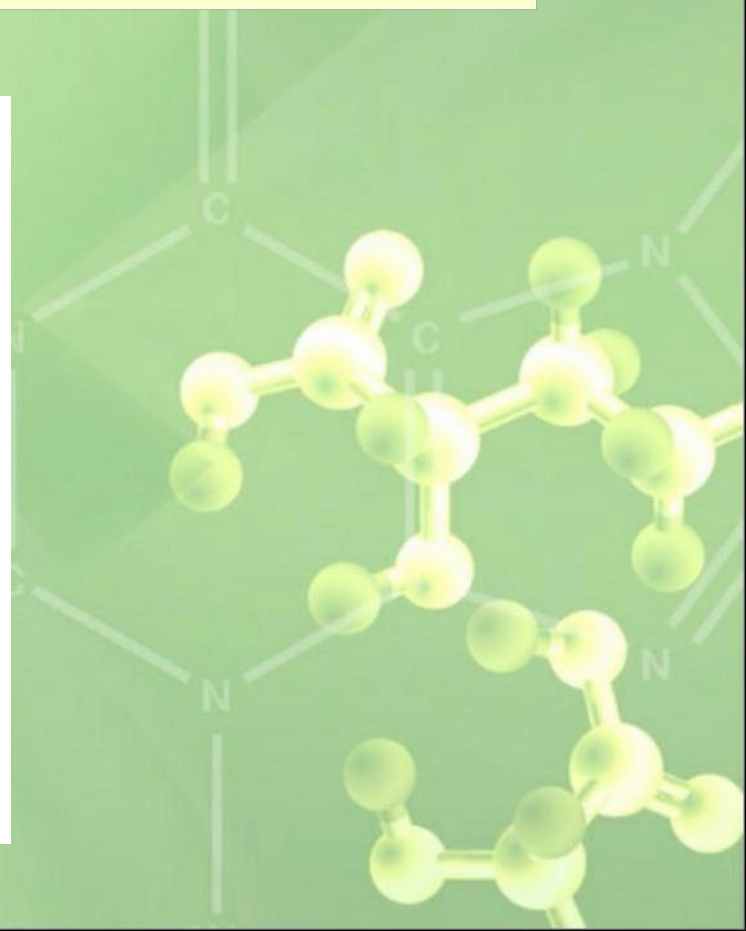
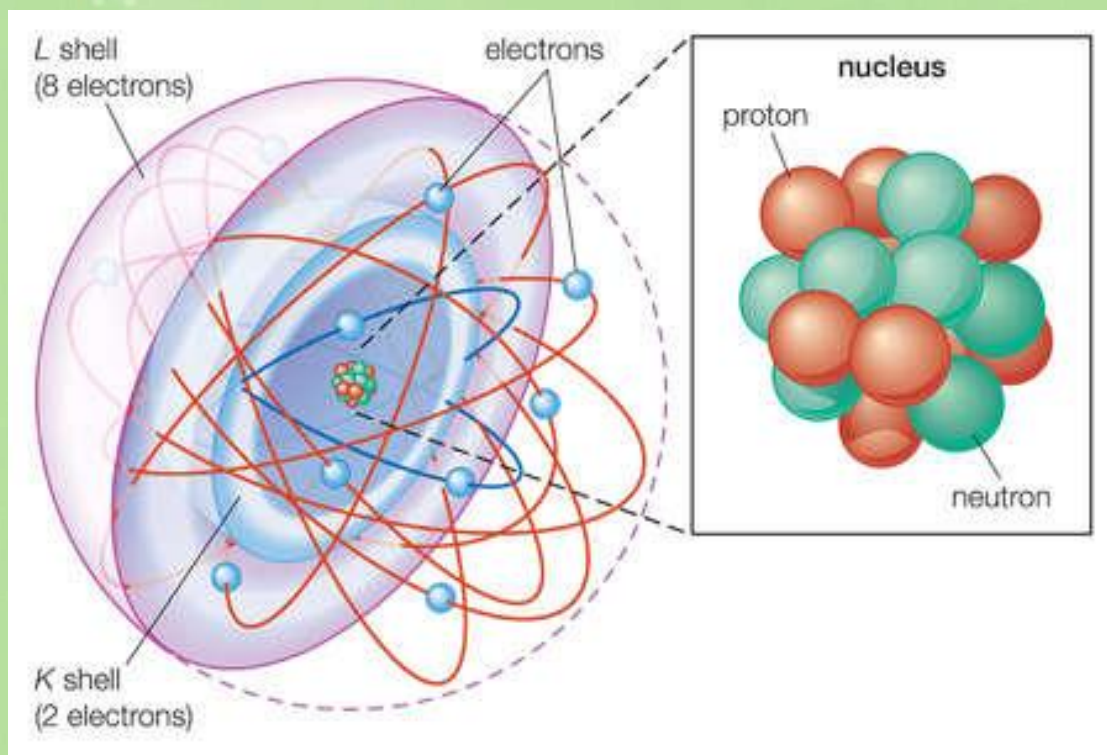
Характеристики АО

