

Атом, элемент, молекула.

Строение атома.

Атом. Элементарные частицы. Состав атомного ядра.

Химический элемент.

Атомная единица массы.

Масса атома. Изотопы. Изобары.

Молекула. Вещества молекулярного и немолекулярного строения.

Электроны в атоме. Орбитали.

Квантовые числа.

Электронные паспорта элементов.

Атом: общее определение

- **Атом** - наименьшая, химически неделимая, электронейтральная частица *химического элемента*, являющаяся носителем его свойств. Атом состоит из положительно заряженного ядра и отрицательно заряженных электронов, движущихся вокруг ядра. В состав атома входят элементарные частицы (в скобках показано их обозначение и заряд): **протоны** (1_1p , $Z = +1$), **нейтроны** (1_0n , $Z=0$), электроны (${}_{-1}^0e$ или \bar{e} , $Z = -1$).
Нуклоны (**протоны** и **нейтроны**) образуют ядро атома. Положительный заряд ядра определяется числом содержащихся в нём **протонов**.
Положительный заряд ядра компенсируется электронами, движущимися вокруг ядра. В атоме, не образовавшем химических связей, число электронов равно числу **протонов** в ядре.

Химический элемент

■ **Химический элемент** - совокупность атомов, имеющих **одинаковый заряд ядра**. Число протонов в ядре атома элемента соответствует **номеру элемента** в Периодической системе. Определяемый числом протонов, заряд ядра атома для каждого элемента – постоянная величина. Изменение числа протонов в ядре возможно в результате ядерных реакций и приводит к образованию атома другого элемента. На сегодняшний день известно 118 элементов, из которых в природе встречается около 90, а остальные были получены искусственно путём реакций ядерного синтеза.

Элементы делятся на металлы и неметаллы, причём металлами является большая часть элементов.

Атомная масса

Соотношение масс частиц

$$m_p \approx m_n$$

$$m_p \gg m_e$$

(~ в 1837 раз)

Вследствие такого соотношения основная часть массы атома сосредоточена в его ядре. При расчёте массы атома (A) учитывают лишь массы нуклонов (протонов (Z) и нейтронов (N)), пренебрегая массой электронов:

$$A = Z + N$$

Атомная единица массы

Выражая массу одного атома в привычных нам единицах измерения массы, мы получим такую громоздкую запись:

$$m({}^{12}\text{C}) = 1,993 \times 10^{-26} \text{ кг}$$

Масса атома слишком мала, и для удобства работы со столь малыми величинами необходима другая точка отсчёта, новая единица измерения. В качестве такой единицы была принята **атомная единица массы**, $1/12$ массы изотопа атома углерода ${}^{12}\text{C}$:

$$\text{масса } 1/12({}^{12}\text{C}) = 1,66 \times 10^{-27} \text{ кг} = \underline{1 \text{ а.е.м.}}$$

В этом случае массу любого атома можно выразить целым числом. Например, атома водорода будет равна 1, а углерода 12:

$$\text{масса } ({}^{12}\text{C}) = 1,993 \times 10^{-26} \text{ кг} = 12 \text{ а.е.м.}$$

Для Ar (относительной атомной массы) не указывают единиц измерения, т.к.:

$$Ar(\text{атома}) = \frac{m(\text{атома})}{m(\text{а.е.м.})} = \text{число}$$

Атомная масса. Изотопы. Изобары

Для каждого элемента в Периодической системе указана его относительная атомная масса (A_r), которая для большинства элементов выражена дробным числом: $A_r(\text{В}) = 10,81$, $A_r(\text{Ge}) = 72,59$, $A_r(\text{Cl}) = 35,45$ и т.д.

Дробные значения A_r объясняются тем, что при её расчете для учитывается доля каждого природного **изотопа** элемента.

Изотопы – атомы одного элемента с разным числом нейтронов в ядре и вследствие этого с разной атомной массой.

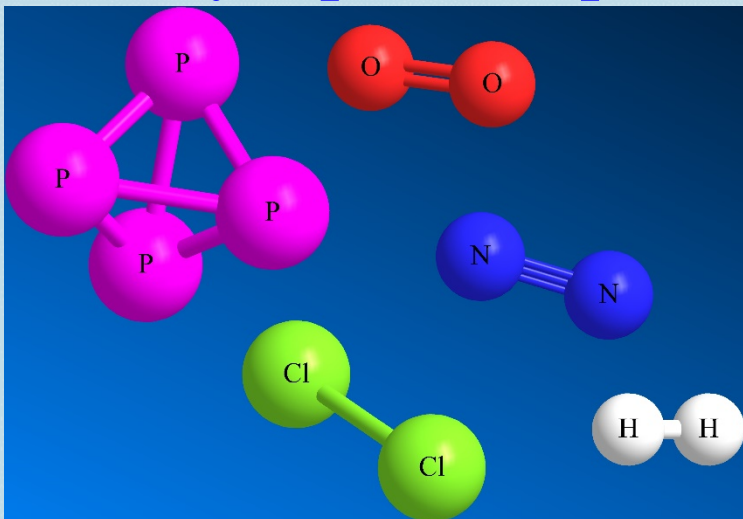
Например, водород представлен двумя стабильными изотопами – ^1H (протий) и ^2H или ^2D (дейтерий), а также радиоактивным изотопом ^3H или ^3T (тритий). Азот имеет два стабильных изотопа (^{14}N и ^{15}N) и 15 короткоживущих радиоактивных, в том числе, полученных искусственно.

