

Московский государственный технический
университет им. Н. Э. Баумана.
Калужский Филиал. Кафедра химии.

Строение атома.

Методическое пособие для студентов I курса.

Составила: Пивченко З. Н.
старший преподаватель
кафедры ФН6-КФ.

Рецензент: Савиткин Н. И.
кхн, доцент.

Калуга
2000

Содержание.

1. Введение
2. Квантовые числа
3. Электронные формулы
4. Сокращенные электронные формулы.
s, p, d, f – элементы
5. Валентные возможности элементов.

§ 1. Введение.

Атом – электронейтральная частица, состоящая из положительно заряженного атомного ядра и отрицательно заряженных электронов.

Атом – сложная делимая частица, в состав ядра его входят элементарные частицы: протоны и нейтроны. Заряд ядра атома определяется числом протонов (Z). Число электронов в атоме соответствует заряду ядра, т.е. (Z).

Электрон – легчайшая элементарная частица атома, несущая отрицательный электрический заряд, равный $1,602 \cdot 10^{-19}$ Кл. Заряд электрона условно принимают за (-1) . Масса электрона равна $9,1085 \cdot 10^{-28}$ г. Электрон обозначается символом e .

Электрон характеризуется двойственной природой, обладая одновременно свойствами частицы и волны. В 1926 г. Э. Шредингер показал, что движение электрона в атоме может быть описано с помощью волновой функции (Ψ), которая указывает на вероятность нахождения электрона в любой точке сферической области с ядром в центре. Следует говорить не о пути движения электрона, а об электронном облаке и в связи с этим о большей или меньшей электронной плотности в данной точке.

Область в пространстве, в которой вероятность пребывания электрона максимальна, называется орбиталью.

§ 2. Квантовые числа.

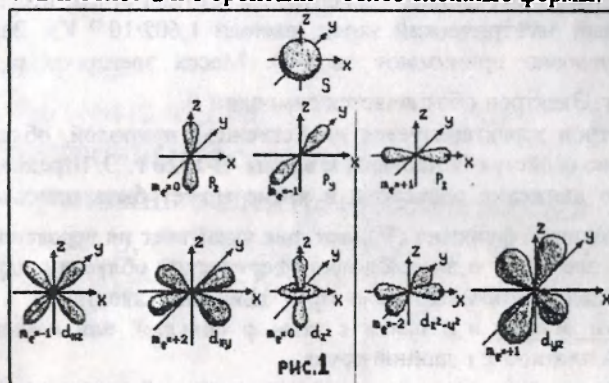
Орбитали могут отличаться одна от другой энергией, формой электронного облака и ориентацией электронного облака относительно ядра атома. Эти характеристики орбитали можно задать определенными числами, которые получили название квантовых чисел. Их обозначают: n – главное квантовое число, l – орбитальное квантовое число, m – магнитное квантовое число, s – спиновое квантовое число.

Главное квантовое число n определяет энергию электрона и размеры электронных облаков. Энергия электрона главным образом зависит от расстояния электрона от ядра: чем ближе к ядру находится электрон, тем меньше его энергия. Главное квантовое число может принимать значения целых чисел: 1, 2, 3 и т.д., иногда обозначают как K, L, M, N и т.д. уровни.

Орбитальное квантовое число ℓ определяет пространственную форму орбитали; принимает значения от 0 до $(n-1)$. Орбитальное квантовое число ℓ обычно обозначают буквами в соответствии со схемой:

Орбитальное квантовое число ℓ	0	1	2	3	4	5
Обозначение	s	p	d	f	g	h

Каждому значению ℓ соответствует определенная форма орбитали: $\ell=0$ – s-орбиталь в форме шара, $\ell=1$ p-орбиталь в форме гантели, $\ell=2$ и более d и f-орбитали – более сложные формы. Формы



граничных поверхностей s, p, d орбиталей показаны на рис. 1.

