

Лекция 2

**Строение атомов.
Периодическая
система**

1. Квантовая модель строения атома

Атом – мельчайшая частица химического элемента, носитель всех его химических свойств.

Атомы могут существовать как **в свободном состоянии**, так и **в соединении с атомами того же элемента или других элементов**.

Соединяясь друг с другом, атомы образуют молекулы простых и сложных веществ.

Для характеристики массы атомов элементов выбрана их атомная масса (атомный вес).

Гипотеза Л. Де-Бройля

Любая движущаяся частица может быть охарактеризована длиной волны (λ) и частотой, связанной с ее движением. Т.е. частица обладает волновыми свойствами.

Длина волны определяется в соответствии с соотношением Де Бройля:

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

λ – длина волны в см (м);

$h = 6,626 \cdot 10^{-34}$ Дж · с постоянная Планка

m – масса частицы в г (кг);

v – скорость частицы в см/с (м/с).

Гипотеза Де Бройля получила экспериментальное подтверждение для малых частиц (электронов, нейтронов), когда удалось обнаружить дифракцию электронов (нейтронов) на периодической решетки кристаллов и на газовых молекулах.

Уравнение Шредингера. Волновая функция

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} + \frac{8\pi^2 m}{h} \cdot (E - V) \cdot \psi = 0$$

$h = 6,626 \cdot 10^{-34}$ Дж·с постоянная Планка

m – масса частицы в г (кг);

E – полная энергия электрона, Дж;

V – потенциальная энергия электрона, Дж;

ψ – волновая функция, характеризующая амплитуду трехмерной волны, связанной с электроном.

Решение уравнения Шредингера методом разделения переменных приводит к необходимости ввести постоянные величины, называемые **квантовыми числами m, n, l** .

Каждое из этих квантовых чисел может принимать множество различных значений, но любой конкретной комбинации чисел m, n, l соответствует определенное решение, называемое **волновой функцией (ψ)**.

Атомные орбитали

Из уравнения Шредингера следует, что **состояние электрона в атоме полностью определяют четыре квантовых числа:**

n – **главное квантовое число** (определяет возможные энергетические состояния электрона в атоме);

ℓ - **орбитальное квантовое число (побочное квантовое число)** (характеризует форму электронного облака);

m – **магнитное квантовое число** (характеризует ориентацию электронного облака в пространстве);

s – **спиновое квантовое число** (дополнительная квантовая величина).

Главное квантовое число

Энергия электрона в атоме может принимать только определенные значения (иными словами, она квантована).

Возможные энергетические состояния электрона в атоме определяет главное квантовое число (n). Оно может принимать целые значения от 1 до бесконечности.

Для электронов, находящихся в невозбужденном состоянии главное квантовое число может принимать значения от 1 до 7 (соответственно номеру периода периодической системы Д.И. Менделеева, в котором находится элемент).

Наименьшей энергией обладает электрон с $n = 1$. С увеличением значения главного квантового числа n энергия электрона возрастает.

Электроны с одинаковым значением главного квантового числа имеют электронные облака примерно одного размера и близкие по значению энергии. Поэтому можно сказать, что электроны в атоме образуют электронные слои или электронные оболочки, которым соответствует определенное значение n . Эти уровни обозначаются или цифрами в соответствии со значением главного квантового числа, или буквами латинского алфавита:

n	1	2	3	4	5	6	7
Буквенное обозначение уровня	K	L	M	N	O	P	Q

Если, например, $n = 4$, то электрон находится на четвертом энергетическом уровне, или на N уровне.

Орбитальное квантовое число

Орбитальное квантовое число (его еще называют также побочным) характеризует форму электронного облака.

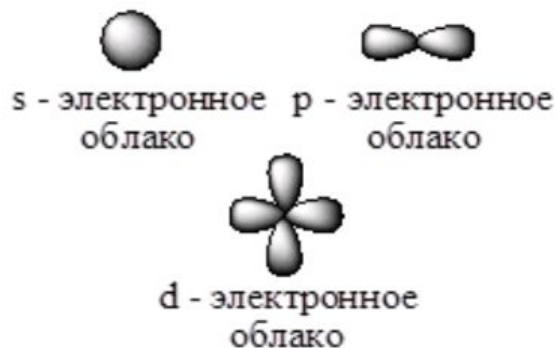
Орбитальное квантовое число может принимать целочисленные значения от 0 до $(n - 1)$, которым соответствуют следующие буквенные обозначения:

l	0	1	2	3
подуровень	s	p	d	f

Электроны различных подуровней называют, соответственно, s, p, d, f – электронами. Различным значениям главного квантового числа отвечает разное количество значений (орбитального квантового числа)

n	l	Обозначение подуровня
1	0	1s
2	0, 1	2s, 2p
3	0, 1, 2	3s, 3p, 3d
4	0, 1, 2, 3	4s, 4p, 4d, 4f

Орбиталь s (s – орбиталь) – подуровня имеет форму шара, p- орбиталь – форму гантели, а d и f – орбитали имеют более сложную форму



В атоме водорода энергия зависит только от главного квантового числа n . В многоэлектронных атомах электроны взаимодействуют как с ядром, так и между собой. Поэтому их энергия определяется не только главным квантовым числом, но и формой электронного облака, т.е. зависит от значения орбитального квантового числа. Поэтому состояния электрона, характеризующиеся различными значениями l , принято называть энергетическими подуровнями. Например, s-подуровень, p – подуровень, d – подуровень и т.д.

Магнитное квантовое число

Положение (ориентация) электронного облака в пространстве определяется **значением магнитного квантового числа (m)**.

Оно зависит от орбитального квантового числа и может принимать целые значения от $-l$ до $+l$. Таким образом, число орбиталей с данным значением равно $(2l + 1)$.

Эти орбитали различаются только значением магнитного квантового числа (m)

Энергетический подуровень	m	Число орбиталей в подуровне
$s (l = 0)$	0	1
$p (l = 1)$	-1, 0, 1	3
$d (l = 2)$	-2, -1, 0, 1, 2	5
$f (l = 3)$	-3, -2, -1, 0, 1, 2, 3	7

Спиновое квантовое число

Некоторые детали спектров многоэлектронных атомов невозможно объяснить при помощи трех квантовых чисел.

Изучение тонкой структуры спектров потребовало ввести дополнительное спиновое квантовое число (S), или просто спин. Оно может принимать только два значения: $+1/2$ или $-1/2$.

Спин – это сугубо квантовая величина.

Иногда для наглядности электрон уподобляют вращающемуся вокруг своей оси заряженному шарик (у $S = +1/2$ – вращение в одну сторону, $S = -1/2$ – в противоположную сторону).

Но это очень грубая аналогия, т.к. электрон даже отдаленно не напоминает шарик.

Принципы заполнения атомных орбиталей



Энергетическая ячейка

$S = -1/2$ → ↓

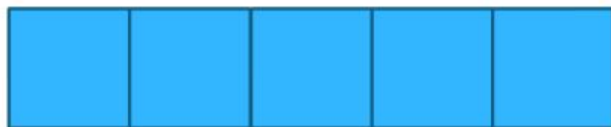
$S = +1/2$ → ↑



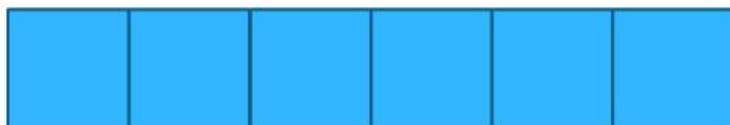
s - подуровень



p - подуровень



d - подуровень



f - подуровень

Принципы заполнения атомных орбиталей

Принцип Паули

В атоме не может быть электронов с одинаковыми наборами всех четырех квантовых чисел.

на одной орбитали не может находиться более двух электронов, причем они обязательно должны иметь разные спины.

Правило Хунда

На каждом подуровне сумма спинов электронов должна быть максимальной по абсолютному значению (модулю).





при построении электронной структуры на каждом подуровне сначала заполняют все ячейки стрелками, указывающими в одном направлении, а затем противоположными стрелками

Принцип наименьшей энергии

Электрон всегда занимает орбиталь с наименьшей энергией

Последовательность заполнения атомных электронных орбиталей в зависимости от значений главного и орбитального квантовых чисел, была исследована В.М. Клечковским, который установил, что энергия электрона возрастает по мере увеличения суммы этих двух квантовых чисел ($n+l$).

Существует 2 правила Клечковского. Позднее рассмотрим их подробнее.


А		$S = 1/2$
В		$S = 1/2 + 1/2 = 1$
С		$S = 1/2 + 1/2 + 1/2 = 3/2$
Д		$S = 0$


в случае В и С первое распределение предпочтительнее, т.к. сумма спинов в первом случае больше, чем во втором. Также известно, что распределения

 $S = 3/2$ и  $S = -3/2$

эквивалентны

 Спаренный электрон

 неспаренный электрон
 $S = +1/2$

 $S = -1/2$

Правила Клечковского

Первое правило

при увеличении заряда ядра атома последовательное заполнение электронных орбиталей происходит от орбиталей с меньшим значением суммы главного и орбитального квантовых чисел ($n + l$) к орбиталям с большим значением этой суммы.

Например, запас энергии на подуровне 4s ($n + l = 4 + 0 = 4$) меньше, чем на 3d ($n + l = 3 + 2 = 5$).

Второе правило

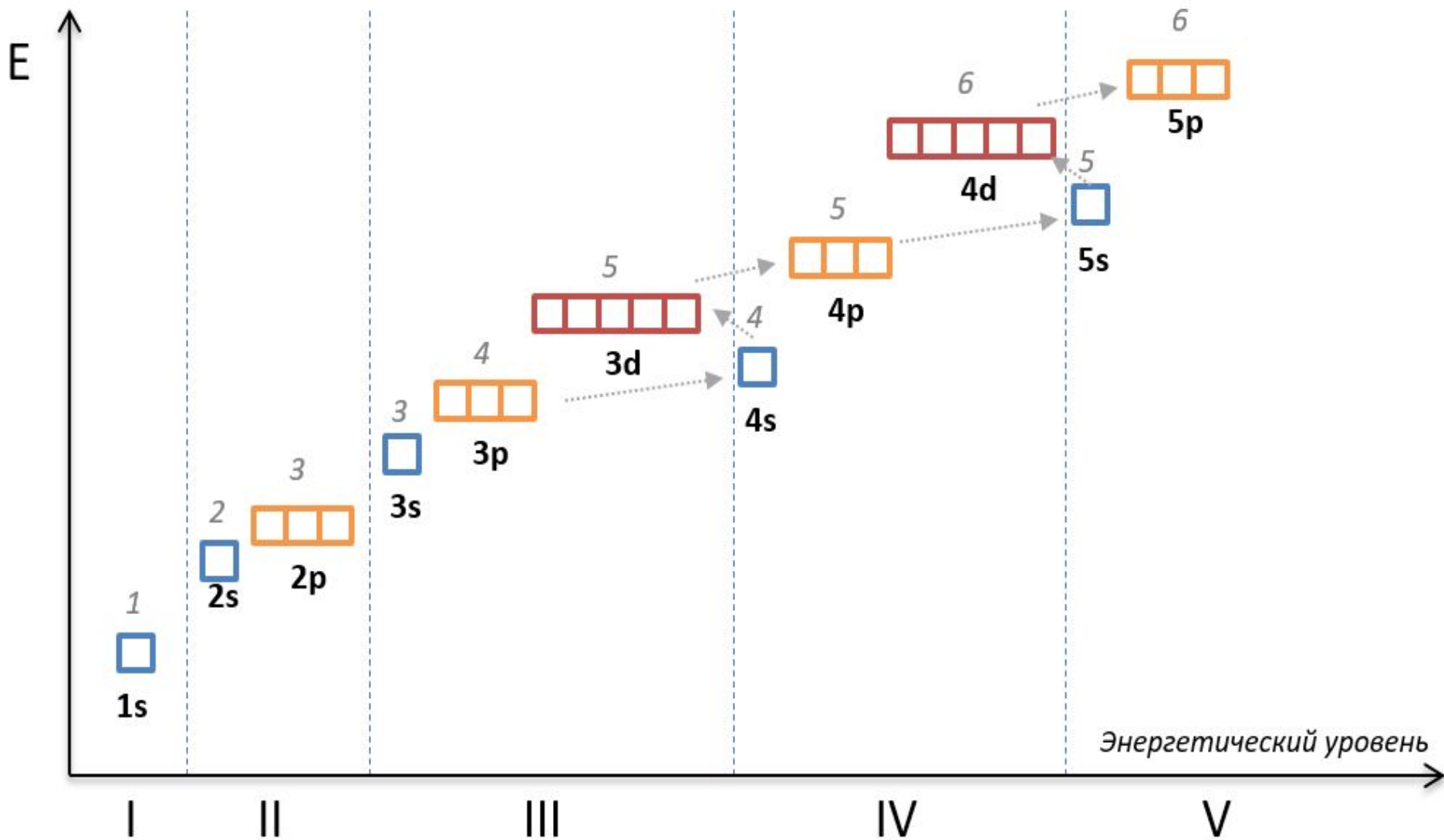
при одинаковых значениях суммы главного и орбитального квантовых чисел ($n + l$) заполнение орбиталей происходит последовательно в направлении возрастания значения главного квантового числа.

Например, на подуровнях 3d, 4p, 5s суммы значений ($n + l$) равны пяти. В этом случае сначала заполняются подуровни с меньшими значениями главного квантового числа n , т.е. в следующей последовательности: 3d → 4p → 5s.