Атомы разных элементов, обладающие одинаковой массой, называются **изобарами**, например, ^{40}Ar , ^{40}K и ^{40}Ca или ^{234}Th и ^{234}U . Число протонов в ядре в этом случае будет различным, т.к. заряд ядра уникален для каждого элемента.

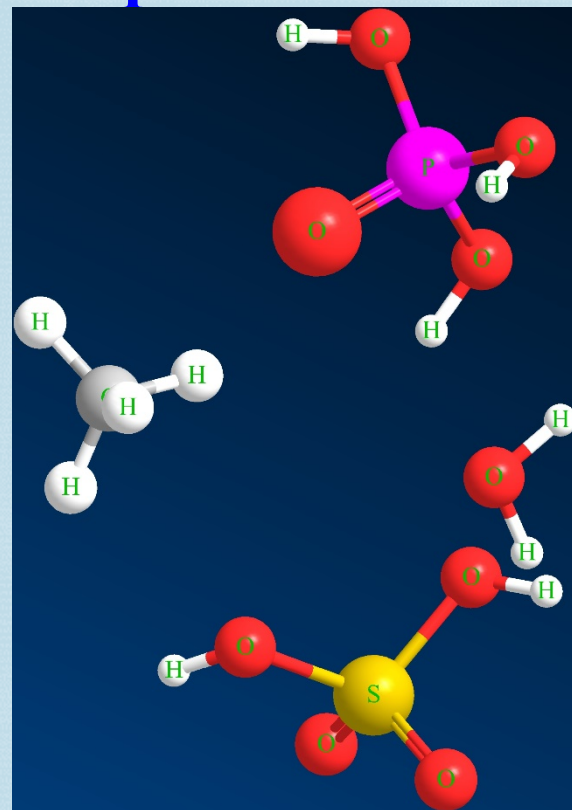
Молекула вещества

■ Молекула - это наименьшая частица данного вещества, обладающая его химическими свойствами, которые определяются строением молекулы (характером связи атомов в её составе).

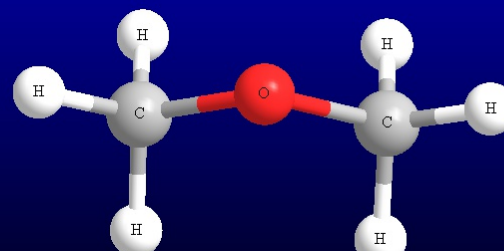
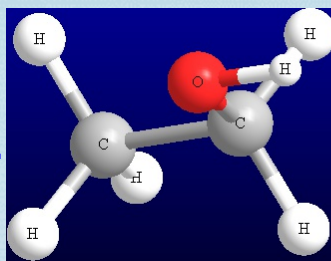
Из молекул состоят только вещества молекулярного строения.



Молекулы простых веществ состоят из атомов одного элемента, сложных веществ – из атомов разных элементов.

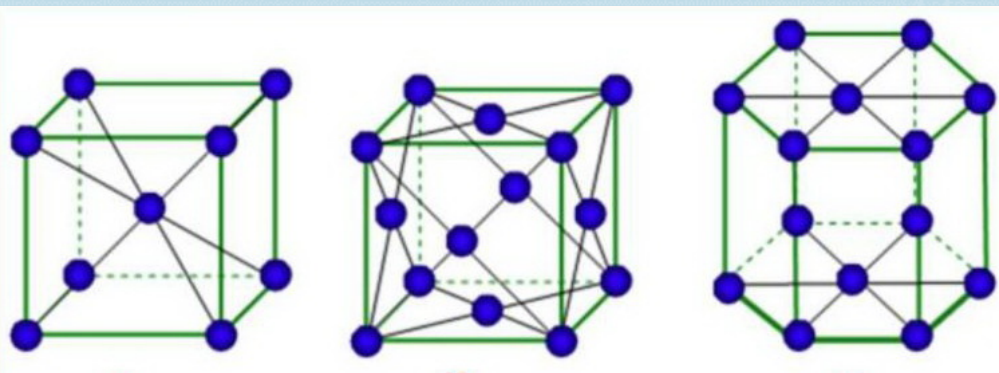


Строение молекул определяет свойства органических веществ: спирт и эфир одинаковы по составу, но спирт растворим в воде, а эфир нет.