Электроны, орбитальное квантовое число которых равно нулю, называются s-электронами; если $\ell=1$ – p-электронами; если $\ell=2$ – d-электронами, если $\ell=3$ – f-электронами.

Магнитное квантовое число m определяет ориентацию орбитали в пространстве и связано с орбитальным квантовым числом ℓ , принимая значения от $+\ell$ через 0 до $-\ell$. Например, если $\ell=2$, то m имеет пять разрешенных ориентаций: -2, -1, 0, +1, +2 (см. рис. 1).

Спиновое квантовое число s характеризует вращение электрона вокруг собственной оси, принимая два возможных значения: $+\frac{1}{2}$ и $-\frac{1}{2}$. Спины электронов обозначают стрелками, направленными в противоположные стороны: $\uparrow$ и $\downarrow$.

Итак, состояние электрона в атоме полностью характеризуется четырьмя квантовыми числами: n , ℓ , m , s . В таблице I приведены все возможные комбинации квантовых чисел ℓ , m , s для каждого значения числа n .

Таблица I. Квантовые числа для различных состояний электронов.

N	1	2	3
ℓ	0	1	2
M	0	-1, 0, +1	-2, -1, 0, +1, +2
S	$\pm \frac{1}{2}$	$\pm \frac{1}{2}$	$\pm \frac{1}{2}$
Символ орбитали	1s	2s	3s

N	4
ℓ	0, 1, 2, 3
M	-3, -2, -1, 0, +1, +2, +3
S	$\pm \frac{1}{2}$
Символ орбитали	4s, 4p, 4d, 4f

Принцип Паули:

в атоме не может быть электронов, обладающих одинаковым набором всех четырех квантовых чисел: n, ℓ, m, s

Следствие из принципа Паули:

1. Количество орбиталей на подуровне определяется по формуле: $2\ell + 1$
2. Количество электронов на подуровне определяется по формуле: $2(2\ell + 1)$
3. Максимальное число электронов на уровне определяется по формуле: $2n^2$

Задание №1.

Ответьте на вопросы контрольной карточки №1.

Контрольная карточка №1.

№ вопроса	Вопросы	Ответы
1.	Какое квантовое число характеризует форму электронного облака?	ℓ n m s
2.	Как обозначается состояние электрона, у которого главное квантовое число равно 5, а орбитальное квантовое число 2?	5s 5p 5d 5f
3.	По какой формуле можно определить общее число орбиталей в пределах данного энергетического уровня?	$2\ell+1$ $2(2\ell+1)$ n^2 $2n^2$
4.	Какие значения может принимать магнитное квантовое число?	от $-\frac{1}{2}$ до $+\frac{1}{2}$ от ℓ до ∞ от $-\ell$ до $+\ell$ от 0 до $(n-1)$
5.	Какие значения принимает ℓ при $n=4$	0, 1 0, 1, 2 0, 1, 2, 3 0, 1, 2, 3, 4

§ 3. Электронные формулы.

Распределение электронов по различным разрешенным уровням, подуровням, орбиталям подчиняется следующим основным положениям:

- 1) принципу наименьшей энергии;
- 2) принципу Паули;
- 3) правилу Гунда

Принцип наименьшей энергии: электроны заполняют энергетические уровни и подуровни в порядке возрастания их энергии, начиная с самой низкой.

Порядок возрастания энергии в атомах:

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

Принцип Паули позволяет вычислить максимальную емкость уровней и подуровней

Таблица II. Ёмкость уровня.

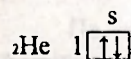
n	ℓ	Количество орбиталей на подуровне $(2ℓ+1)$	Количество электронов на подуровне $2(2ℓ+1)$	Количество электронов на уровне $2n^2$
1	0(s)	1	2	2
2	0(s)	1	2	8
	1(p)	3	6	
3	0(s)	1	2	18
	1(p)	3	6	
	2(d)	5	10	
4	0(s)	1	2	32
	1(p)	3	6	
	2(d)	5	10	
	3(f)	7	14	

Правило Гунда.