Заполнение энергетических уровней и подуровней идет в следующей последовательности:

1s → 2s → 2p → 3s → 3p → 4s → 3d → 4p → 5s → 4d → 5p →
→ 6s → (5d¹) → 4f → 5d → 6p → 7s → (6d¹⁻²) → 5f → 6d → 7f

Последовательность заполнения орбиталей электронами



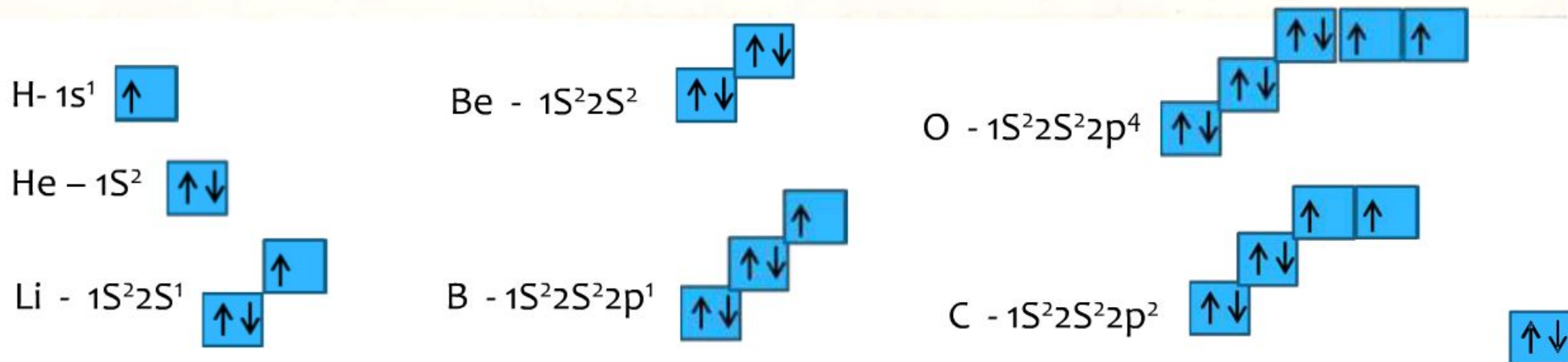
Электронные формулы атомов

При построении электронной структуры атомов удобно пользоваться **Периодической системой Д.И. Менделеева**.

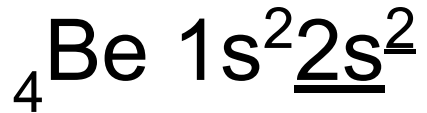
При этом необходимо знать следующее:

- 1) атомный номер элемента равен общему числу электронов в атоме;
- 2) номер периода равен числу энергетических уровней в атоме;
- 3) номер группы равен числу электронов на внешнем (валентном) энергетическом уровне для атомов элементов главных подгрупп.

		I ПЕРИОДИЧЕСКАЯ СИСТЕМА ЭЛЕМЕНТОВ Д.И. МЕНДЕЛЕЕВА						VII	VIII				
		II	III	IV	V	VI	(H)	II					
1	1	H ¹ 1,01 ВОДОРОД						4,00 He ГЕЛИЙ					
2	2	Li ³ 6,94 ЛИТИЙ	Be ⁴ 9,01 БЕРИЛЛИЙ	10,81 B ⁵ БОР	12,01 C ⁶ УГЛЕРОД	14,01 N ⁷ АЗОТ	16,00 O ⁸ КИСЛОРОД	19,00 F ⁹ ФТОР	20,18 Ne ¹⁰ НЕОН				
3	3	Na ¹¹ 22,99 НАТРИЙ	Mg ¹² 24,31 МАГНИЙ	26,98 Al ¹³ АЛЮМИНИЙ	28,09 Si ¹⁴ КРЕМНИЙ	30,97 P ¹⁵ ФОСФОР	32,06 S ¹⁶ СЕРА	35,45 Cl ¹⁷ ХЛОР	39,95 Ar ¹⁸ АРГОН				
4	4	K ¹⁹ 39,10 КАЛИЙ	Ca ²⁰ 40,08 КАЛЬЦИЙ	Sc ²¹ 44,96 СКАНДИЙ	Ti ²² 47,88 ТИТАН	V ²³ 50,94 ВАНАДИЙ	Cr ²⁴ 52,00 ХРОМ	Mn ²⁵ 54,94 МАРГАНЕЦ	Fe ²⁶ 55,85 ЖЕЛЕЗО	Co ²⁷ 58,93 КОБАЛЬТ	Ni ²⁸ 58,70 НИКЕЛЬ		
4	5	63,55 Cu ²⁹ МЕДЬ	65,38 Zn ³⁰ ЦИНК	69,72 Ga ³¹ ГАЛЛИЙ	72,59 Ge ³² ГЕРМАНИЙ	74,92 As ³³ МЫШЬЯК	78,96 Se ³⁴ СЕЛЕН	79,90 Br ³⁵ БРОМ	83,80 Kr ³⁶ КРИПТОН				
5	6	Rb ³⁷ 85,47 РУБИДИЙ	Sr ³⁸ 87,62 СТРОНЦИЙ	Y ³⁹ 88,91 ИТРИЙ	Zr ⁴⁰ 91,22 ЦИРКОНИЙ	Nb ⁴¹ 92,91 НИОБИЙ	Mo ⁴² 95,94 МОЛИБДЕН	Tc ⁴³ 98,91 ТЕХНЕЦИЙ	Ru ⁴⁴ 101,07 РУТЕНИЙ	Rh ⁴⁵ 102,91 РОДИЙ	Pd ⁴⁶ 106,42 ПАЛЛАДИЙ		
5	7	107,87 Ag ⁴⁷ СЕРЕБРО	112,41 Cd ⁴⁸ КАДМИЙ	114,82 In ⁴⁹ ИНДИЙ	118,69 Sn ⁵⁰ ОЛОВО	121,75 Sb ⁵¹ СУРЬМА	127,60 Te ⁵² ТЕЛЛУР	126,90 I ⁵³ ИОД	131,30 Xe ⁵⁴ КСЕНОН				
6	8	Cs ⁵⁵ 132,91 ЦЕЗИЙ	Ba ⁵⁶ 137,33 БАРИЙ	La ⁵⁷ 138,91 ЛАНТАН	Hf ⁷² 178,49 ГАФНИЙ	Ta ⁷³ 180,95 ТАНТАЛ	W ⁷⁴ 183,85 ВОЛЬФРАМ	Re ⁷⁵ 186,21 РЕНИЙ	Os ⁷⁶ 190,20 ОСМИЙ	Ir ⁷⁷ 192,22 ИРИДИЙ	Pt ⁷⁸ 195,09 ПЛАТИНА		
6	9	196,97 Au ⁷⁹ ЗОЛОТО	200,99 Hg ⁸⁰ РТУТЬ	204,37 Tl ⁸¹ ТАЛЛИЙ	207,20 Pb ⁸² СВИНЕЦ	208,98 Bi ⁸³ ВИСМУТ	[209] Po ⁸⁴ ПОЛОНИЙ	[210] At ⁸⁵ АСТАТ	[222] Rn ⁸⁶ РАДОН				
7	10	Fr ⁸⁷ [223] ФРАНЦИЙ	Ra ⁸⁸ [226,03] РАДИЙ	Ac ⁸⁹ [227] АКТИНИЙ	Ku ¹⁰⁴ [261] КУРЧАТОВИЙ	Ns ¹⁰⁵ [261] НИЛЬСБОРИЙ	Sg ¹⁰⁶ [263] СИБОРГИЙ	Bh ¹⁰⁷ [262] БОРИЙ	Hs ¹⁰⁸ [265] ХАССИЙ	Hs ¹⁰⁹ [266] МЕЙТНЕРИЙ			
* ЛАНТАНОИДЫ													
58	59	60	61	62	63	64	65	66	67	68	69	70	71
Ce 140,12 ЦЕРИЙ	Pr 140,91 ПРАЗЕОДИМ	Nd 144,24 НЕОДИМ	Pm [145] ПРОМЕТИЙ	Sm 150,40 САМАРИЙ	Eu 151,96 ЕВРОПИЙ	Gd 157,25 ГАДОЛИНИЙ	Tb 158,93 ТЕРБИЙ	Dy 162,50 ДИСПРОЗИЙ	Ho 164,93 ГОЛЬМИЙ	Er 167,26 ЭРБИЙ	Tm 168,93 ТУЛИЙ	Yb 173,04 ИТТЕРБИЙ	Lu 174,97 ЛЮТЕЦИЙ
** АКТИНОИДЫ													
90	91	92	93	94	95	96	97	98	99	100	101	102	103
Th 232,04 ТОРИЙ	Pa 231,04 ПРОТАКТИНИЙ	U 238,03 УРАН	Np 237,05 НЕПУНИЙ	Pu [244] ПЛУТОНИЙ	Am [243] АМЕРИЦИЙ	Cm [247] КОРИЙ	Bk [247] БЕРКЛИЙ	Cf [251] КАЛИФОРНИЙ	Es [254] ЭЙНШТЕЙНИЙ	Fm [257] ФЕРМИЙ	Md [258] МЕНДЕЛЕВИЙ	(No) [255] НОБЕЛИЙ	(Lr) [256] ЛОУРЕНСИЙ

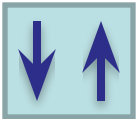


Бериллий



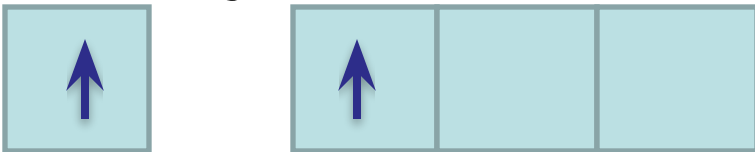
s-семейство

Валентные электроны $2s^2$

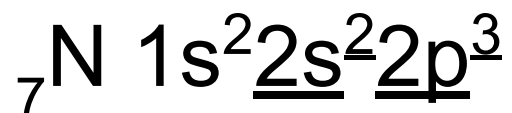


$$k = 0$$

Возбуждённое состояние

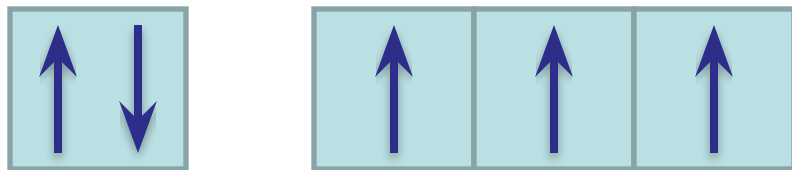


Азот



p-семейство

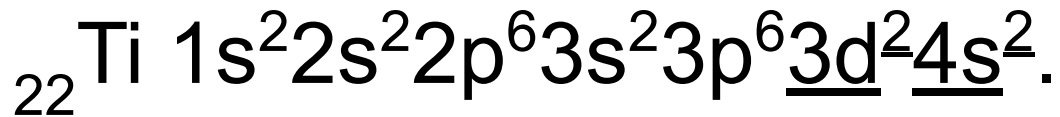
Валентные электроны $2s^2 2p^3$



$$k = 3$$

Возбуждённого состояния нет

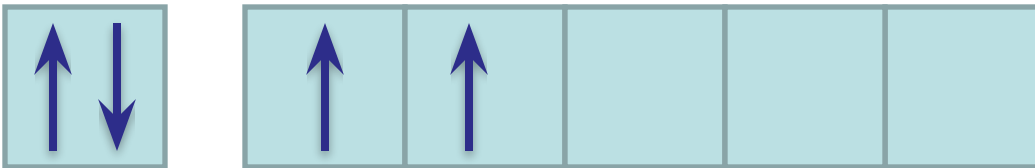
Титан



d-семейство

Валентные электроны $3d^2 4s^2$

нормальное состояние



возбужденное состояние



$K = 4$

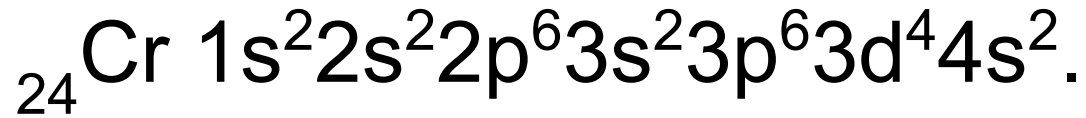
«Проскок» электрона

Переход электронов с s-подуровня внешнего энергетического уровня ns на d-подуровень предвнешнего уровня $(n - 1)d$.

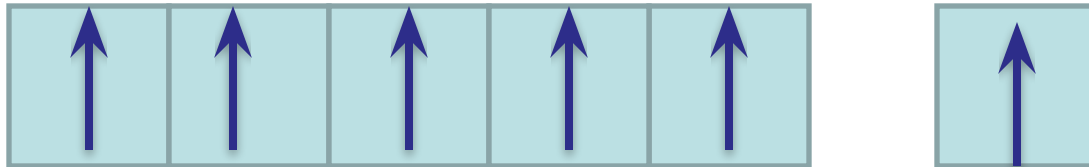
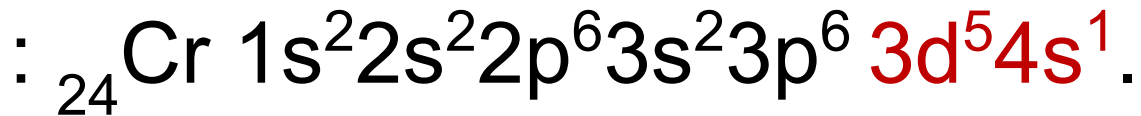
«Проскок» электрона происходит в атомах некоторых d-элементов, например, ${}_{24}\text{Cr}$, ${}_{29}\text{Cu}$, ${}_{42}\text{Mo}$, ${}_{47}\text{Ag}$, ${}_{79}\text{Au}$, ${}_{41}\text{Nb}$, ${}_{44}\text{Ru}$, ${}_{45}\text{Rh}$, ${}_{46}\text{Pd}$.

Хром

Электронная формула хрома должна быть такой:



На самом деле:



2. Периодический закон и ПСЭ Д.И. Менделеева

Современная формулировка периодического закона:

«Свойства химических элементов (т.е. свойства и форма образуемых ими соединений) находятся в периодической зависимости от заряда ядра атомов химических элементов».

Периодические изменения свойств химических элементов обусловлены правильным повторением электронной конфигурации внешнего энергетического уровня (валентных электронов) их атомов с увеличением заряда ядра.

Графическим изображением периодического закона является **периодическая система элементов**.