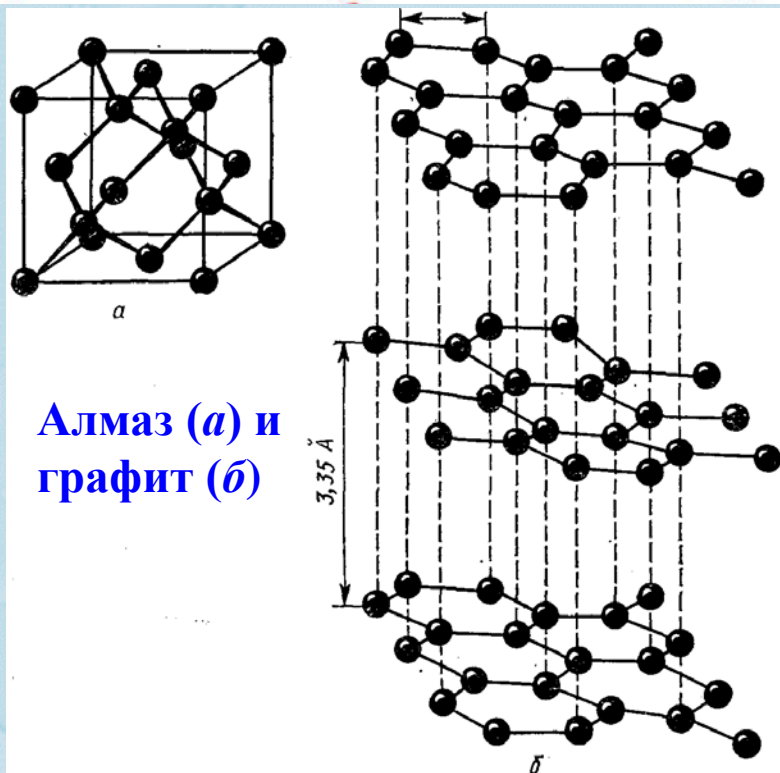


Вещества немолекулярного строения

Наряду с веществами молекулярного строения существует множество веществ немолекулярного строения. Это все металлы, их оксиды и гидроксиды, соли. Не образуют молекул алмаз и графит, диоксид кремния.



Виды кристаллических решёток металлов. Вид решётки определяет пластичность металла, его плотность и другие физические свойства.



Алмаз (а) и графит (б)

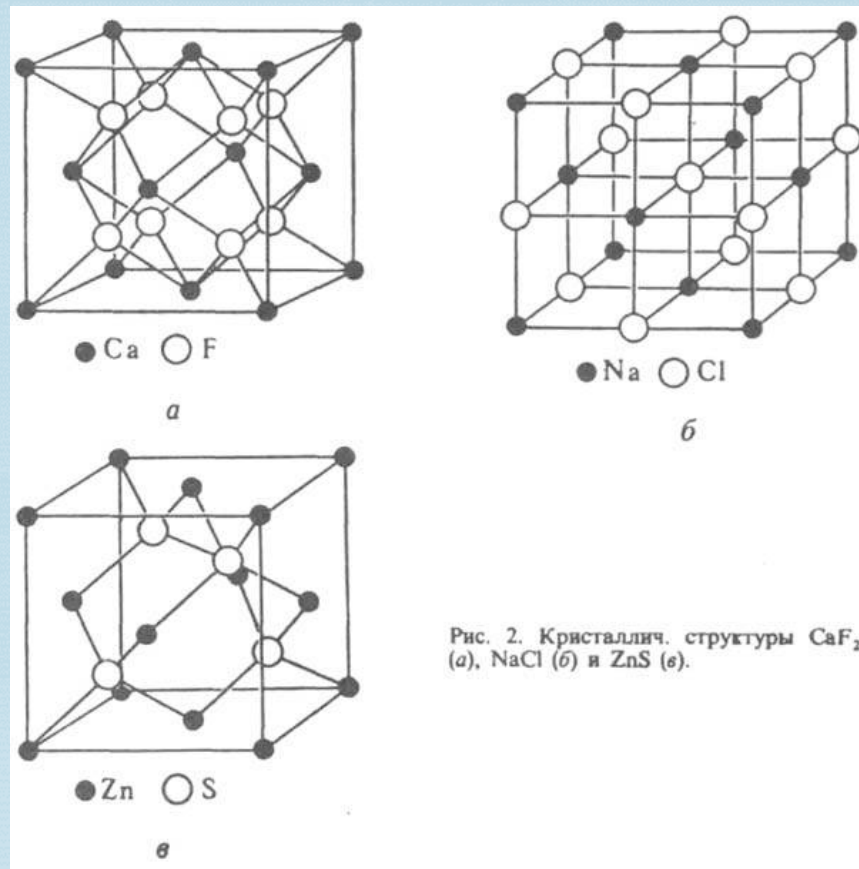


Рис. 2. Кристаллич. структуры CaF_2 (а), NaCl (б) и ZnS (в).

Электроны

Электроны (\bar{e}) движутся в поле ядра. Они обладают двойственной природой (**корпускулярно-волновой дуализм**), сочетая свойства частицы и электромагнитной волны. Как частица \bar{e} имеет массу покоя. Но движение \bar{e} имеет волновой характер: обладает определённой амплитудой, длиной волны, частотой и т.д.