Квантовые числа (n, l, m_l)

I. Главное квантовое число - n

1. **Определяет** – энергию электрона – энергетический уровень
 2. **Показывает** – размер электронного облака (орбитали)
 3. **Принимает значения** – от 1 до ∞
- 

n (энергетический уровень): 1 2 3 4
оболочка K L M N
→
 E_e увеличивается



II. Орбитальное квантовое число - l

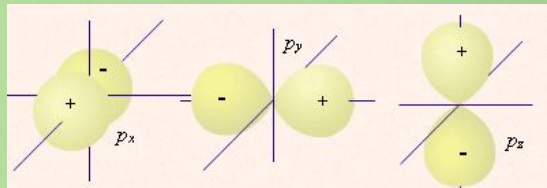
1. **Определяет** – орбитальный момент количества движения электрона
2. **Показывает** – форму орбитали
3. **Принимает значения** – от 0 до $(n-1)$

Орбитальное квантовое число (l)	0	1	2	3	4
Энергетический подуровень (АО)	s	p	d	f	g
	sharp резкий	principal главный	diffuse диффузный	fundamental фундаментальный	

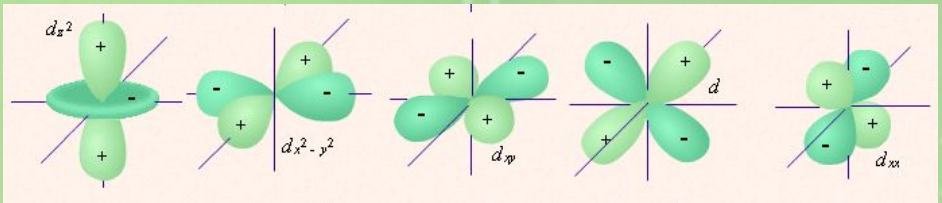
$l = 0 \rightarrow s$ – энергетический подуровень $\rightarrow s$ – AO \rightarrow



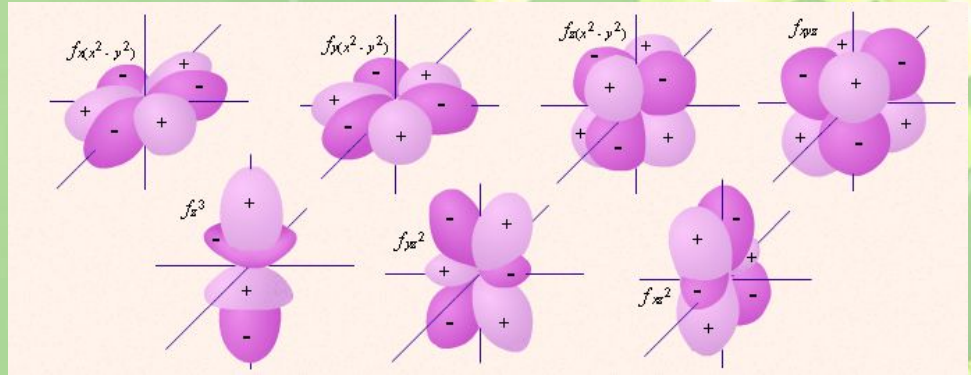
$l = 1 \rightarrow p$ – энергетический подуровень $\rightarrow p$ – AO \rightarrow



$l = 2 \rightarrow d$ – энергетический подуровень $\rightarrow d$ – AO \rightarrow



$l = 3 \rightarrow f$ – энергетический подуровень $\rightarrow f$ – AO \rightarrow



Каждому n соответствует определенное число значений $l \rightarrow$
 \rightarrow каждый энергетический уровень расщепляется на энергетические подуровни.