		ПЕРИОДИЧЕСКАЯ СИСТЕМА ЭЛЕМЕНТОВ Д.И. МЕНДЕЛЕЕВА										VII (H)		VIII				
		II		III		IV		V		VI								
1	1	I 1 H водород											7 9 F ФТОР	2 4 He ГЕЛИЙ				
2	2	3 Li ЛИТИЙ	4 Be БЕРИЛЛИЙ	5 B БОР	6 C УГЛЕРОД	7 N АЗОТ	8 O КИСЛОРОД	9 F ФТОР	10 Ne НЕОН									
3	3	11 Na НАТРИЙ	12 Mg МАГНИЙ	13 Al АЛЮМИНИЙ	14 Si КРЕМНИЙ	15 P ФОСФОР	16 S СЕРА	17 Cl ХЛОР	18 Ar АРГОН									
4	4	19 K КАЛИЙ	20 Ca КАЛЬЦИЙ	21 Sc СКАНДИЙ	22 Ti ТИТАН	23 V ВАНАДИЙ	24 Cr ХРОМ	25 Mn МАРГАНЕЦ	26 Fe ЖЕЛЕЗО	27 Co КОБАЛЬТ	28 Ni НИКЕЛЬ							
4	5	29 Cu МЕДЬ	30 Zn ЦИНК	31 Ga ГАЛЛИЙ	32 Ge ГЕРМАНИЙ	33 As МЫШЬЯК	34 Se СЕЛЕН	35 Br БРОМ	36 Kr КРИПТОН									
5	6	37 Rb РУБИДИЙ	38 Sr СТРОНЦИЙ	39 Y ИТРИЙ	40 Zr ЦИРКОНИЙ	41 Nb НИОБИЙ	42 Mo МОЛИБДЕН	43 Tc ТЕХНЕЦИЙ	44 Ru РУТЕНИЙ	45 Rh РОДИЙ	46 Pd ПАЛЛАДИЙ							
5	7	47 Ag СЕРЕБРО	48 Cd КАДМИЙ	49 In ИНДИЙ	50 Sn ОЛОВО	51 Sb СУРЬМА	52 Te ТЕЛЛУР	53 I ИОД	54 Xe КСЕНОН									
6	8	55 Cs ЦЕЗИЙ	56 Ba БАРИЙ	57 La ЛАНТАН	72 Hf ГАФИЙ	73 Ta ТАНТАЛ	74 W ВОЛЬФРАМ	75 Re РЕНИЙ	76 Os ОСМИЙ	77 Ir ИРИДИЙ	78 Pt ПЛАТИНА							
6	9	79 Au ЗОЛОТО	80 Hg РУТУТЬ	81 Tl ТАЛЛИЙ	82 Pb СВИНЕЦ	83 Bi ВИСМУТ	84 Po ПОЛОНИЙ	85 At АСТАТ	86 Rn РАДОН									
7	10	87 Fr ФРАНЦИЙ	88 Ra РАДИЙ	89 Ac АКТИНИЙ	104 Ku КУРЧАТОВИЙ	105 Ns НИЛЬСБОРИЙ	106 Sg СИБОРГИЙ	107 Bh БОРИЙ	108 Hs ХАСМИЙ	109 Hs МЕЙТНЕРИЙ								
* ЛАНТАНОИДЫ																		
58	59	60	61	62	63	64	65	66	67	68	69	70	71					
Ce ЦЕРИЙ	Pr ПРАЗЕОДИМ	Nd НЕОДИМ	Pm ПРОМЕТИЙ	Sm САМАРИЙ	Eu ЕВРОПИЙ	Gd ГАДОЛИНИЙ	Tb ТЕРБИЙ	Dy ДИСПРОЗИЙ	Ho ГОЛЬМИЙ	Er ЭРБИЙ	Tm ТУЛИЙ	Yb ИТТЕРБИЙ	Lu ЛУТЕЦИЙ					
** АКТИНОИДЫ																		
90	91	92	93	94	95	96	97	98	99	100	101	102	103					
Th ТОРИЙ	Pa ПРОТАКТИНИЙ	U УРАН	Np НЕПУТУНИЙ	Pu ПЛУТОНИЙ	Am АМЕРИЦИЙ	Cm КЮРИЙ	Bk БЕРКЛИЙ	Cf КАЛИФОРНИЙ	Es ЭЙНШТЕЙНИЙ	Fm ФЕРМИЙ	Md МЕНДЕЛЕВИЙ	(No) НОБЕЛИЙ	(Lr) ЛОУРЕНСИЙ					

Периоды представляют собой горизонтальные ряды элементов с одинаковым максимальным значением главного квантового числа валентных электронов.

Номер периода обозначает число энергетических уровней в атоме элемента.

Периоды могут состоять из двух (первый), восьми (второй и третий), восемнадцати (четвертый и пятый) или тридцати двух (шестой) элементов, в зависимости от количества электронов на внешнем энергетическом уровне. Последний, седьмой период не завершен.

Группы представляют собой вертикальные столбцы элементов с одинаковым числом валентных электронов, равным номеру группы. Различают главные и побочные подгруппы.

Главные подгруппы состоят из элементов малых и больших периодов, валентные электроны которых расположены на внешних ns - и np - подуровнях. Побочные подгруппы состоят из элементов только больших периодов. Их валентные электроны находятся на внешнем ns - подуровне и внутреннем $(n - 1)d$ - подуровне (или $(n - 2)f$ - подуровне).

Периодичность свойств химических элементов

Распределение электронов в атомах влияет на их свойства

Это:

- размер атомов
- Степень окисления
- Энергия ионизации
- Сродство к электрону
- Электроотрицательность

С увеличением порядкового номера элемента эти свойства изменяются периодически.

Рассмотрим эти свойства.

Атомный радиус

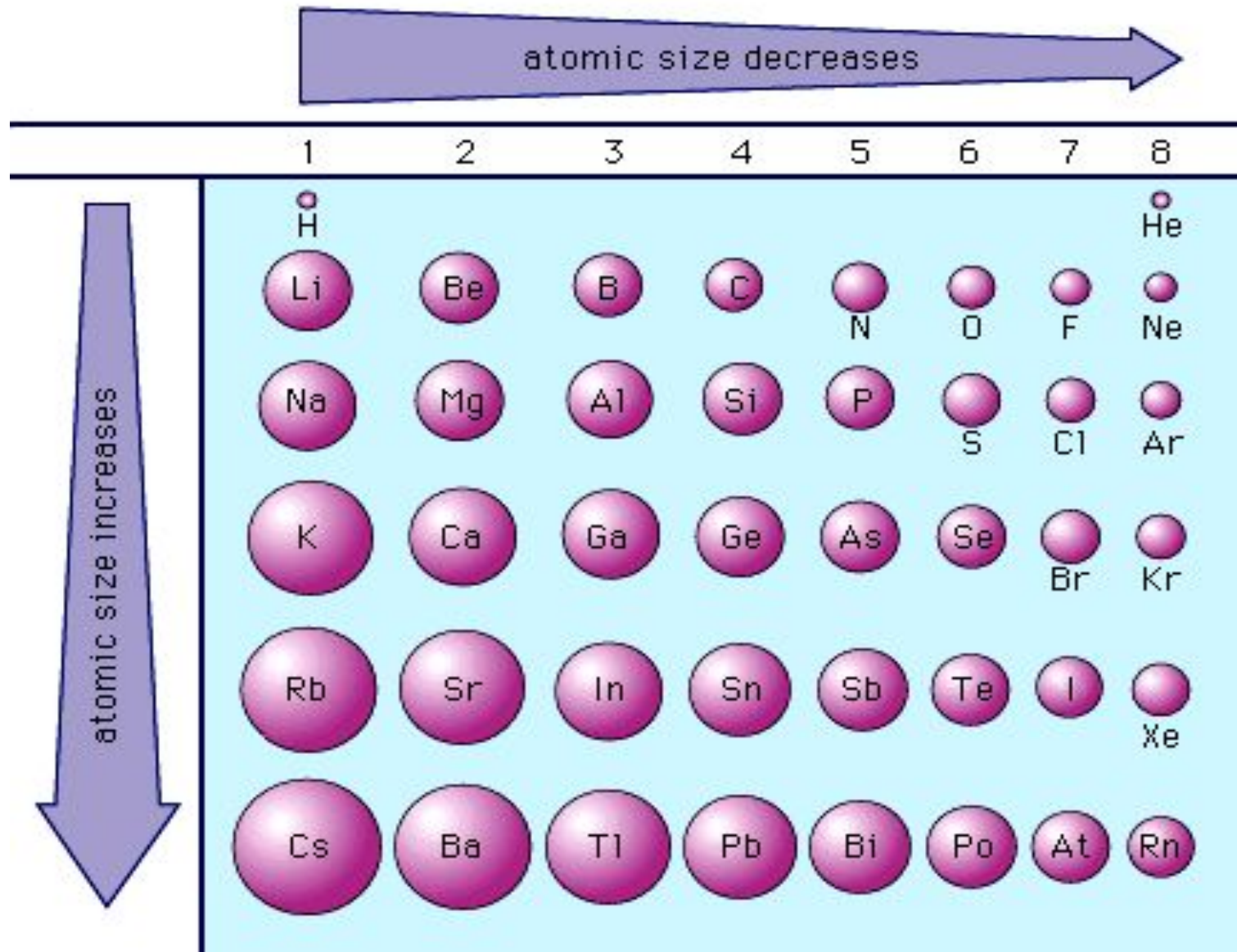
Важнейшее свойство атома.

Атомы не имеют строгих границ. В расчетах используют кажущиеся радиусы.

Чем больше атомный радиус, тем слабее удерживаются внешние электроны ядром.

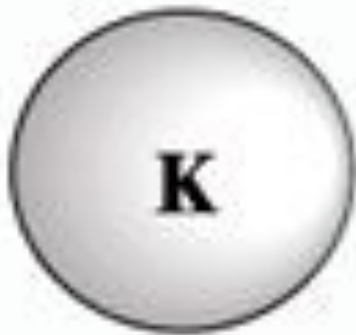
Чем меньше атомный радиус, тем сильнее притягиваются электроны к ядру.

Изменение радиусов атомов



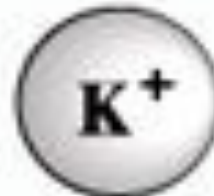
Радиусы атомов и ионов

Нейтральные
атомы



a

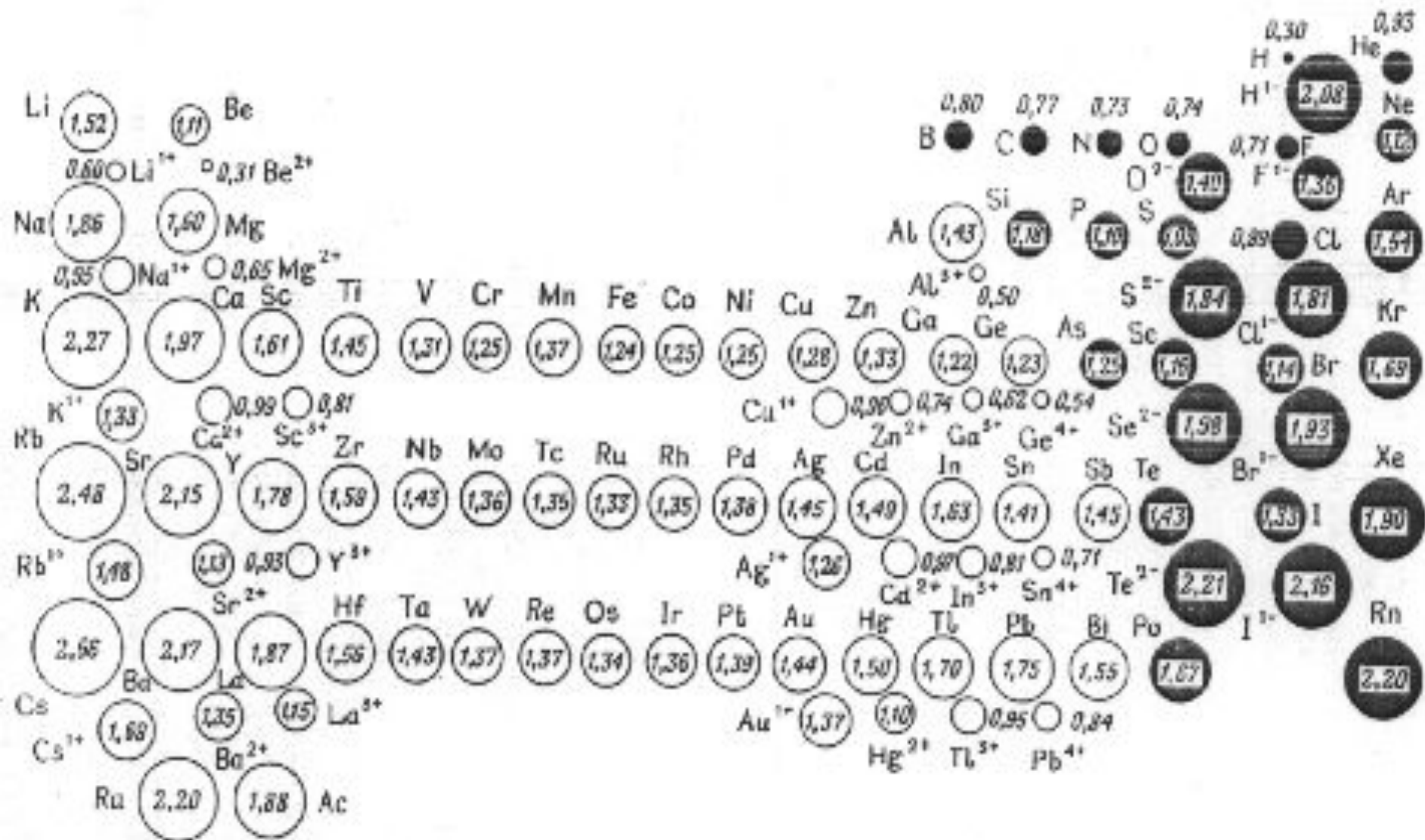
Ионы
Катионы Анионы



б

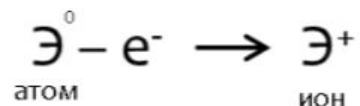
в

Лантаноидное сжатие



Энергия ионизации (I)

Энергия, которую нужно затратить для отрыва электрона от атома, находящегося в нормальном состоянии.