Понятие орбитали

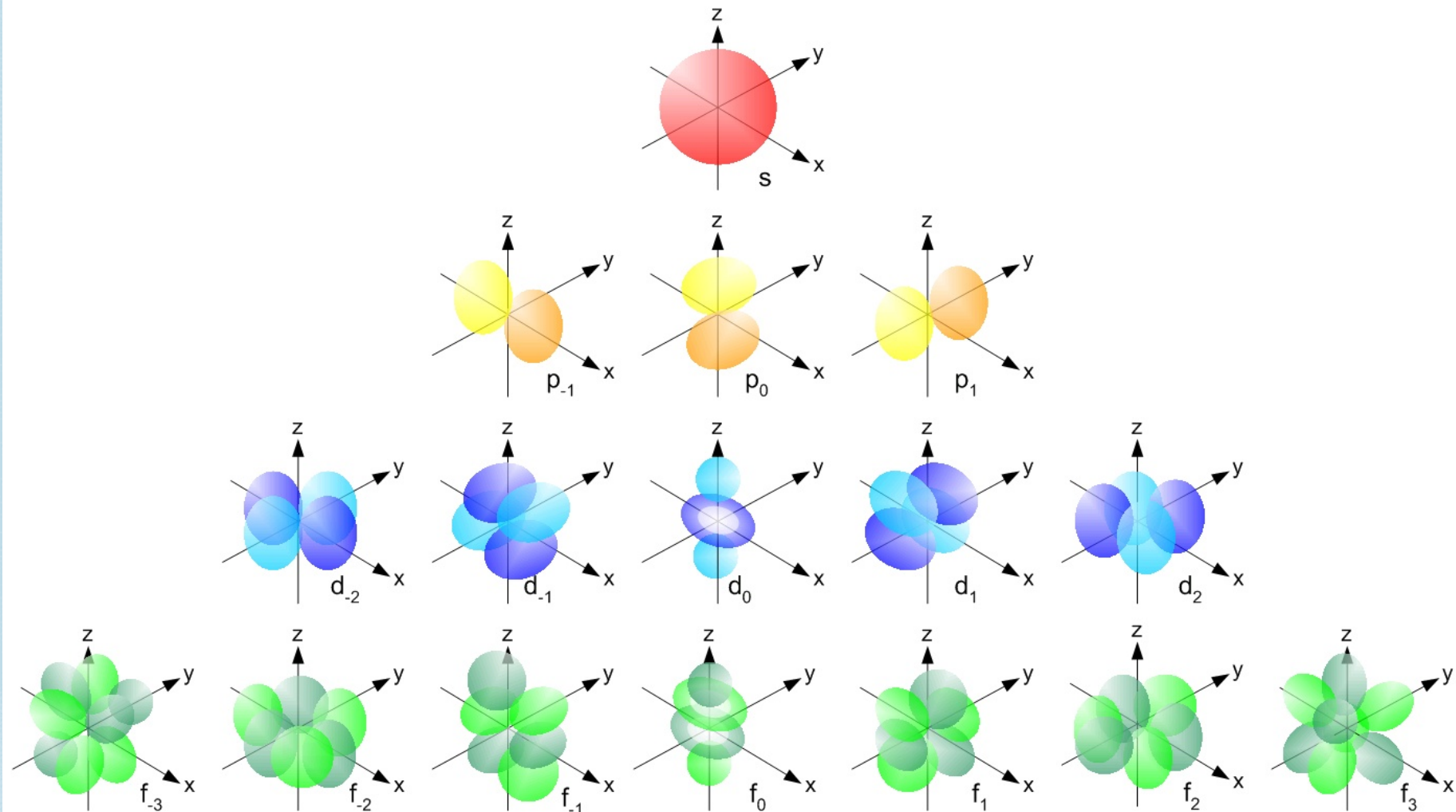
Скорость движения электронов очень велика, а размер атома мал, вследствие чего невозможно одновременно определить местонахождение и скорость электрона. Это положение постулирует основополагающий принцип квантовой механики - *принцип неопределённости Гейзенберга*.

Для описания положения электрона в атоме используется понятие «орбиталь».

Орбиталь - область пространства вблизи атомного ядра, в пределах которой наиболее вероятно нахождение электрона. Атомы элементов содержат орбитали разных типов. Их число зависит от положения элемента в ПСЭ. На каждой орбитали может находиться до двух электронов.