Число подуровней равно номеру энергетического уровня

Пример: 1-ый энергетический уровень \rightarrow 1 подуровень $\rightarrow 1s$
2-ой энергетический уровень \rightarrow 2 подуровня $\rightarrow 2s2p$
3-ий энергетический уровень \rightarrow 3 подуровня $\rightarrow 3s3p3d$
4-ый энергетический уровень \rightarrow 4 подуровня $\rightarrow 4s4p4d4f$

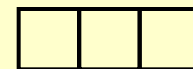
III. Магнитное квантовое число m_l

1. **Определяет** – значение проекции орбитального момента количества движения электрона на произвольно выделенную ось.
2. **Показывает** – пространственную ориентацию АО
3. **Принимает значения** – от $-l$ до $+l$

Любому значению l соответствует $(2l + 1)$ значений m_l , т. е. $(2l + 1)$ возможных расположений электронного облака данного типа в околоядерном пространстве – число орбиталей.

Пример: s -состояние ($l = 0$) – одна орбиталь: $2 \cdot 0 + 1 = 1$; $m_l = 0$

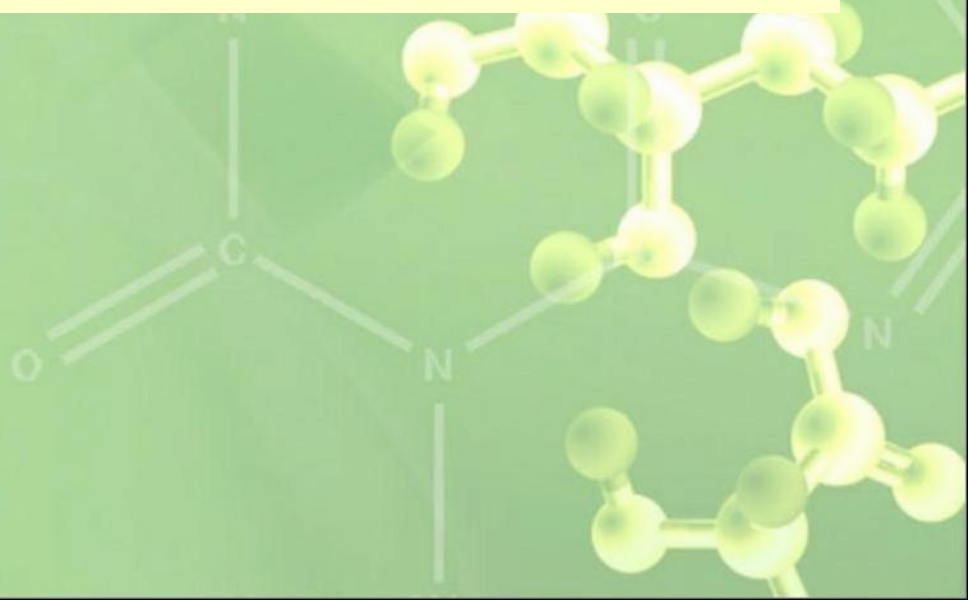
p -состояние ($l = 1$) – три орбитали: $2 \cdot 1 + 1 = 3$; $m_l = -1, 0, +1$



Все орбитали, принадлежащие одному подуровню, имеют одинаковую энергию и называются **вырожденными**.