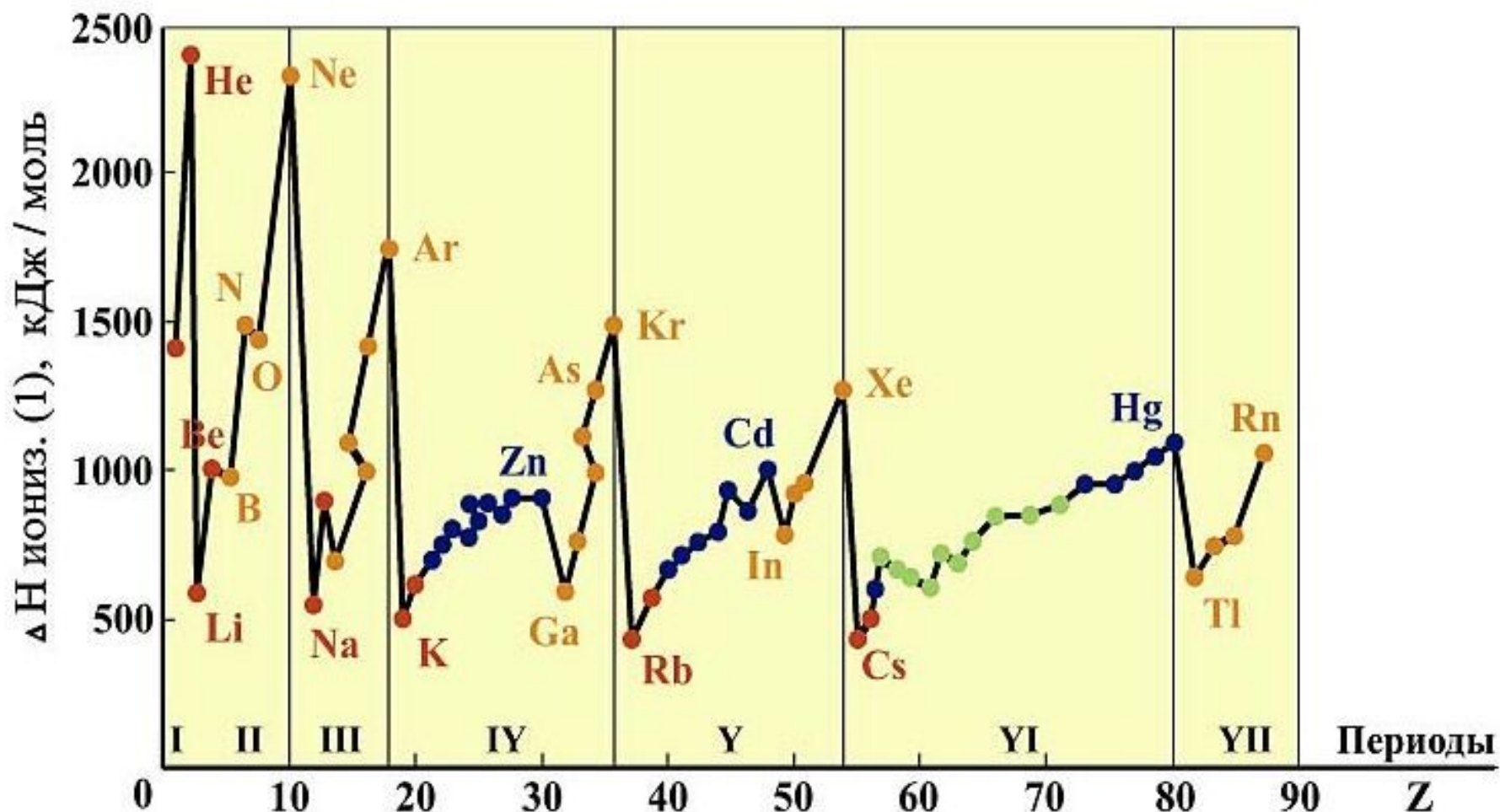


Это количественная мера связи электрона с ядром и важная характеристика реакционной способности атомов.

С увеличением порядкового номера элементов энергия ионизации повышается.

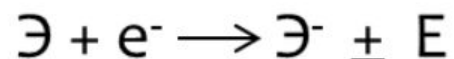


ЗАВИСИМОСТЬ ЭНЕРГИИ ИОНИЗАЦИИ (1) ОТ ЗАРЯДА ЯДРА АТОМА



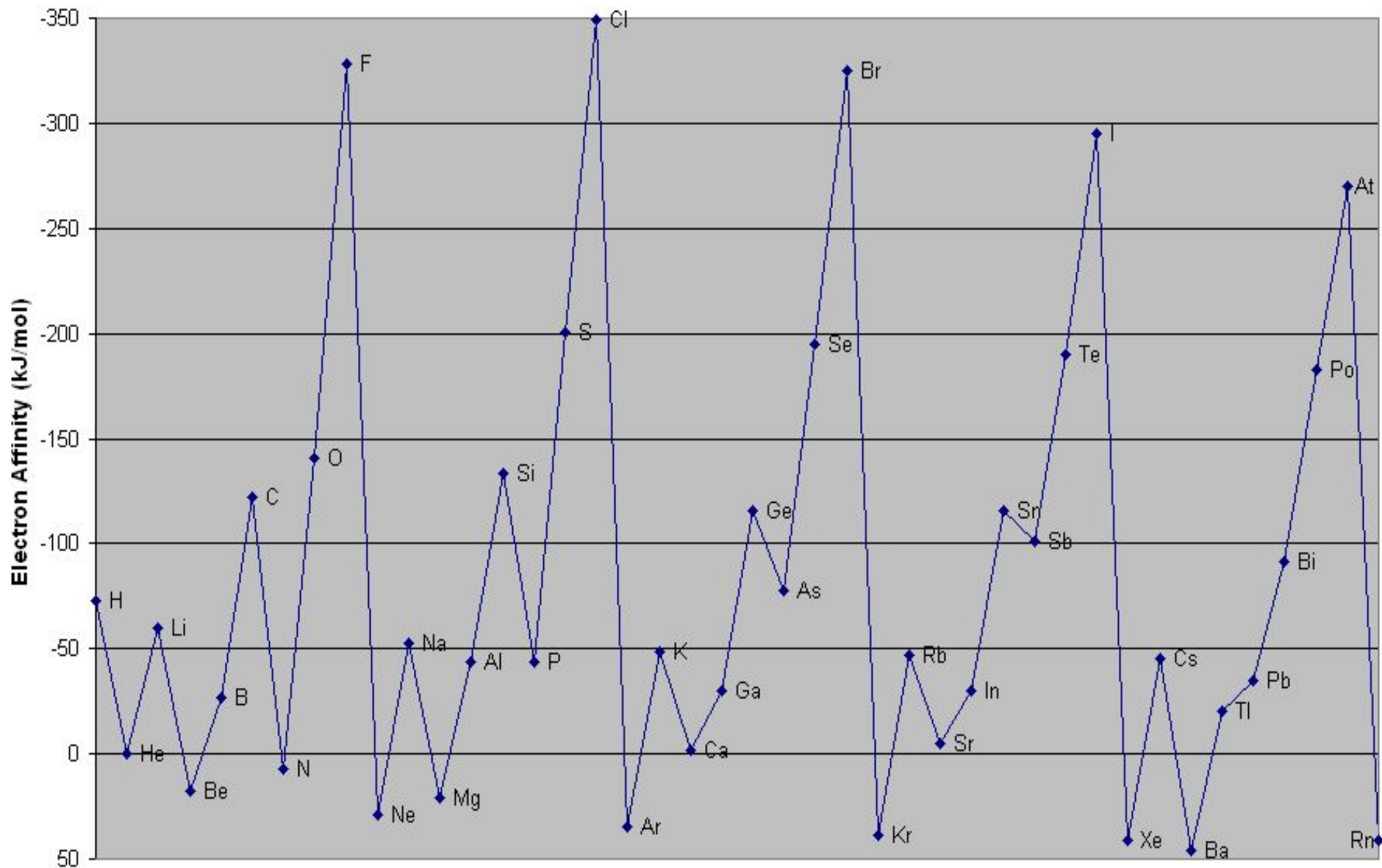
Сродство атома к электрону (E)

Энергия, выделяющаяся при присоединении электрона к нейтральному атому.



Отрицательные значения означают, что присоединение электрона к атому требует затрат энергии.

Periodic Trends in Electron Affinity for the Main Group Elements



Электроотрицательность

Характеризует способность атомов оттягивать от других атомов электроны в случае образования химической связи.

Мерой электроотрицательности является энергия, равная полусумме энергий ионизации и сродства к электрону. Обозначается буквой χ .

Шкала электроотрицательности элементов (Л. Полинг)

	I	II	III	IV	V	VI	VII
1	H 2,1						
2	Li 1,0	Be 1,5	B 2,0	C 2,5	N 3,0	O 3,5	F 4,0
3	Na 0,9	Mg 1,2	Al 1,5	Si 1,8	P 2,1	S 2,5	Cl 3,0
4	K 0,8						Br 2,8
5	Rb 0,8						I 2,5

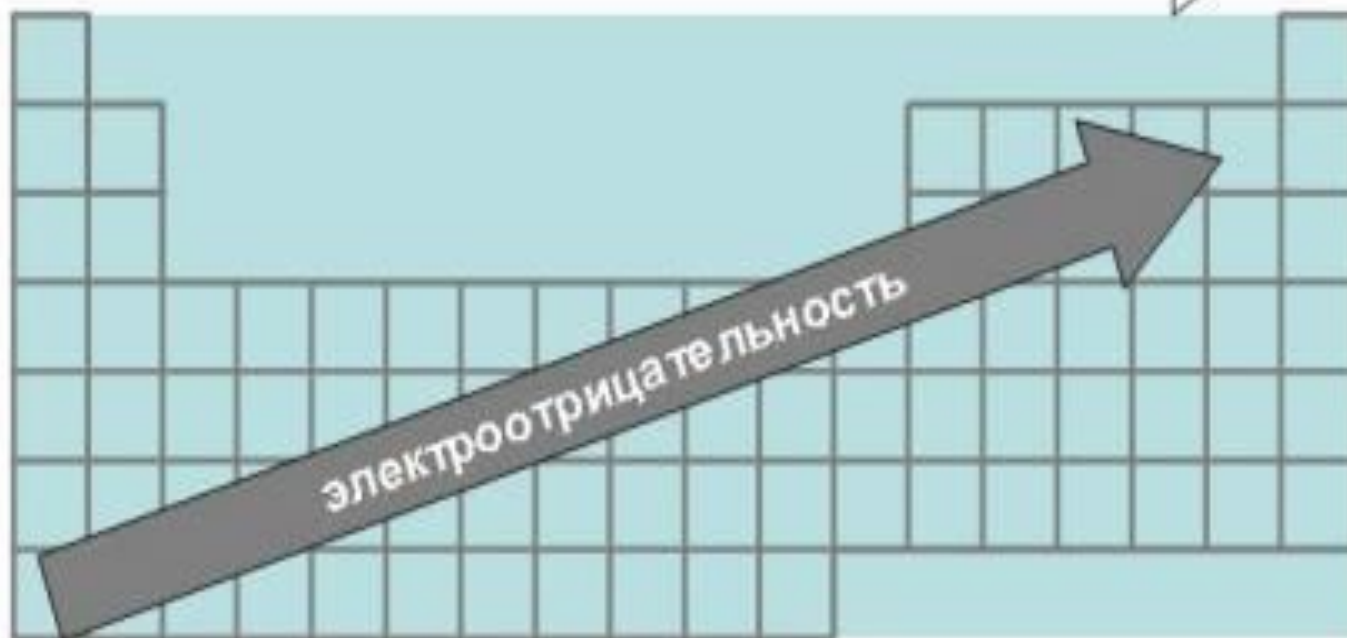
Относительная электроотрицательность подчиняется периодическому закону: в периоде она растет с увеличением номера элемента, в группе - уменьшается.

восстановительные и металлические свойства

окислительные и неметаллические свойства

восстановительные и
металлические свойства

электроотрицательность



Лекция 3

**ХИМИЧЕСКАЯ СВЯЗЬ.
СТРОЕНИЕ МОЛЕКУЛ**

3. Химическая связь. Строение молекул

Химическая связь – это такое взаимодействие атомов, которое связывает их в молекулы, ионы, радикалы, кристаллы.

Типы химических связей

ионная

образуется между атомами металлов и неметаллов, т.е. между атомами резко отличающимися друг от друга по электроотрицательности

ковалентная

связь, возникающая между атомами за счет образования общих электронных пар.

металлическая

связь в металлах и сплавах, которую выполняют относительно свободные электроны между ионами металлов в металлической кристаллической решетке.

водородная

связь между атомами водорода одной молекулы и сильноотрицательными элементами (O, N, F) другой молекулы.

Ковалентная связь

полярная

неполярная

КПС образуют атомы разных неметаллов (с разной электроотрицательностью).

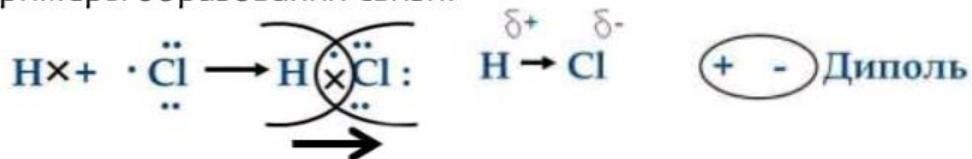
Электроотрицательность (ЭО)- это свойство атомов одного элемента притягивать к себе электроны от атомов других элементов.

Самый электроотрицательный элемент – F.

Механизм образования связи.

Каждый атом неметалла отдает в общее пользование другому атому свои наружные неспаренные электроны. Образуются общие электронные пары. Общая электронная пара смещена к более электроотрицательному элементу.

Примеры образования связи:

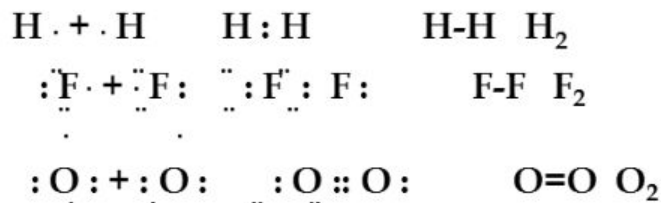


КНС образуют атомы одного и того же химического элемента.

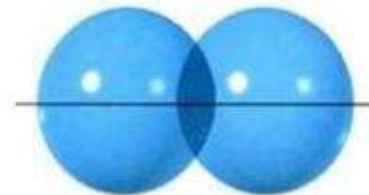
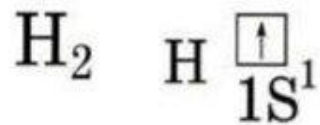
Механизм образования связи.

Каждый атом неметалла отдает в общее пользование другому атому наружные неспаренные электроны. Образуются общие электронные пары. Электронная пара принадлежит в равной мере обоим атомам.