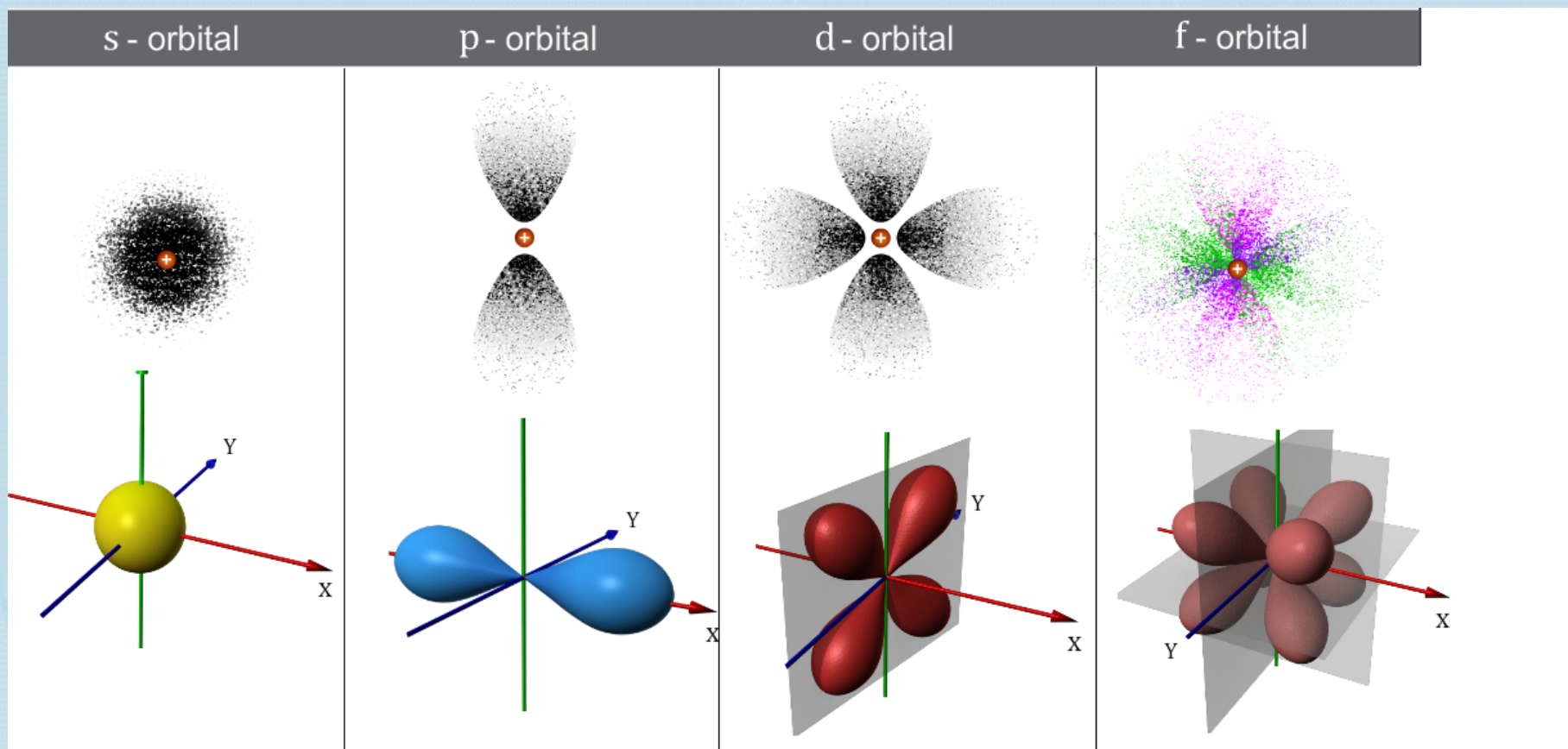
Форма орбиталей

Орбитали имеют различную форму: s -орбиталь – сферическую, p -орбитали – трёх взаимно перпендикулярных объёмных восьмёрок. Форма d - и f -орбиталей более сложная.



Типы орбиталей

Орбитали характеризуют не траекторию движения, а область, в которой наиболее вероятно обнаружение электрона. На схеме нижние изображения показывают «форму» орбиталей разных типов, а верхние – области наиболее вероятного нахождения электрона (чем выше плотность точек, тем больше шансов встретить электрон).



Орбитали и положение электрона в атоме

Каждый электрон в атоме имеет свой уникальный «адрес», описываемый квантовыми числами:

n – главное квантовое число, соответствует № электронного слоя;

l – орбитальное квантовое число, обозначает тип орбитали;

m – магнитное квантовое число, обозначает положение орбитали в пространстве;

s – спиновое квантовое число, обозначает собственный момент вращения электрона.

Используя квантовые числа, можно определить общее число орбиталей ($N_{\text{орб.}}$), относящихся к данному энергетическому уровню:

$$N_{\text{орб.}} = n^2$$

Аналогично определяем число электронов (N), которое может находиться на данном энергетическом уровне (в данном электронном слое):

$$N = 2n^2$$

Принцип Паули и правило Хунда

Заполнение орбиталей электронами регламентируется принципом Паули:

В атоме не может быть электронов с одинаковым значением всех четырех квантовых чисел. (Следовательно, на одной орбитали может находиться не более двух электронов с противоположными спинами).

Правило Хунда:

суммарное значение спинового квантового числа электронов данного подслоя должно быть **максимальным**.

(Первоначально орбитали заполняются одиночными электронами с параллельными спинами).

На схеме показаны разрешённые и неразрешённые (запрещённые) варианты расположения электронов

Разрешенные и неразрешенные электронные конфигурации

Разрешенная конфигурация **Неразрешенные конфигурации**

Принцип Паули

электронная ячейка уровень энергии

Правило Хунда
(на примере атома углерода)

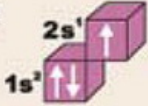

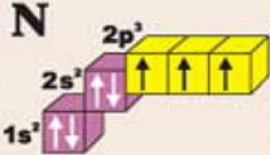

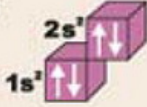

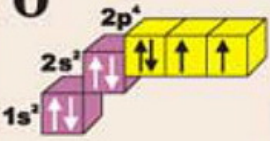

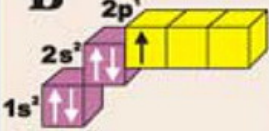



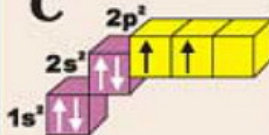

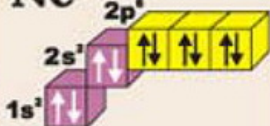

↑↓ 2s ↑ ↑ — —
1s 2px 2py 2pz

↑↓ 2s ↑↓ — — —
1s 2px 2py 2pz

Порядок заполнения орбиталей у элементов II периода

Заполнение («заселение») орбиталей электронами происходит в строго определённой последовательности:

В стационарном (наиболее устойчивом) состоянии запас энергии атома минимален, поэтому первыми заполняются орбитали с наименьшим запасом энергии. На орбиталях каждого типа сначала появляются одиночные электроны.