Вывод:

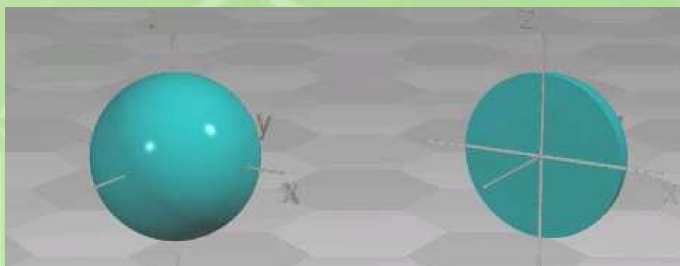
АО характеризуется определенным набором квантовых чисел (n , l и m_l), т. е. определенными размером, формой и ориентацией в околоядерном пространстве.



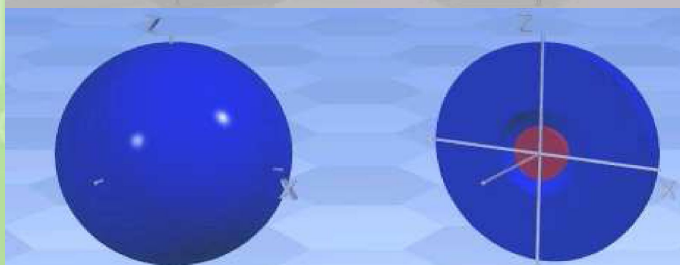
Граничные поверхности s -и p -орбиталей

n ns

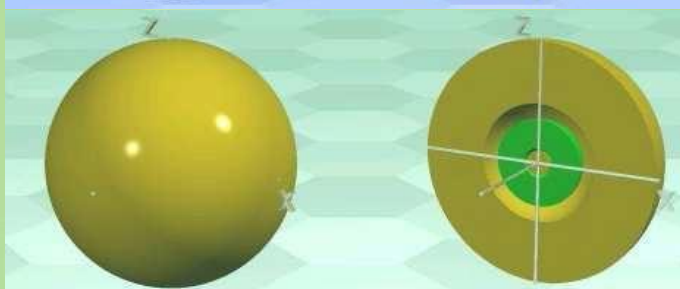