В данном подуровне электроны стремятся занять энергетические состояния таким образом, чтобы суммарный спин был максимальным.

Иными словами, орбитали данного подуровня заполняются сначала по одному, затем по второму электрону.

Зная максимальную емкость уровней и подуровней, можно составлять электронные формулы элементов (условная запись распределения электронов в атоме). При составлении схем распределение электронов в атоме придерживаются следующих обозначений: клетка $\square$ - свободная орбиталь, стрелка $\uparrow$ - электрон, пара стрелок $\uparrow\downarrow$ - два электрона с противоположной ориентацией спинов, клетка со стрелкой $\uparrow$ - электрон, находящийся на данной орбитали. Рядом с квадратом (сверху или снизу квадрата) пишут значения главного и орбитального квантовых чисел, относящихся к данной орбитали. Например:



То же самое можно записать так: $1s^2$ (читается «один-эс-два»). Здесь коэффициент перед символом подуровня указывает на его принадлежность к данному уровню, а степень у символа - на число электронов данного подуровня.

При сопоставлении периодической системы Д. И. Менделеева с изложенной картиной строения электронной оболочки атома были установлены следующие закономерности:

1. Порядковый номер элемента соответствует общему числу электронов в атоме.
2. Номер периода соответствует числу энергетических уровней в атоме, заполненных электронами.

3. Номер группы определяет число электронов на внешнем или предвнешнем уровне. В самом внешнем квантовом уровне не может быть более 8 электронов.

При написании электронных формул атомов элементов следует учитывать эти закономерности.

Примеры составления электронных и электронно-структурных формул атомов некоторых элементов.

Водород – период I, группа 1, порядковый номер 1, следовательно в атоме один электрон и он должен находиться на первом энергетическом уровне (принцип наименьшей энергии). Электронная формула атома водорода записывается $1s^1$. Электронно-структурная схема атома водорода записывается так:

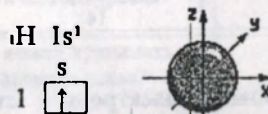


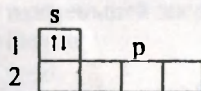
Схема атома водорода

Гелий – период I, порядковый номер 2, следовательно в атоме два электрона и располагаются они на первом квантовом уровне на орбитали s, но электронная формула гелия – $1s^2$, электронно-структурная формула

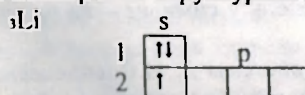


У элементов II периода (Li – Ne) начинает заполняться второй энергетический уровень (см. таблицу II).

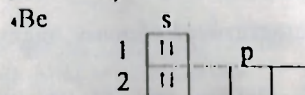
Возможные энергетические состояния у элементов второго периода можно схематически записать $1s^2 2s 2p$ или



Электронная формула первого элемента II периода Li такова: $1s^2 2s^1$. Электронно-структурная формула Li:

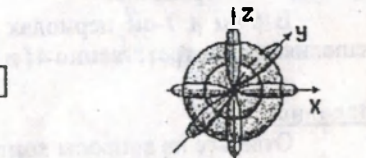
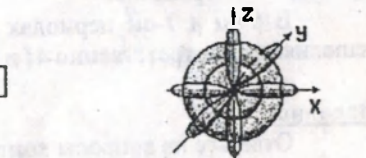
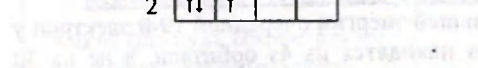


Для следующего элемента бериллия: $1s^2 2s^2$



15

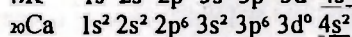
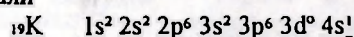
3