Электронная схема	Орбитальная модель	Электронная схема	Орбитальная модель
Li 		N 	
Be 		O 	
B 		F 	
C 		Ne 	

Строение многоэлектронных атомов

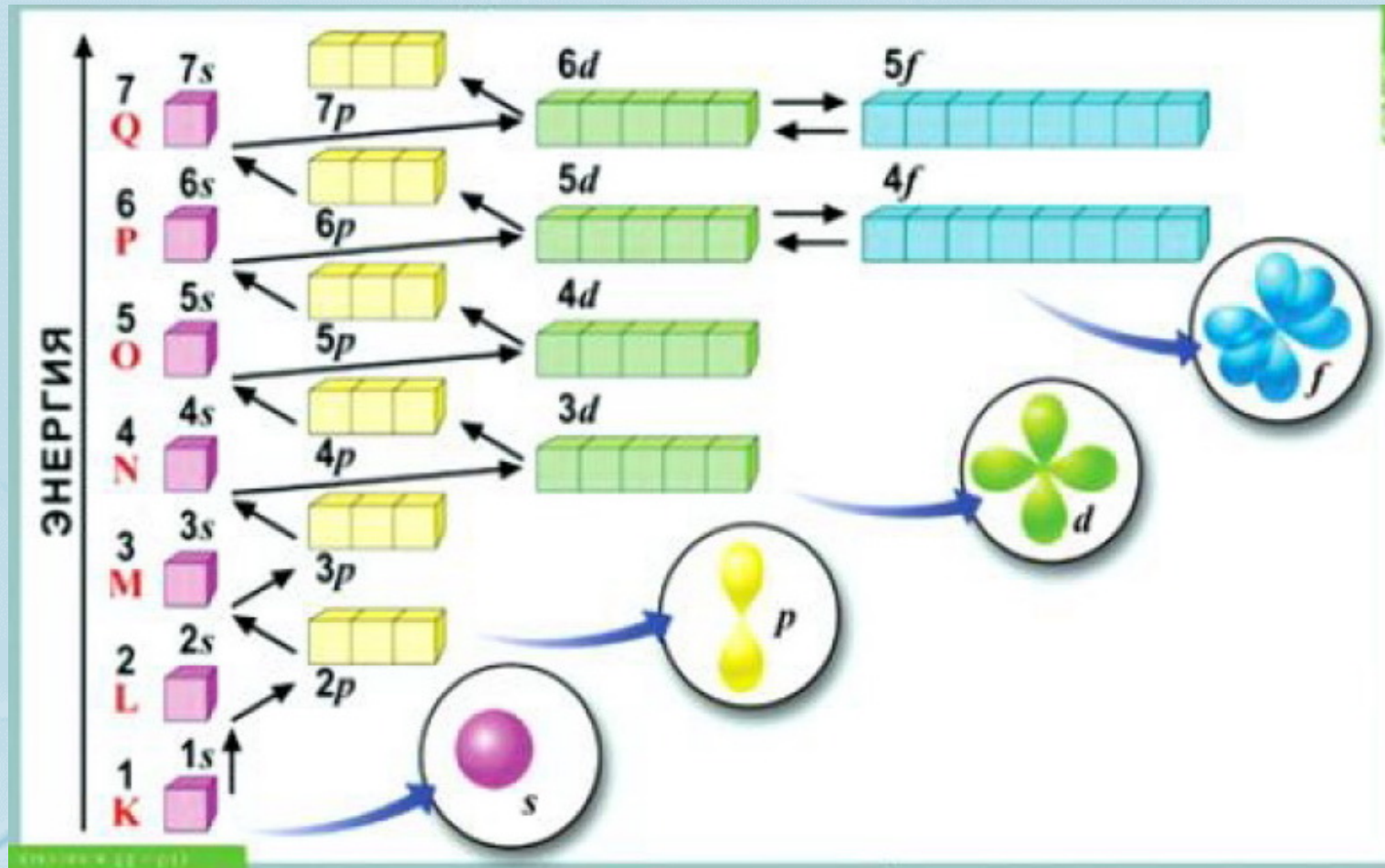
На внешнем слое атома может находиться от 0 до 8 электронов.
Заполнение *d*- и *f*-орбиталей начинается после того, как электронный слой, к которому относятся эти орбитали, оказывается вторым (*d*-орбитали) или третьим (*f*-орбитали) снаружи.