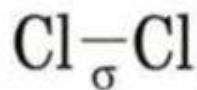
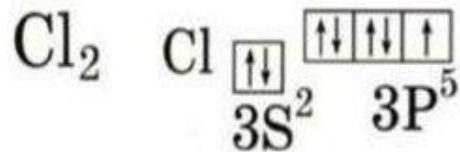
Примеры образования КНС:



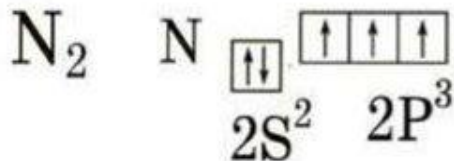
Ковалентная неполярная связь



S—S
σ-связь



P—P
σ-связь



σ+π+π

Образуется между атомами с одинаковой электроотрицательностью

Вещества с КНС имеют:

Атомную
кристаллическую
решетку (C, Si, B)

Молекулярную
кристаллическую
решетку (все
остальные)

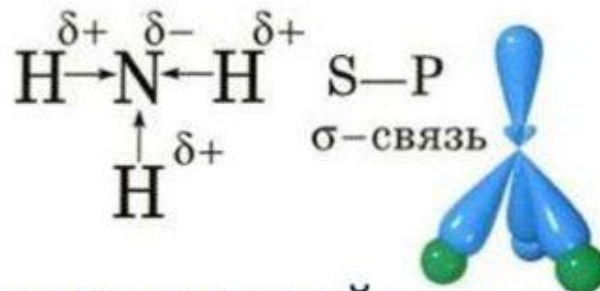
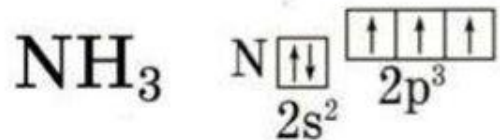
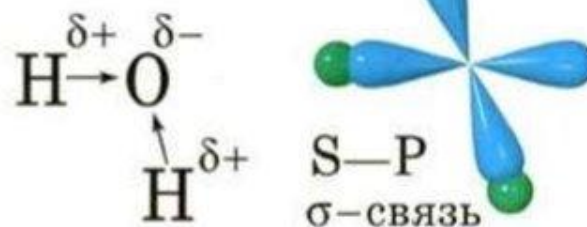
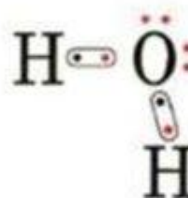
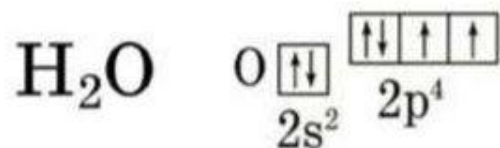
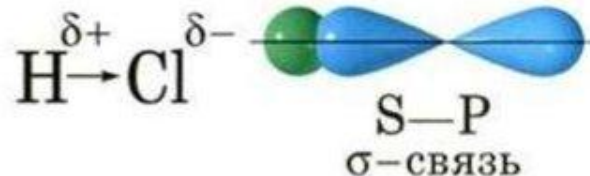
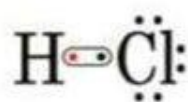
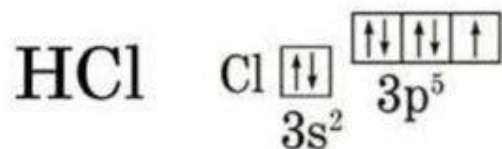
Свойства веществ:

1. Твердые;
2. Имеют высокие температуры плавления.

Свойства веществ:

1. При обычных условиях вещества газообразные (H_2 , O_2), жидкие (Br_2), твердые (I_2);
2. Большинство веществ сильно летучие, т.е. имеют низкие t° кипения и плавления;
3. Растворы и расплавы не проводят электрический ток.

Ковалентная полярная связь



Образуется между атомами с разной электроотрицательностью

Вещества с КПС имеют:

Атомную кристаллическую
Решетку (SiC, SiO₂)

Молекулярную кристаллическую
решетку (все остальные)

Свойства веществ:

1. Твердые;
2. Имеют высокие t° плавления.

Свойства веществ:

1. При обычных условиях вещества газообразные (H₂, O₂), жидкие (Br₂), твердые (I₂);
2. Большинство веществ сильно летучие, т.е. имеют низкие t° кипения и плавления;
3. Растворы и расплавы не проводят электрический ток.

Направленность ковалентной связи

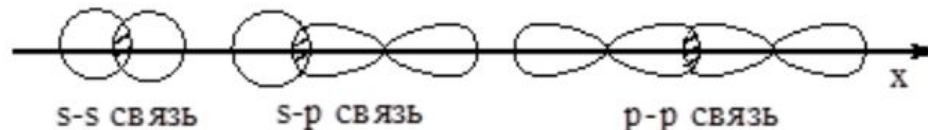
Направленность связей определяется и формой атомных орбиталей, способом их перекрывания и геометрическим расположением.

1. Облака s-электронов имеют шаровую симметрию, т.е. полностью лишены направленности.



s-электронное облако

2. между атомами с валентными s-орбиталями в любом направлении может образоваться одинаково прочная связь

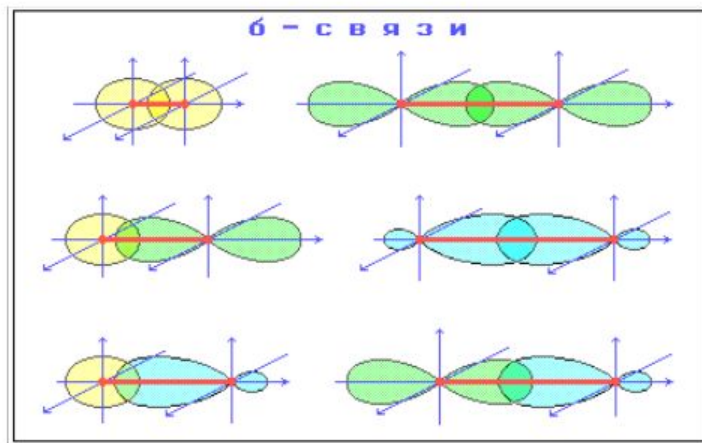


В случае s-p-связи наибольшее перекрывание достигается по оси x, которая является осью симметрии pх-орбитали.

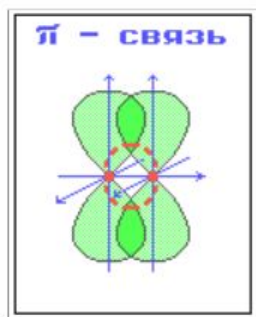
Расчетом установлено, что s-p связь прочнее, чем s-s-связь. И еще более прочная p-p-связь.

Все три одинарные ковалентные связи называют **σ -СВЯЗЯМИ.**

σ -Связь – ковалентная связь, образованная при перекрывании s-, p- и гибридных АО вдоль оси, соединяющей ядра связываемых атомов (т.е. при осевом перекрывании АО).



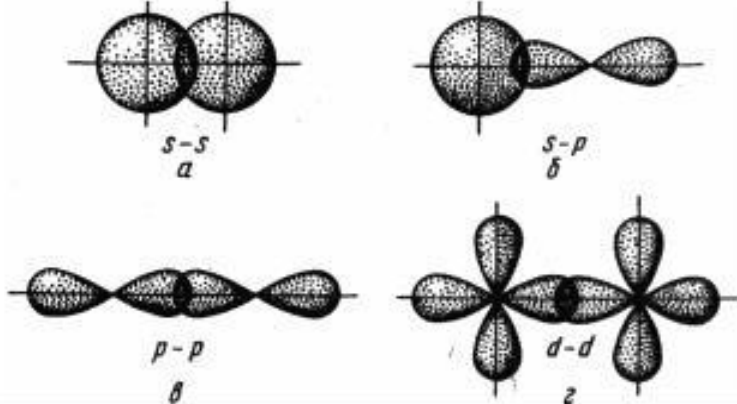
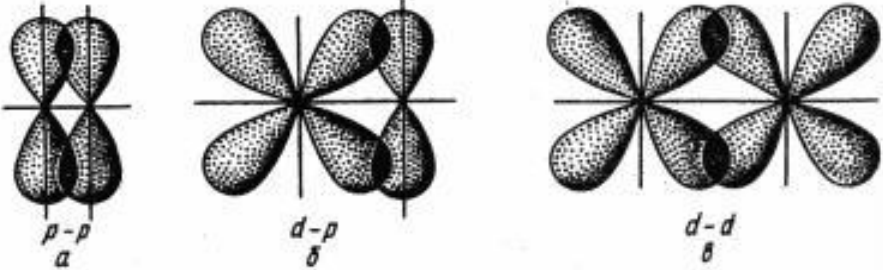
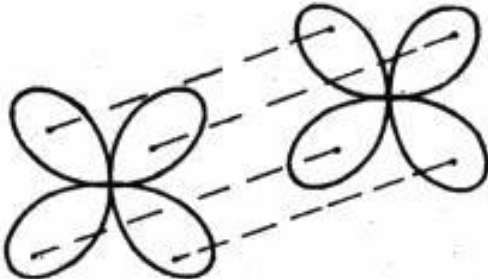
π -Связь – ковалентная связь, возникающая при боковом перекрывании негибридных p-АО. Такое перекрывание происходит вне прямой, соединяющей ядра атомов.

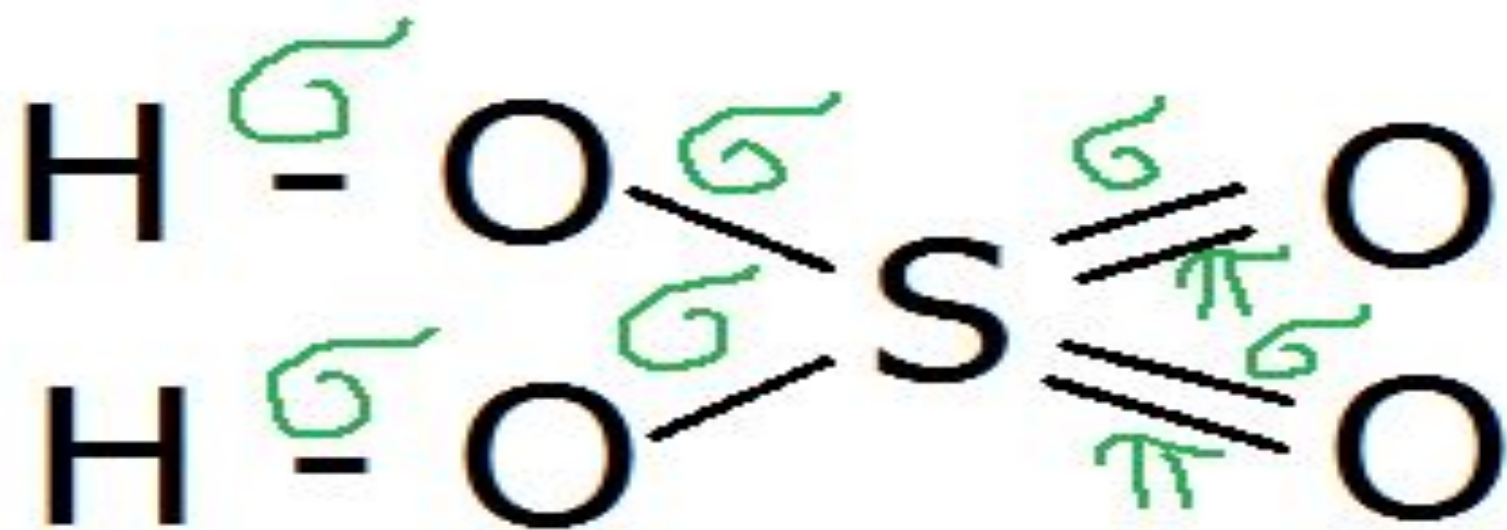


π -Связи возникают между атомами, уже соединенными σ -связью (при этом образуются двойные и тройные ковалентные связи).

π -Связь слабее σ -связи из-за менее полного перекрывания p-АО.