1



2



3



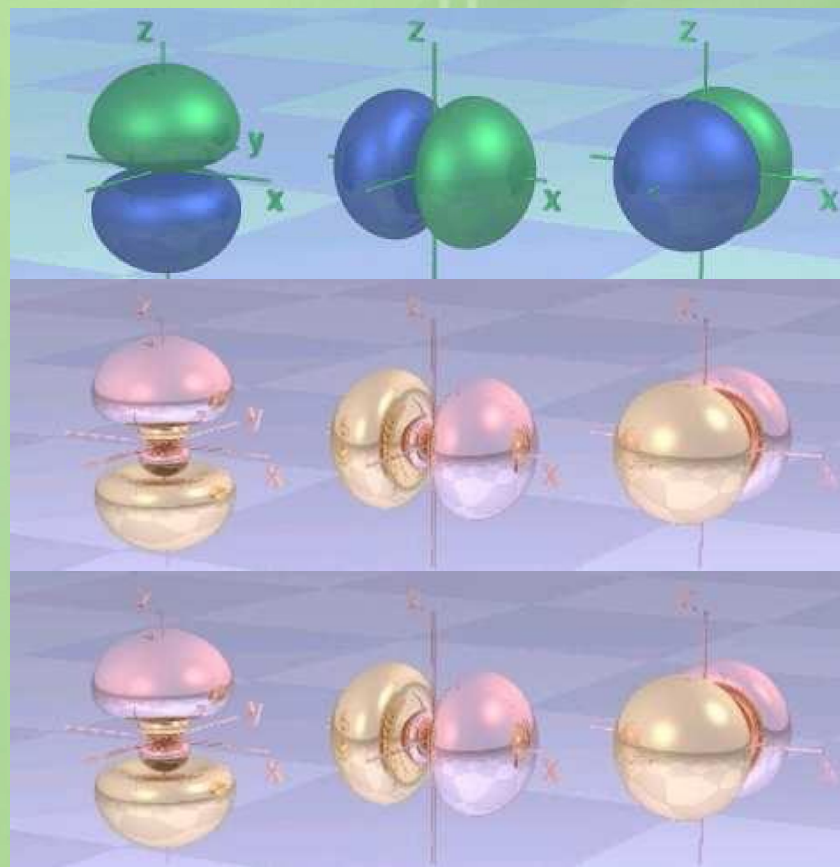
4



np_z

np_x

np_y

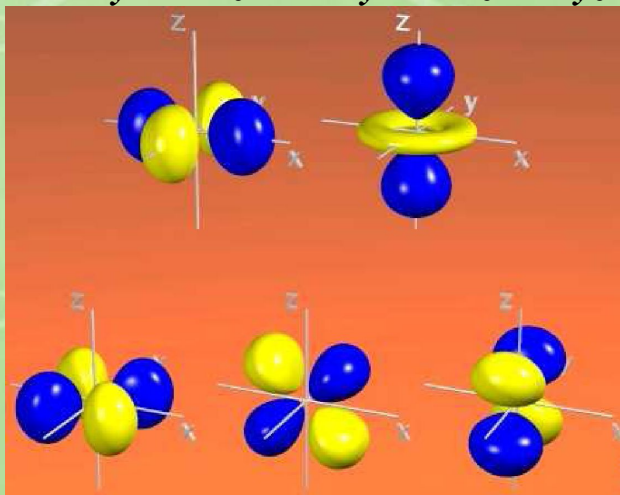


Граничные поверхности d - и f -орбиталей

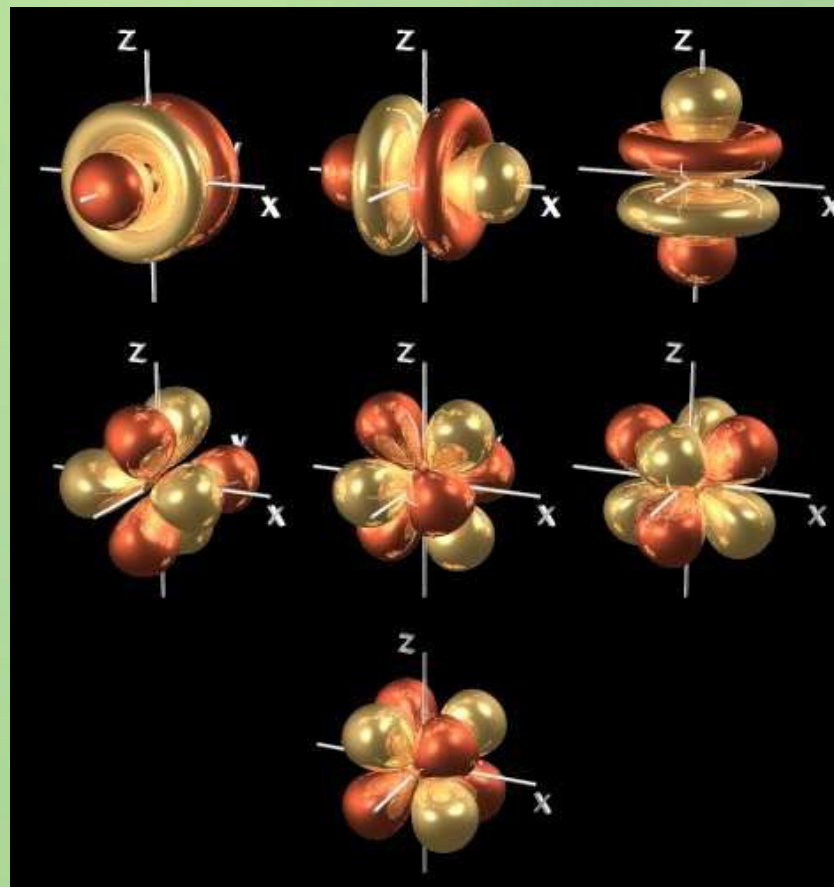
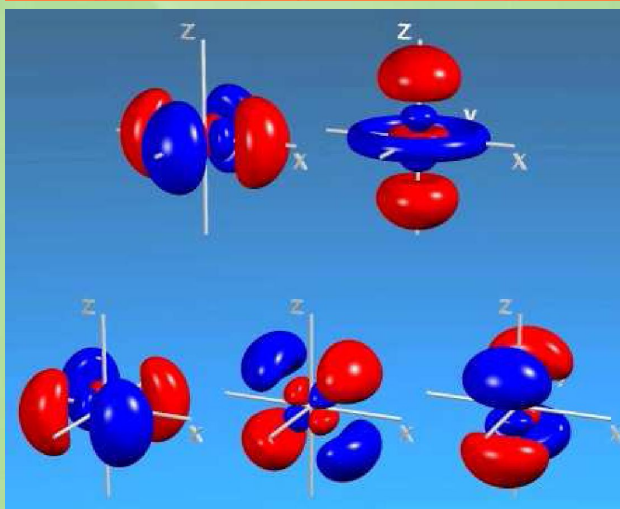
$nd_{x^2-y^2}$, nd_{z^2} , nd_{xy} , nd_{xz} , nd_{yz}