s-элементы
1-2 \bar{e}

p-элементы
3-8 \bar{e}

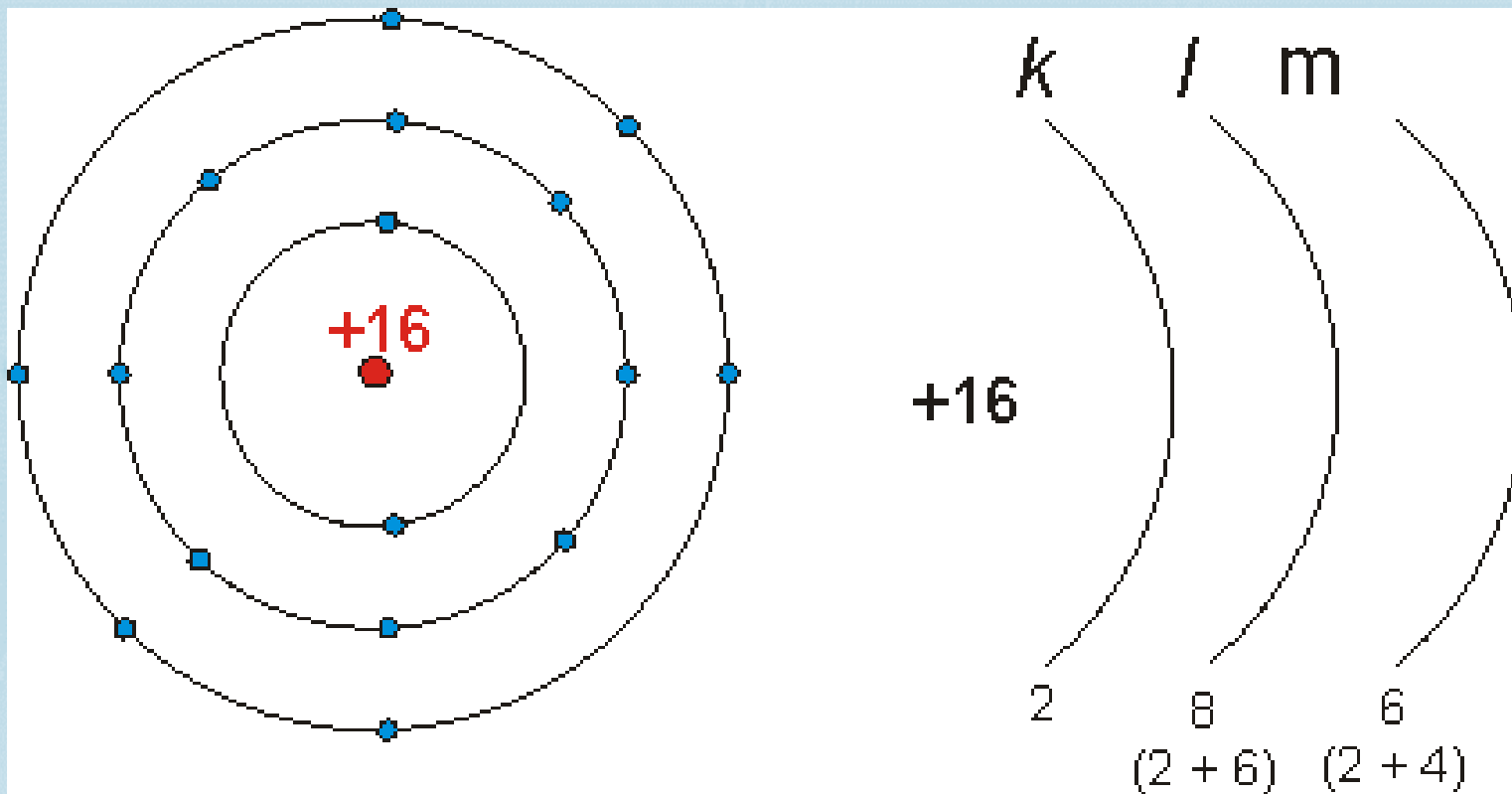
d-элементы
0-2 \bar{e}

f-элементы
2 \bar{e}



Способы изображения орбиталей

На рисунке представлено схематичное изображение атома серы и вариант его графического изображения:

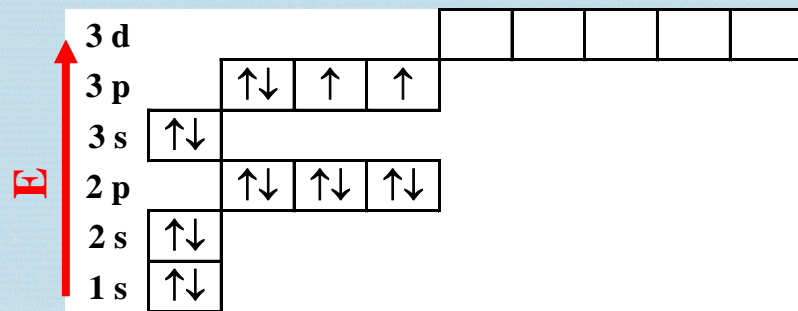
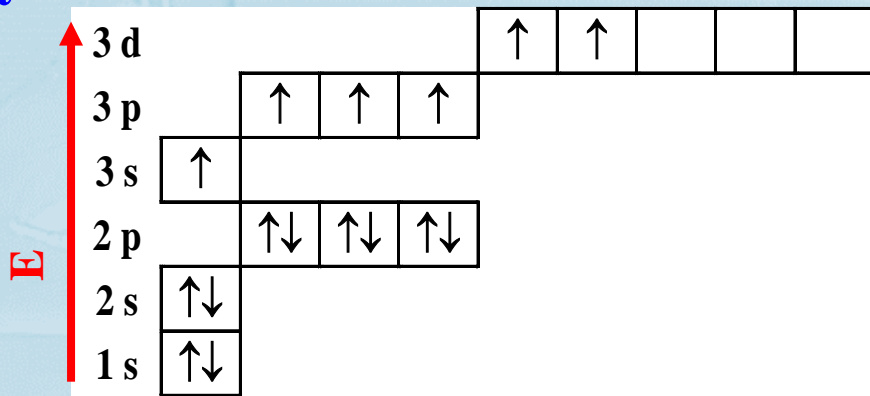


Недостатками такого варианта являются его громоздкость, а также то, что он не даёт представления о числе вакантных орбиталей в каждом из слоёв и возможных электронных конфигурациях атома.

Квантовые ячейки

Более удобным, наглядным и информативным способом изображения электронного строения атомов является вариант с изображением орбиталей в виде квантовых ячеек:

1. Атом серы в стационарном состоянии (запас энергии атома минимален): на внешнем слое есть 2 неспаренных электрона. Следовательно, сера может проявлять валентность, равную двум.