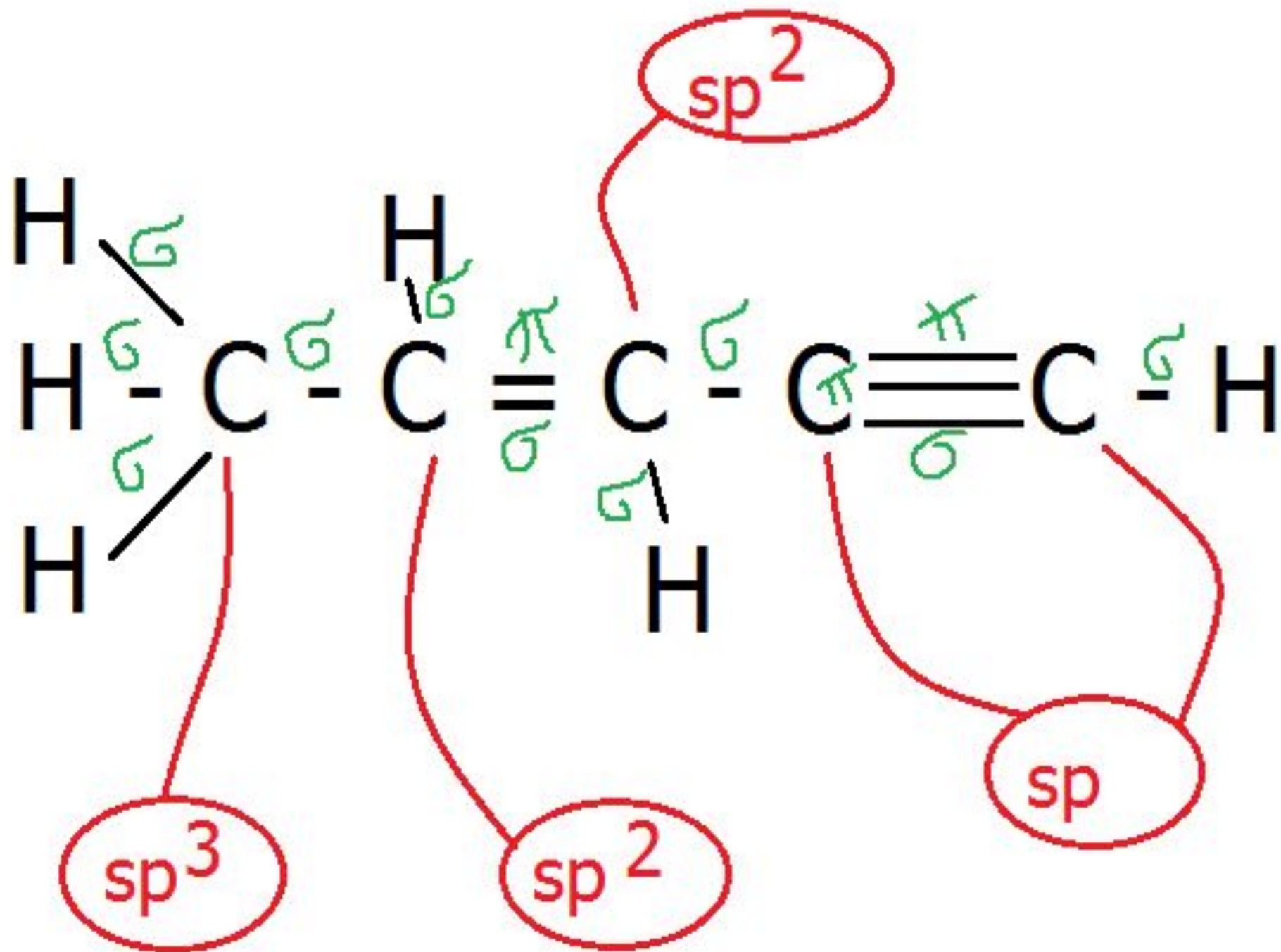
Типы ковалентной связи

<p>σ-связь</p>	<p>По оси, соединяющей ядра атомов.</p> <p>s-s, s-p, p-p, d-d, d-s облака</p>	 <p>The diagrams show four types of sigma bond orbital overlaps: 1) s-s overlap (labeled 'a'), showing two spherical s orbitals overlapping along the x-axis. 2) s-p overlap (labeled 'b'), showing a spherical s orbital overlapping with a dumbbell-shaped p orbital along the x-axis. 3) p-p overlap (labeled 'b'), showing two dumbbell-shaped p orbitals overlapping along the x-axis. 4) d-d overlap (labeled 'z'), showing two complex d orbitals overlapping along the x-axis.</p>
<p>π-связь</p>	<p>Перекрывание по обе стороны от линии, соединяющей ядра атомов.</p> <p>p-p, p-d, d-d – облака</p>	 <p>The diagrams show three types of pi bond orbital overlaps: 1) p-p overlap (labeled 'a'), showing two dumbbell-shaped p orbitals overlapping side-by-side along the x-axis. 2) d-p overlap (labeled 'b'), showing a dumbbell-shaped p orbital overlapping with a complex d orbital side-by-side along the x-axis. 3) d-d overlap (labeled 'b'), showing two complex d orbitals overlapping side-by-side along the x-axis.</p>
<p>δ-связь</p>	<p>Перекрывание всех лепестков d-орбиталей</p>	 <p>The diagram shows the overlap of two d orbitals to form a delta bond. Each d orbital has four lobes. The overlap occurs between the four lobes of both orbitals, resulting in a complex, multi-lobed structure.</p>



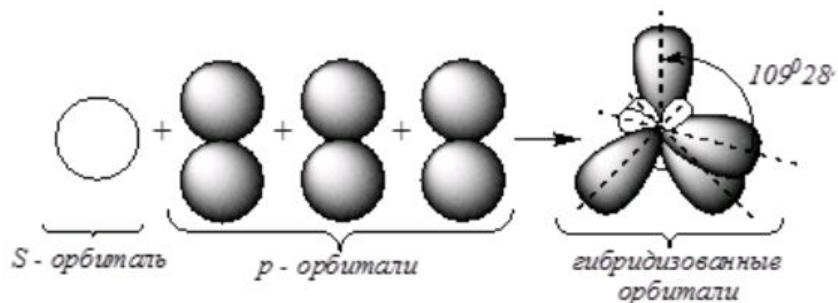
6 - 6 связей

2 - 2 связи



Гибридизация связей

1. sp^3 -Гибридизация

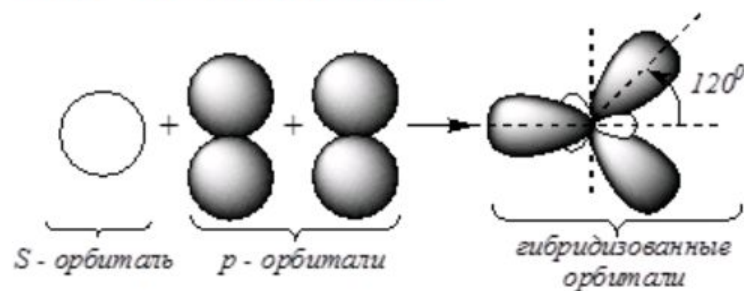


образуются четыре σ -связи с другими атомами или заполняются неподеленными парами электронов



Алканы

2. sp^2 -Гибридизация

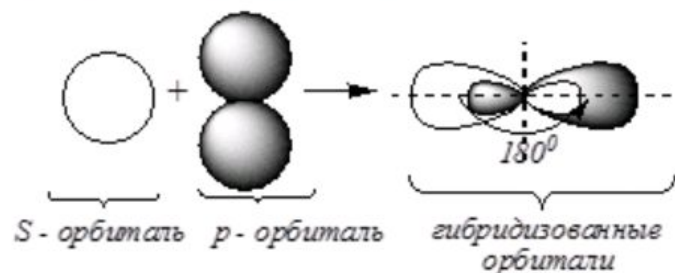


двойная связь-это сочетание одной σ -и одной π -связи.



Алкены

3. sp -Гибридизация

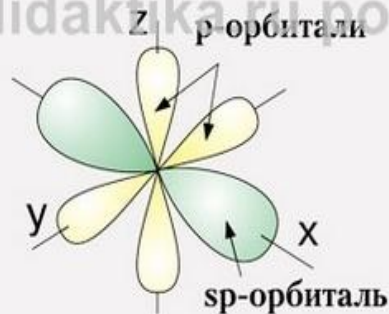
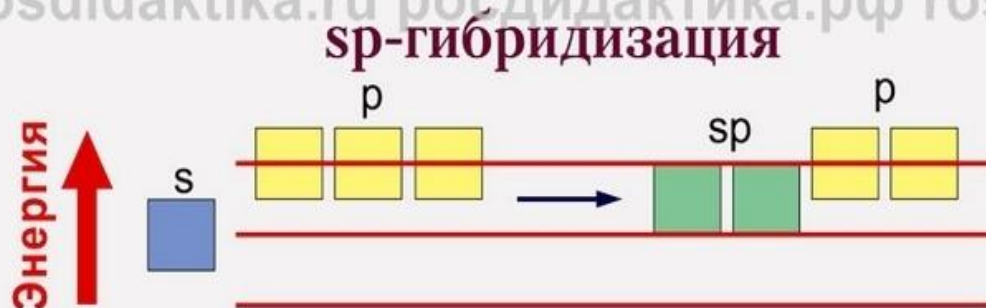


тройная связь-это сочетание одной σ -и двух π -связей



Алкины

ИЗМЕНЕНИЕ ОРБИТАЛЬНЫХ ЭНЕРГИЙ ПРИ ГИБРИДИЗАЦИИ

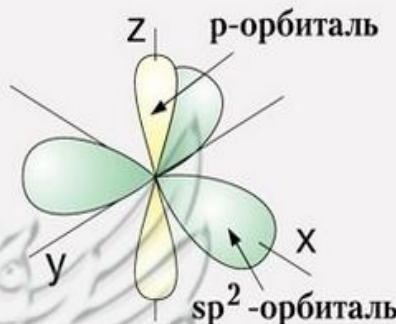
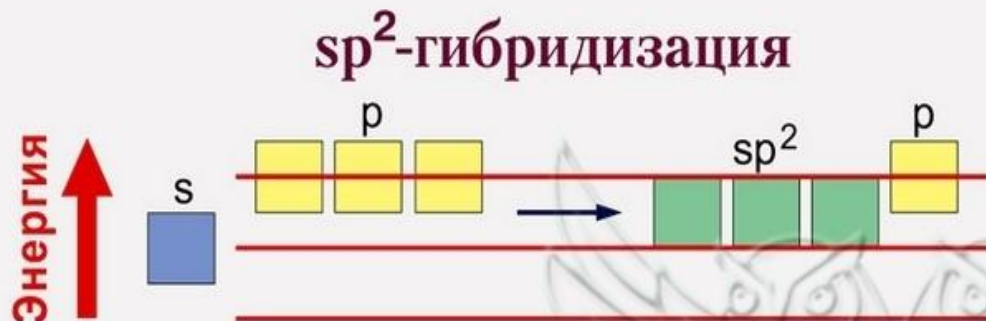


Две sp-гибридные орбитали и две р-орбитали

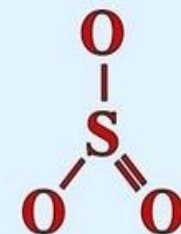
**ПРИМЕРЫ
МОЛЕКУЛ**



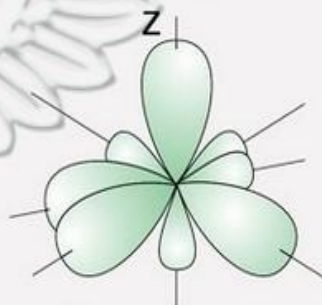
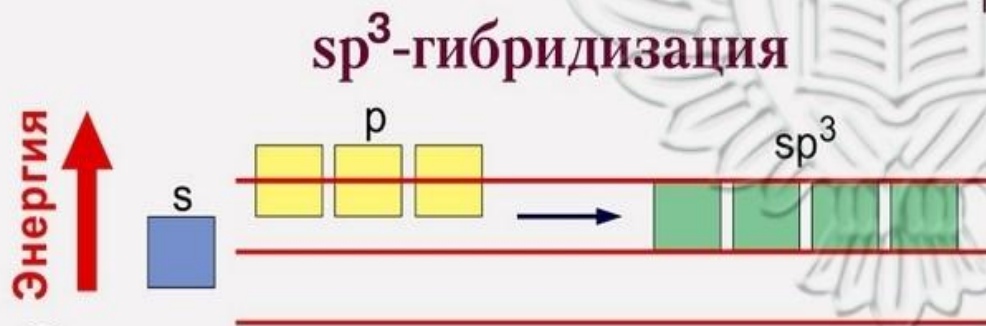
ЛИНЕЙНАЯ



Три sp²-гибридные орбитали и одна р-орбиталь



ПЛОСКАЯ
ТРЕУГОЛЬНАЯ

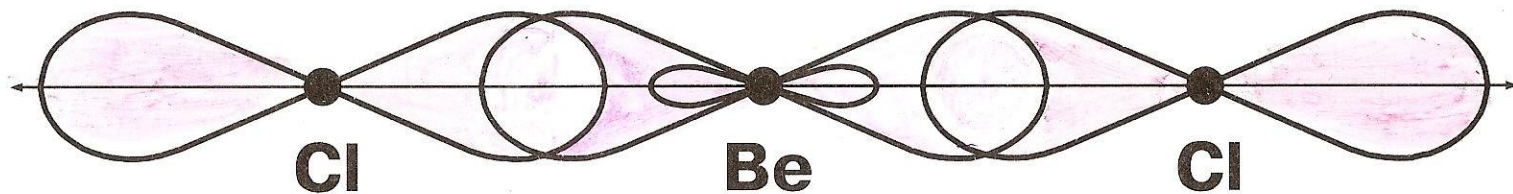
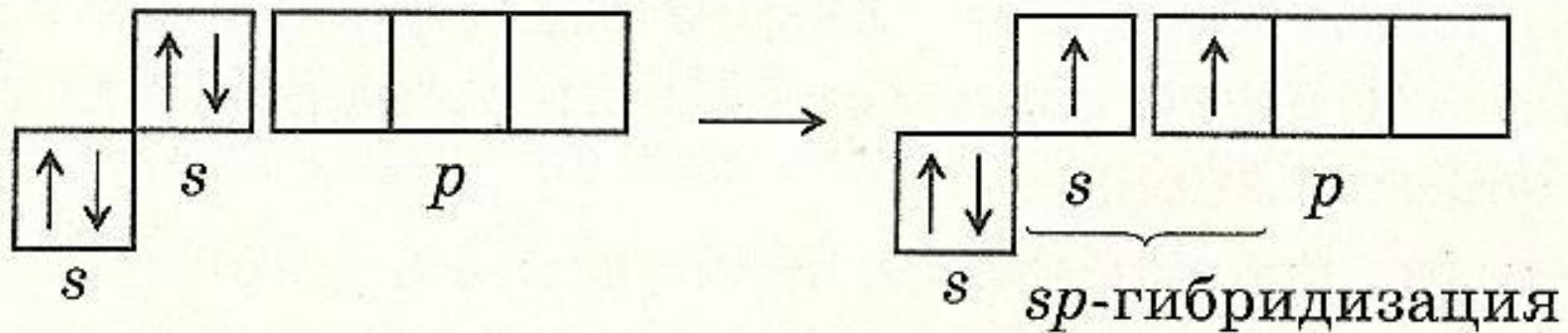
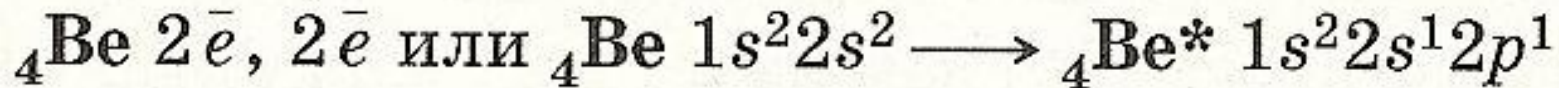