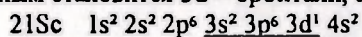
У элементов IV периода начинает заполняться четвертый уровень ($n=4$), состоящий из 4s, 4p, 4d и 4f – подуровней

	s	p	d	f
N=4				

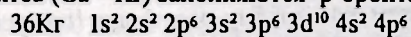
По принципу наименьшей энергии очередной 19-й электрон у атома K и 20-й у атома Ca находятся на 4s орбитали, а не на 3d орбитали



У следующих за Ca элементов /Sc – Zn/ энергетически более выгодным становится 3d – орбитали, а не 4p – орбиталь.



После заполнения 3d – орбиталей у последующих шести элементов (Ga – Kr) заполняются p-орбитали внешнего слоя.



В 5-м периоде заполнение электронных слоев происходит, как и в IV периоде, а именно: у двух первых (Rb – Sr) и шести последних (In – Xe) заполняется внешний слой, у (γ - Cd) – 4d - орбиталь.

В 6-ом и 7-ом периодах у элементов (Ge – Lu) и (Th – Lr) заполняется соответственно 4f и 5f - орбитали.

Задание.

Ответьте на вопросы контрольной карточки №2.

Контрольная карточка №2.

№ вопроса	Вопросы	Ответы
1.	Какое максимальное количество электронов может находиться на f-подуровне?	2 14 18 32
2.	Какая формула соответствует максимальному числу электронов на данном энергетическом уровне?	n^2 $2n^2$ $2(2\ell+1)$ $2\ell+1$
3.	Какой из приведенных подуровней будет заполняться электронами в последнюю очередь?	5d 4f 6s 5p
4.	Какому из приведенных элементов соответствует электронная формула $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^7 4s^2$	Cr Mn Fe Co
5.	Укажите число подуровней, полностью или частично занятых электронами в атоме с порядковым номером 37?	5 10 9 11

§ 4 Сокращенные электронные формулы.

Основными характеристиками атома, определяющими его поведение в химических реакциях являются строение внешнего электронного уровня и энергия электронов относительно положительно заряженного ядра.

По заполнению внешнего энергетического уровня все элементы периодической системы Д. И. Менделеева можно разделить на 4 семейства.

1. s-Элементы заполняют одним или двумя электронами s-орбиталь внешнего энергетического уровня. Например:
 ${}_{11}\text{Na} \quad 1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$

Если опустить из формулы все законченные уровни, оставив лишь внешний уровень, то получим сокращенную формулу для натрия $3s^1$

Для s-элементов существует общая формула для определения сокращенной формулы:

$$n s^{1-2}, \text{ где}$$

n — номер внешнего энергетического уровня, соответствующий номеру периода, в котором находится данный элемент.

1-2 — количество электронов на s-орбиталях, определяемое по номеру группы.

Например:

Полная электронная формула Ba
 $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10} 5s^2 5p^6 6s^2$
Сокращенная электронная формула Ba :
 $6s^2$

так как барий располагается в VI периоде, следовательно $n=6$, количество электронов на s-орбиталях — 2, так как барий располагается во второй группе.

2. p-Элементы заполняют p-орбиталь внешнего энергетического уровня.
сокращенная формула для p-элементов:

$$n s^2 n p^{1-6}, \text{ где}$$

n — номер внешнего энергетического уровня, соответствующий номеру периода, в котором находится данный элемент.

1-6 — количество электронов на p-орбиталях, определяемое по номеру группы.

Например:

Полная электронная формула для Al :
 $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^1$
Сокращенная электронная формула для Al :
 $3s^2 3p^1$

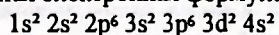
3. d-Элементы заполняют d-орбиталь предвнешнего энергетического уровня.
общая формула для d-элементов:

$$(n-1)d^{1-10} n s^{1-2}, \text{ где}$$

n – номер внешнего энергетического уровня, соответствующий номеру периода, в котором находится данный элемент.