Стрелкой показано повышение энергии электронов на разных орбиталях

2. В возбуждённом состоянии происходит переход **одного** или **двух** электронов на вакантные 3d-орбитали. Валентность серы, соответственно, будет равной IV или VI (числу неспаренных электронов).

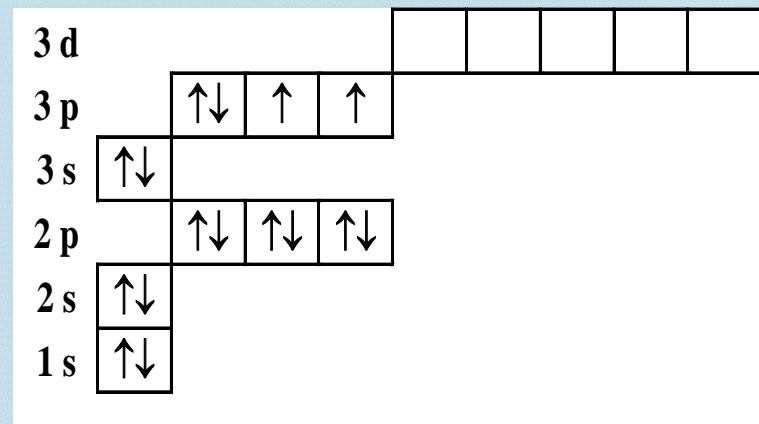
Электронные паспорта элементов

Наиболее компактным и распространённым способом изображения электронного строения атомов является запись так называемого «электронного паспорта» элемента.

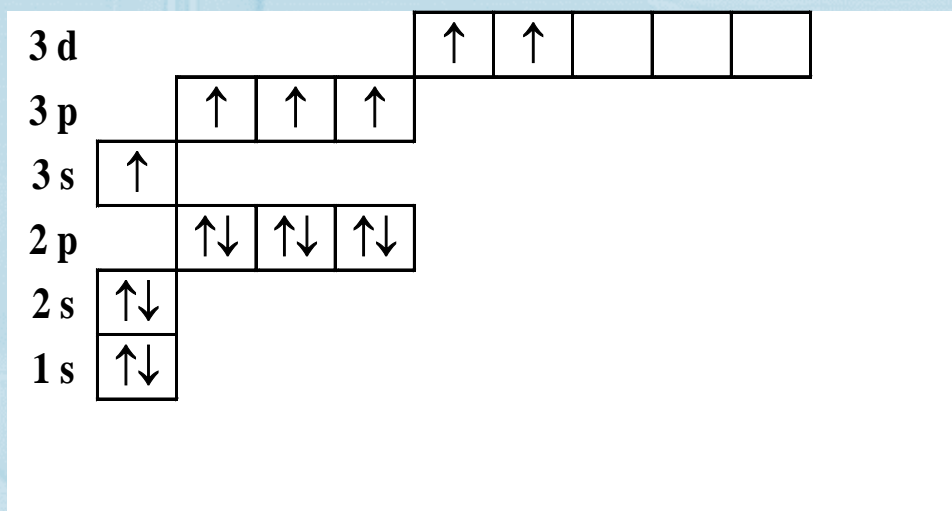
Атом серы в стационарном состоянии будет изображать следующая запись:



(незаполненные орбитали обычно не указываются)



Атому серы в возбуждённом состоянии будет соответствовать запись: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^3 3d^1$, что соответствует S(IV), или $1s^2 2s^2 2p^6 3s^1 3p^3 3d^2$, (для S(VI))



Валентность и внешний электронный слой атома (на примере элементов VA подгруппы)

На схеме видно, что у атомов элементов подгруппы в стационарном состоянии на внешнем энергетическом уровне есть 3 неспаренных электрона. Соответственно, в этом состоянии атомы могут образовывать 3 валентные связи с другими атомами: NH_3 , PH_3 , AsH_3 и т.д.

У Р и элементов, расположенных ниже, есть вакантные d-орбитали, на которые может переходить электрон с s-орбитали. В результате эти элементы могут проявлять высшую валентность V. Для азота это нехарактерно, т.к. его атом не имеет вакантных орбиталей. Высшей валентностью азота будет IV. В то же время высшая степень окисления азота равна +5.

<i>N</i>	<i>l</i>	<i>s</i>	<i>p</i>															
	<i>n</i>		↑↓	↑	↑	↑												
	2																	
<i>P</i>	<i>l</i>	<i>s</i>	<i>p</i>			<i>d</i>												
	<i>n</i>		↑↓	↑	↑	↑												
	3																	
<i>As</i>	<i>l</i>	<i>s</i>	<i>p</i>			<i>d</i>						<i>f</i>						
	<i>n</i>		↑↓	↑	↑	↑												
	4																	
<i>Sb</i>	<i>l</i>	<i>s</i>	<i>p</i>			<i>d</i>						<i>f</i>						
	<i>n</i>		↑↓	↑	↑	↑												
	5																	
+ 9g-орбиталей																		
<i>Bi</i>	<i>l</i>	<i>s</i>	<i>p</i>			<i>d</i>						<i>f</i>						
	<i>n</i>		↑↓	↑	↑	↑												
	6																	
+ 9g-орбиталей + 11h-орбиталей																		