Четыре sp³-гибридные орбитали



sp-гибридизация

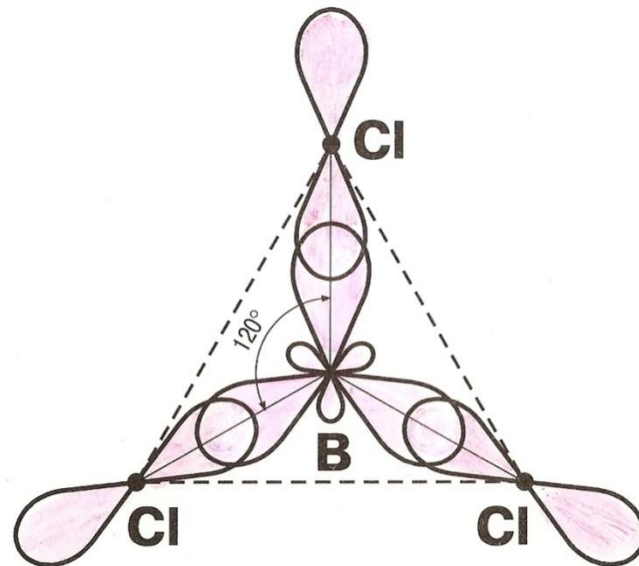
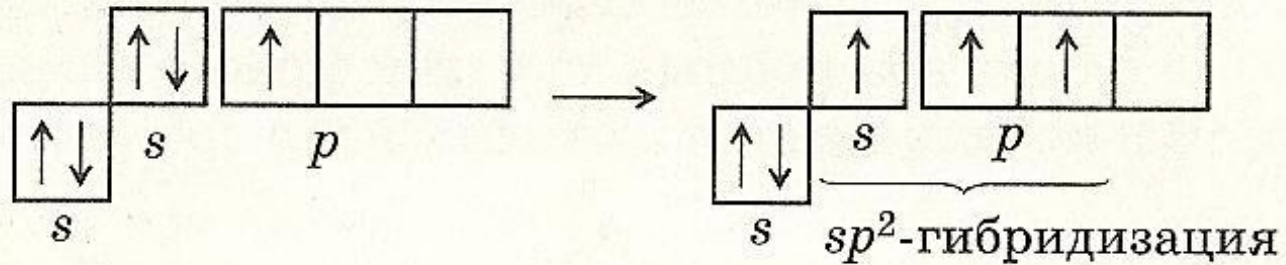
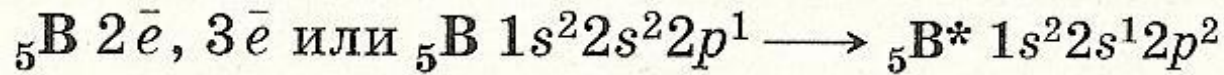
Сложные неорганические вещества



Линейная молекула BeCl_2

sp^2 -гибридизация

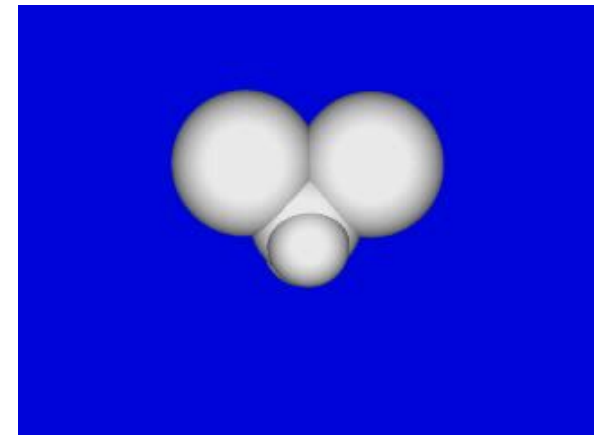
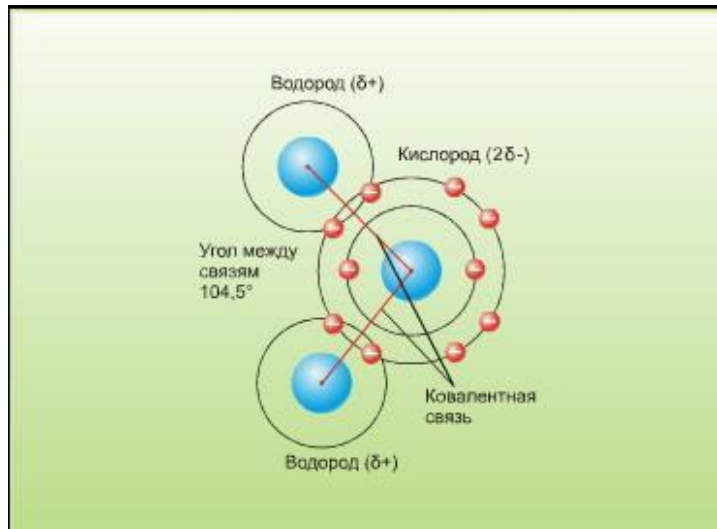
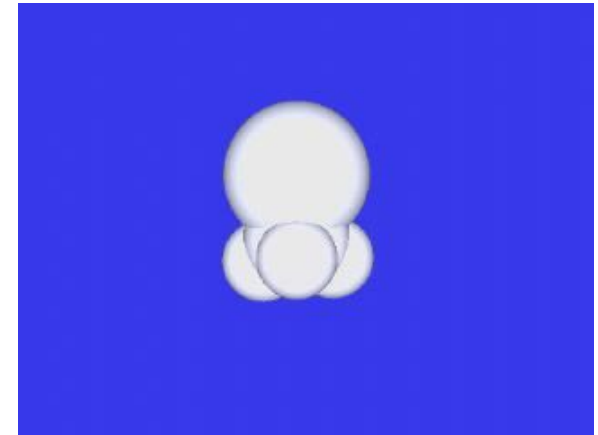
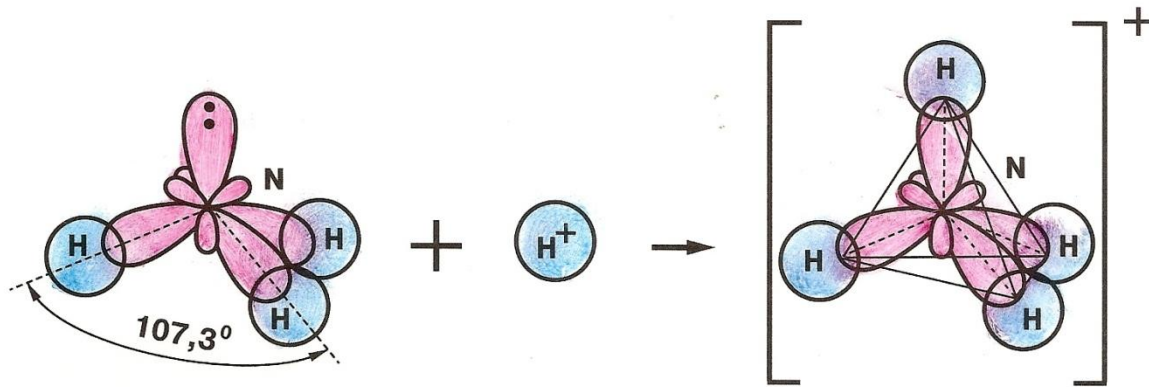
Сложные неорганические вещества



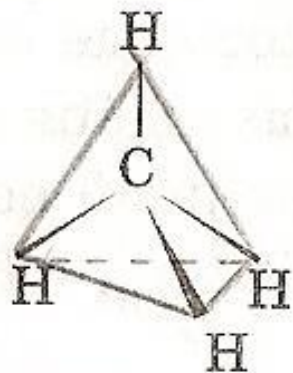
Плоская треугольная молекула BCl_3

sp^3 -гибридизация

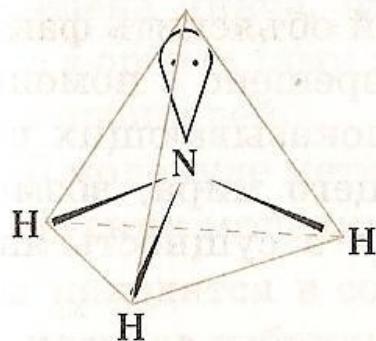
Сложные неорганические вещества



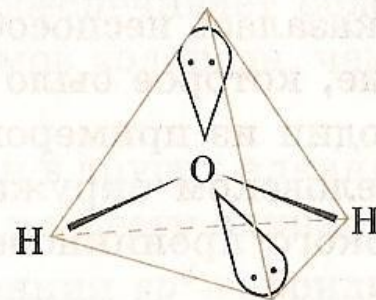
Зависимость формы молекулы от наличия неподеленных электронных пар



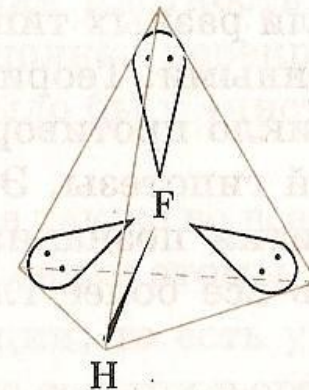
109°28'



107°3'



104°5'



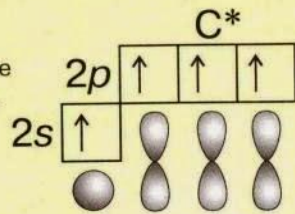
180°

ЭЛЕКТРОННАЯ КОНФИГУРАЦИЯ АТОМА УГЛЕРОДА. ТИПЫ ГИБРИДИЗАЦИИ

6



возбуждение атома



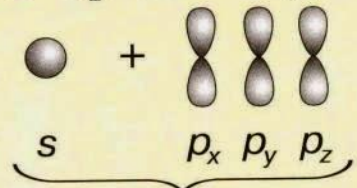
Электронная конфигурация атома углерода в возбужденном состоянии

Американский физик и химик. Создатель теории химической связи и аминокислотной теории белка. Нобелевская премия по химии (1954). Нобелевская премия мира (1962).

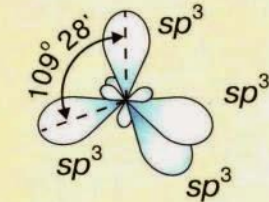
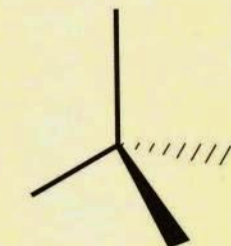
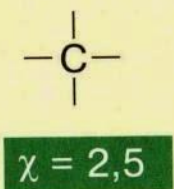
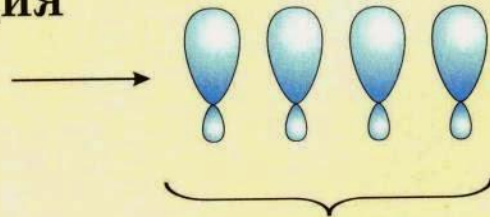


Л. Полинг
(1901–1994)

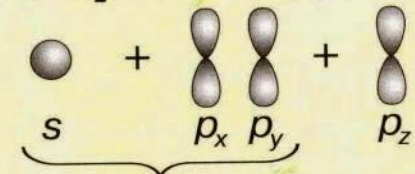
1 sp^3 -ГИБРИДИЗАЦИЯ



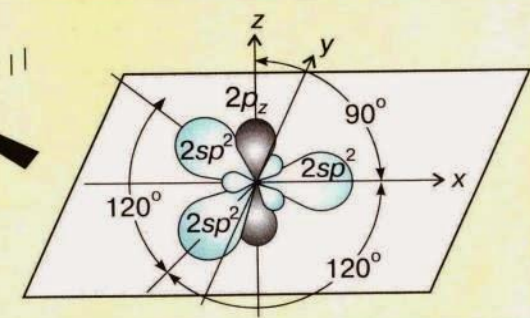
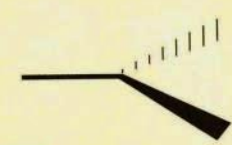
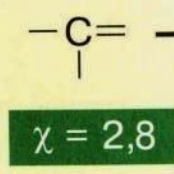
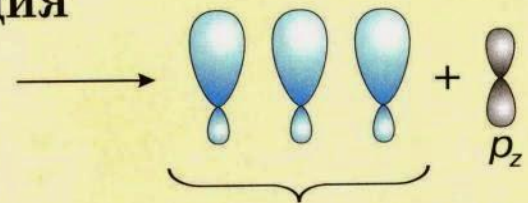
четыре негибридизованные орбитали ($s+3p$)



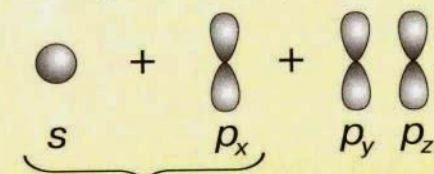
2 sp^2 -ГИБРИДИЗАЦИЯ



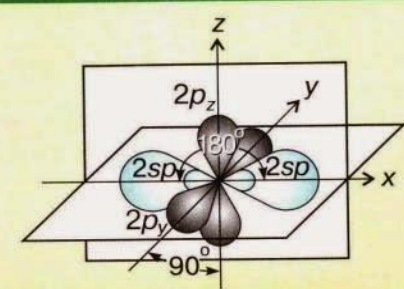
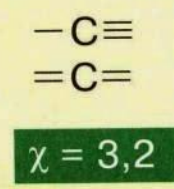
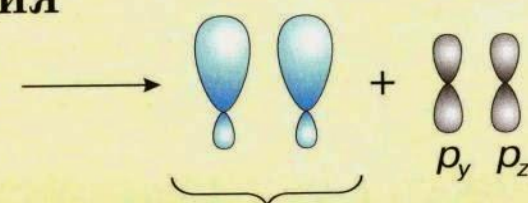
три негибридизованные орбитали ($s+2p$)



3 sp -ГИБРИДИЗАЦИЯ



две негибридизованные орбитали ($s+p$)



◆ ИС образуется между атомами металлов и неметаллов, т.е. между атомами резко отличающимися друг от друга по электроотрицательности.

◆ Механизм образования связи.

Атом неметалла забирает наружные электроны у атома металла и превращается в анион (отрицательно заряженный ион). Атом металла теряет электроны и превращается в катион (положительно заряженный ион). Ионы связаны электростатическими силами.

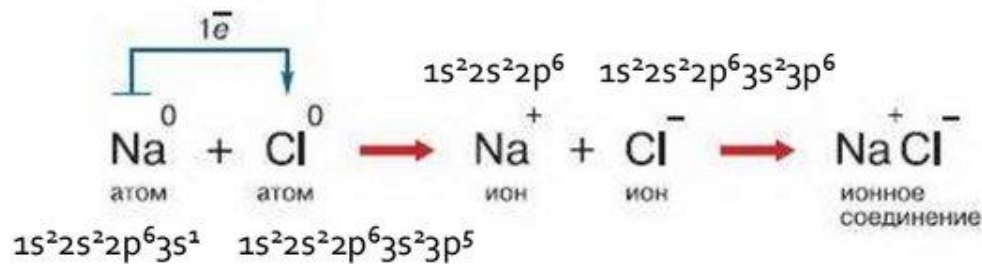
◆ Пример образования связи.



Ионная связь

Электростатическое притяжение между ионами.

Образуется между атомами типичных металлов и атомами типичных неметаллов.



Силы электростатического взаимодействия направлены во все стороны от иона.