$4f_{y^3}$, $4f_{x^3}$, $4f_{z^3}$, $4f_{x(z^2-y^2)}$,
 $4f_{y(z^2-x^2)}$, $4f_{z(x^2-y^2)}$, $4f_{xyz}$

3



4



IV. Спиновое квантовое число m_s

1. **Определяет** – собственный угловой момент количества движения электрона, связанный с вращением вокруг своей оси
2. **Спин принимает значения:** $+1/2$ или $-1/2$



1926 г. Д. Уленбек и С. Гюудсмит предложили понятие «спин» – «вращающийся волчок»

Состояние любого электрона в атоме может быть полностью охарактеризовано определенным набором из четырех рассмотренных квантовых чисел.



При этом в атоме не может быть двух электронов с одинаковым набором всех четырех квантовых чисел.

Распределение электронов в атоме

1



В многоэлектронном атоме состояние электрона определяется принципом Паули.

Принцип Паули:

в атоме не может быть двух электронов, у которых все четыре квантовых числа были бы одинаковы

Следствия из принципа Паули:

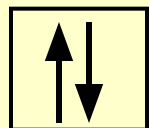
на одной орбитали может находиться не более двух электронов, отличающихся друг от друга спинами

максимальное число электронов на энергетическом подуровне равно $2(2l + 1)$

максимальное число электронов на энергетическом уровне равно $2n^2$

Следствия из принципа Паули:

1-ое следствие:
на одной орбитали может
находиться не более двух
электронов, отличающихся
друг от друга спинами:

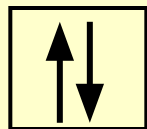


$+1/2; -1/2$

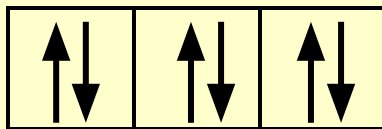
Следствия из принципа Паули:



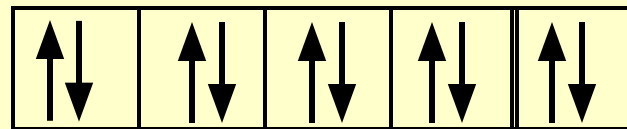
2-е следствие:
максимальное число электронов на
энергетическом уровне равно $2n^2$
 $n = 3; 2 \cdot 3^2 = 18$



3s



3p

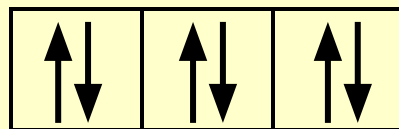


3d

Следствия из принципа Паули:

3-ое следствие:
максимальное число электронов на
энергетическом подуровне равно
 $2(2l + 1)$.

p-подуровень: $l = 1$; $2(2 \cdot 1 + 1) = 6$



Распределение электронов в атоме

2

Электроны в атоме (основное состояние) распределяются в соответствии с принципом минимальной энергии.

Принцип минимальной энергии (Ауфбау принцип):

электроны занимают наиболее низкое энергетическое состояние, отвечающее наиболее устойчивому его состоянию.

$n = 1; n = 2; n = 3; n = 4$ и т. д.