Например:

Полная электронная формула ${}_{22}\text{Ti}$

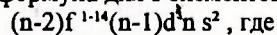


Сокращенная электронная формула



4. **f-Элементы** заполняют f-орбиталь (второй снаружи энергетический уровень)

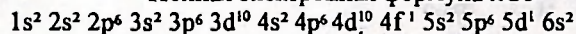
Общая формула для f-элементов:



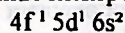
n – номер внешнего энергетического уровня.

Например:

Полная электронная формула ${}_{58}\text{Ce}$



Сокращенная электронная формула ${}_{58}\text{Ce}$



Задание:

1. Определите расположение s, p, d, f – элементов в периодической системе Д. И. Менделеева.
2. Напишите сокращенные электронно-структурные формулы для: ${}_{40}\text{Zr}$, ${}_{42}\text{Mo}$, ${}_{52}\text{Te}$, ${}_{51}\text{I}$, ${}_{82}\text{Pb}$, ${}_{88}\text{Ra}$, ${}_{90}\text{Th}$.
Схематически изобразите орбитали внешнего энергетического уровня.

§ 5 Возможные валентные состояния элементов.

Электронные формулы элементов позволяют определить их валентность.

Валентность элементов – способность атома к образованию химических связей. Согласно методу ВС (валентных связей) валентность элементов определяется числом содержащихся в атоме неспаренных электронов. Для s и p – элементов – это электроны внешнего уровня, для d-элементов – внешнего и предвнешнего уровней

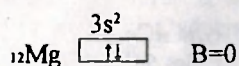
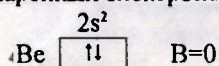
Например:

Сокращенная электронная формула ^{19}K

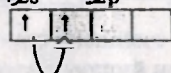
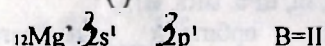
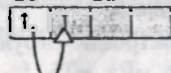
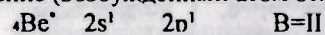


Это значит, что у атома калия на внешнем энергетическом уровне один неспаренный электрон, следовательно, валентность (V) калия равна I ($V=I$).

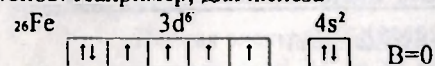
Валентность элементов главной подгруппы II группы в основном состоянии равна нулю, так как на внешнем уровне нет неспаренных электронов:



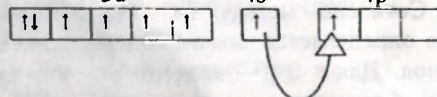
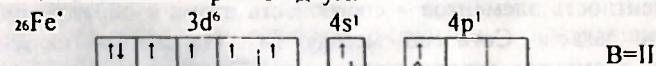
Однако, при получении энергии p-электроны разъединяются в свободные ячейки p-орбитали этого же уровня и валентность становится равной двум, при этом атом переходит в возбужденное состояние (возбужденный атом отмечен звездочкой)



Для большинства d-элементов валентность в невозбужденном состоянии равна нулю, так как на внешнем уровне нет неспаренных электронов. Например, для железа

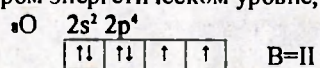


При возбуждении атома железа s-электроны разъединяются и переходят на свободный p-подуровень четвертого уровня, валентность становится равной двум:



Валентными могут быть неспаренные d-электроны предвнешнего уровня, и валентность атома железа с учетом d-электронов может быть равна III, IV, V, VI.

Кислород во всех соединениях проявляет постоянную валентность (V=II), так как валентные электроны у него находятся на втором энергетическом уровне, где нет свободных ячеек:



Задание.

Напишите сокращенные электронные формулы «Ti, «V, «Tc, «Ru, «In, «Sn, «Sb, «Te, «I, «Tl, «Pb, «Bi и определите их валентные возможности.