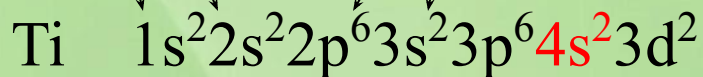
Правило Клечковского (частный случай принципа наименьшей энергии) :

- электроны размещаются последовательно на орбиталях, характеризующихся возрастанием суммы главного и орбитального квантовых чисел ($n + l$);
- при одинаковых значениях этой суммы раньше заполняется орбиталь с меньшим значением главного квантового числа n

Значения суммы $(n+l)$ для различных орбиталей

номер энергетического уровня

количество электронов
на подуровне



заполняется перед 3d !

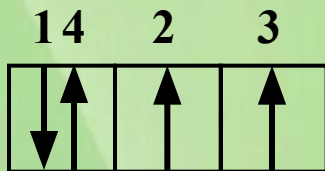
$n \backslash l$	0	1	2	3
		1		$n+l$
1	1s	2		
2	2s	2p	3	
3	3s	3p	3d	4
4	4s	4p	4d	4f
5	5s	5p	5d	5f
6	6s	6p	6d	6f
7	7s	7p	7d	7f

Заполнение одноптипных АО происходит по правилу Хунда.

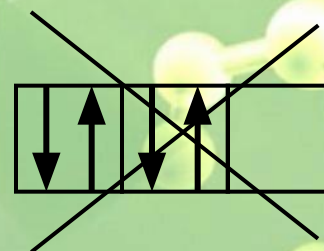


Правило Хунда:

в пределах энергетического подуровня электроны располагаются так, чтобы их суммарный спин был максимальным.



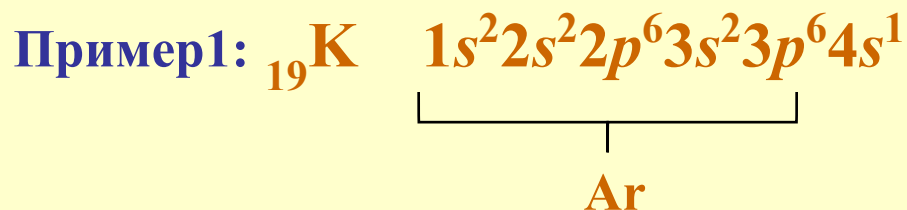
$$\Sigma m_s = (\frac{1}{2} + \frac{1}{2})$$



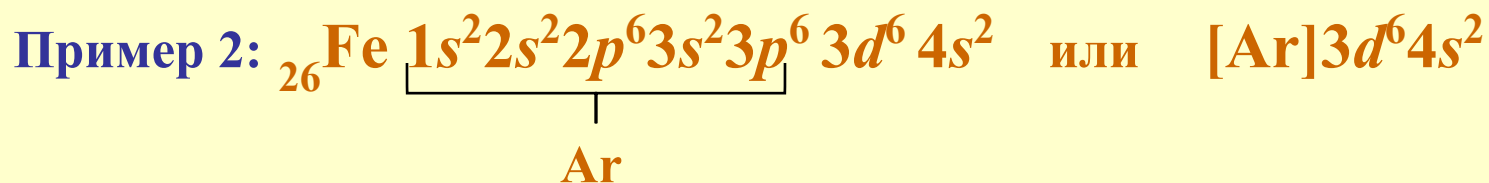
$$\Sigma m_s = 0$$

Способы составления схем распределения электронов в атоме:

1. В виде формул электронных конфигураций:

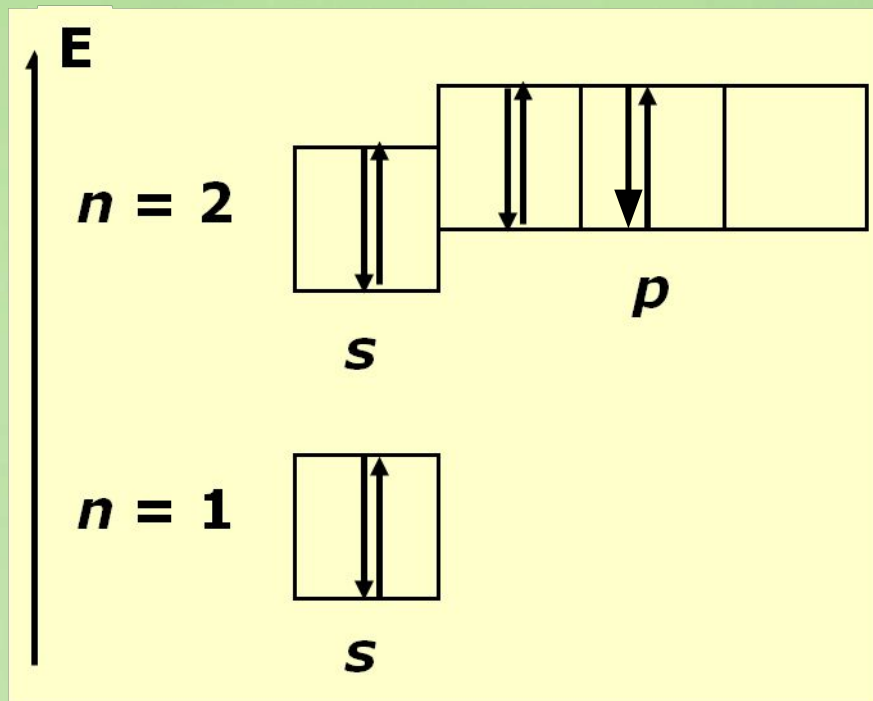


с учетом электронной конфигурации элемента 8А группы:

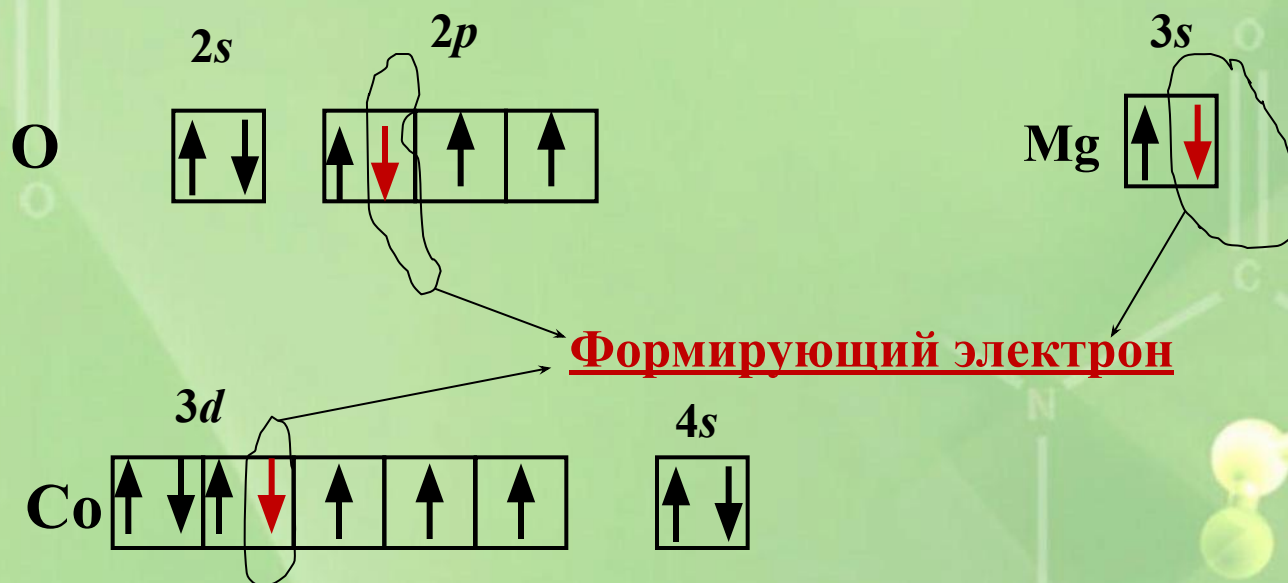


2. В виде графических формул АО

Пример: ${}_8\text{O } 1s^2 2s^2 2p^4$



Формирующий электрон – последний в атоме электрон, определяющий электронную конфигурацию элемента



В зависимости от того, на каком энергетическом подуровне находится формирующий электрон, различают четыре типа элементов: *s*-, *p*-, *d*-, *f*-элементы