Атом натрия



+



Атом хлора

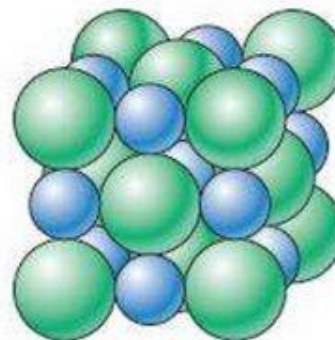
Ион натрия



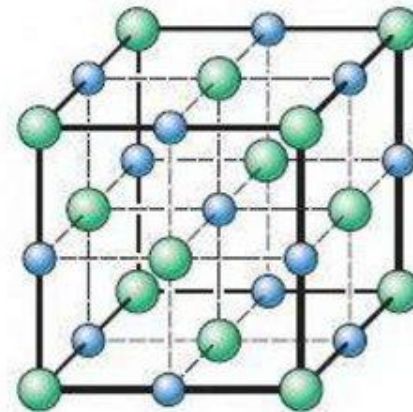
+



Ион хлора



Ионное соединение



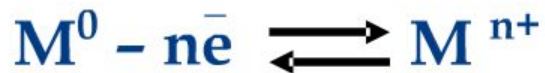
Вещества с ИС
имеют :

Ионную
кристаллическую
решетку

Свойства веществ:

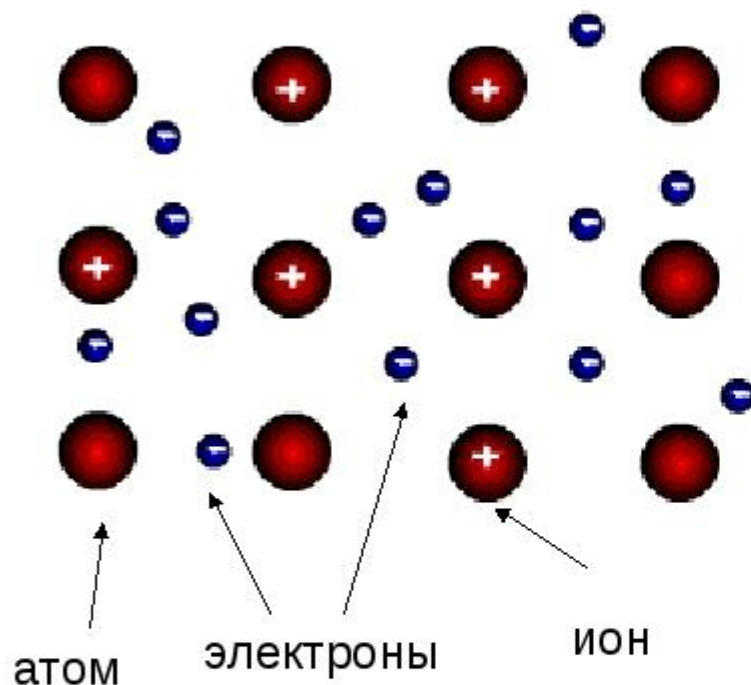
1. Все вещества при обычных условиях твердые.
2. Имеют высокие температуры кипения и плавления.
3. Расплавы и растворы проводят электрический ток.

- ◆ **Металлическая связь – связь в металлах и сплавах, которую выполняют относительно свободные электроны между ионами металлов в металлической кристаллической решетке.**
- ◆ **Схема образования металлической связи (M – металл):**



- ◆ **Свойства веществ:**
Твердость, ковкость, электрическая проводимость и теплопроводность, ковкость, пластичность, металлический блеск.

Металлическая связь



вид химической связи, которую осуществляют относительно свободные электроны между ионами в кристаллической решетке

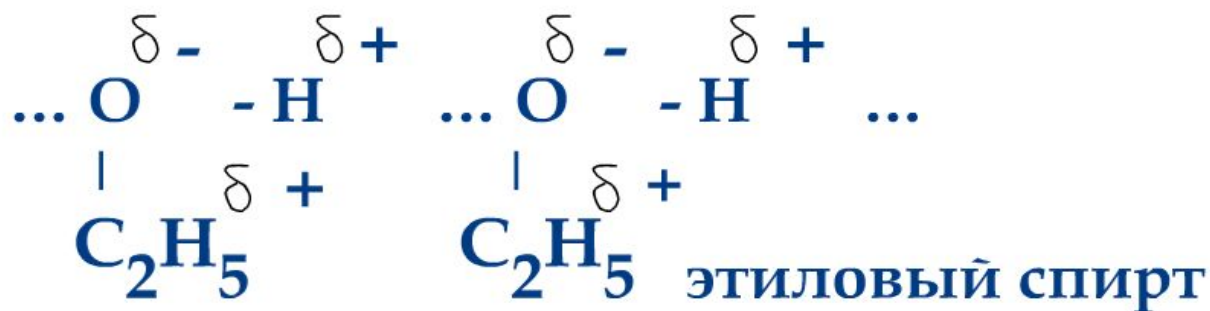
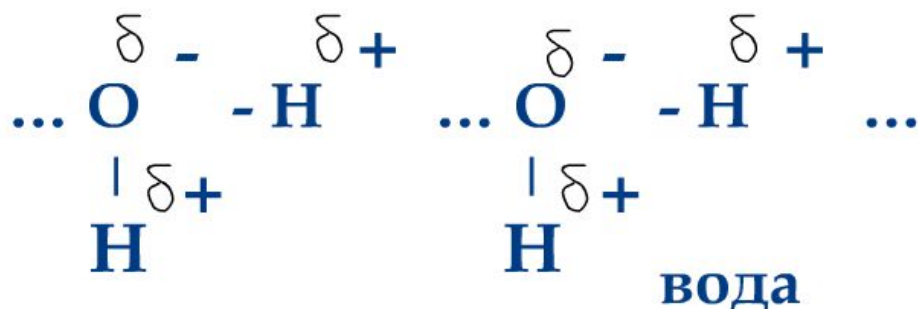
Механизм образования:



где n – валентность металла

◇ Водородная связь – связь между атомами водорода одной молекулы и сильноотрицательными элементами (O, N, F) другой молекулы.

◇ Примеры межмолекулярной водородной связи:



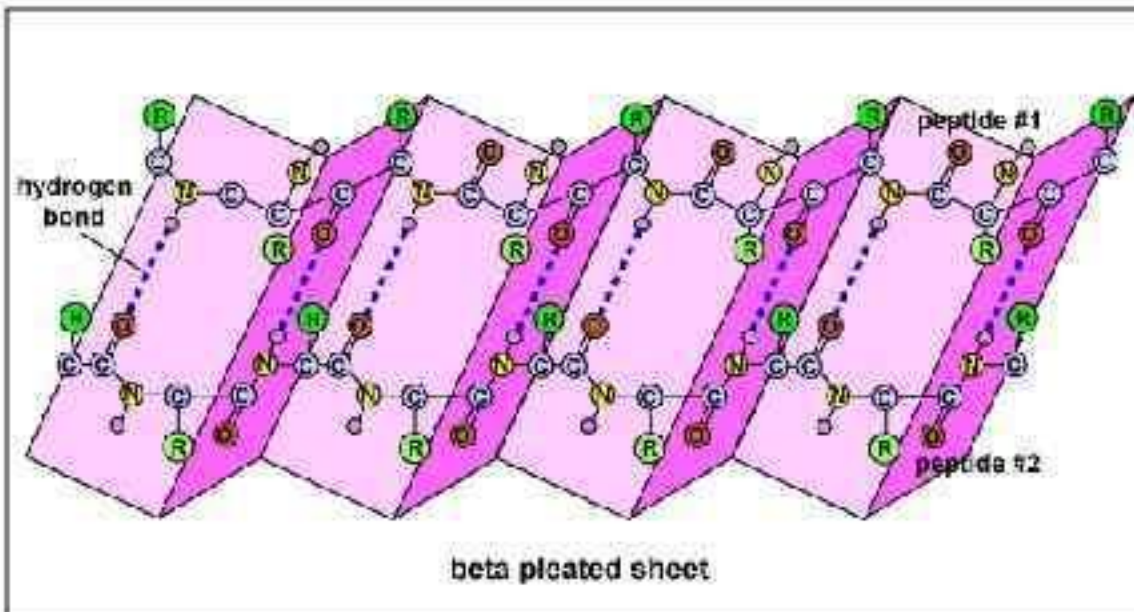
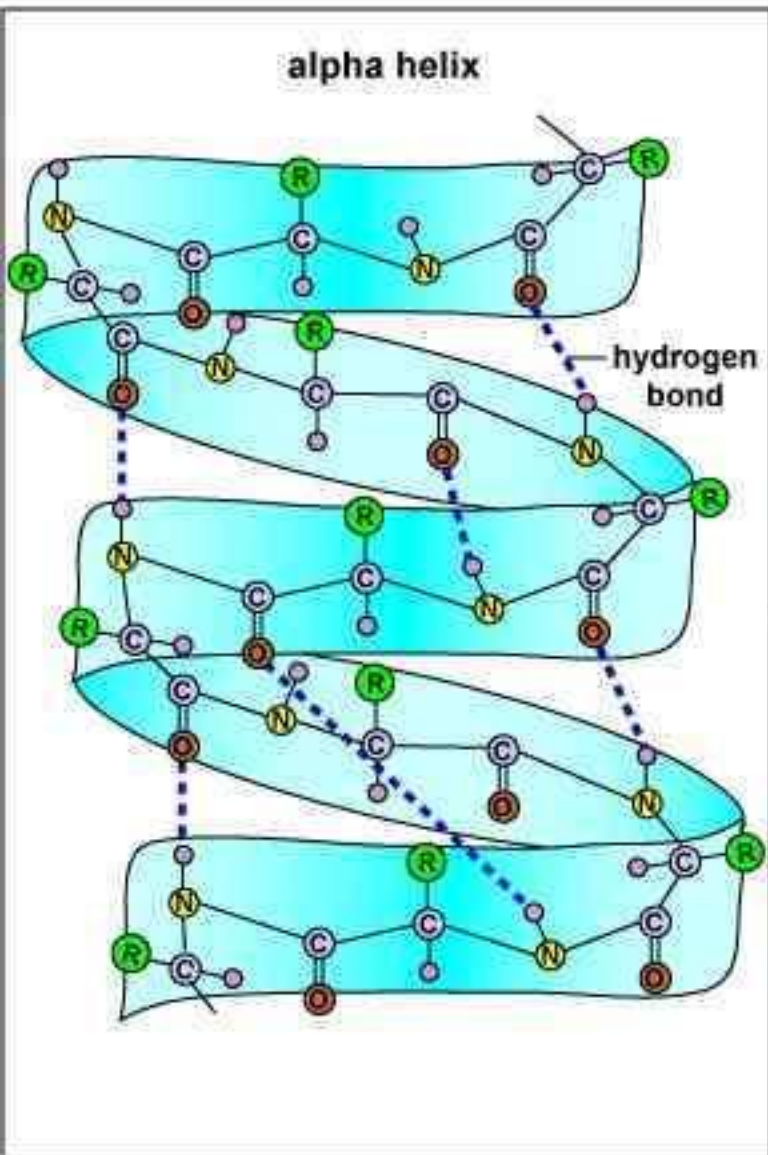
◆ Механизм возникновения связи:

Протон одной молекулы притягивается неподеленной электронной парой атома другой молекулы.

◆ Примеры веществ:

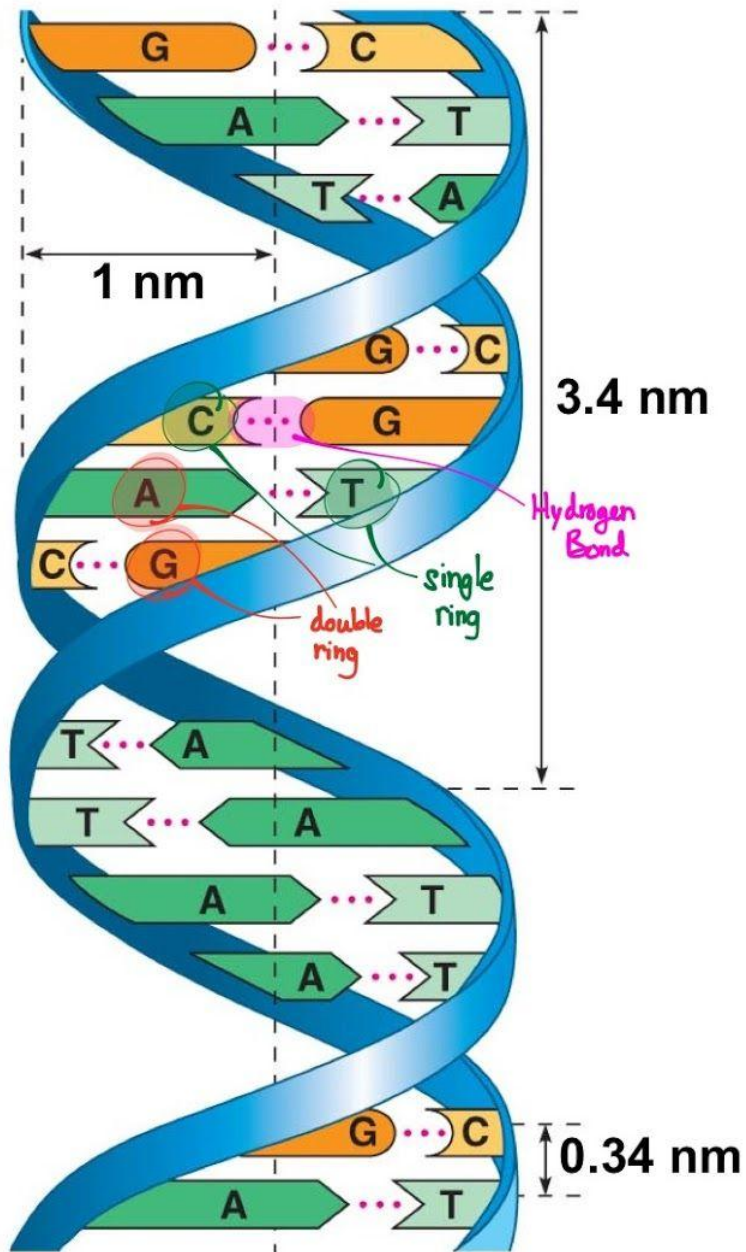
водородные соединения F, O, N (реже Cl и S), спирт.
Белки, нуклеиновые кислоты и др.

Водородные связи в белках

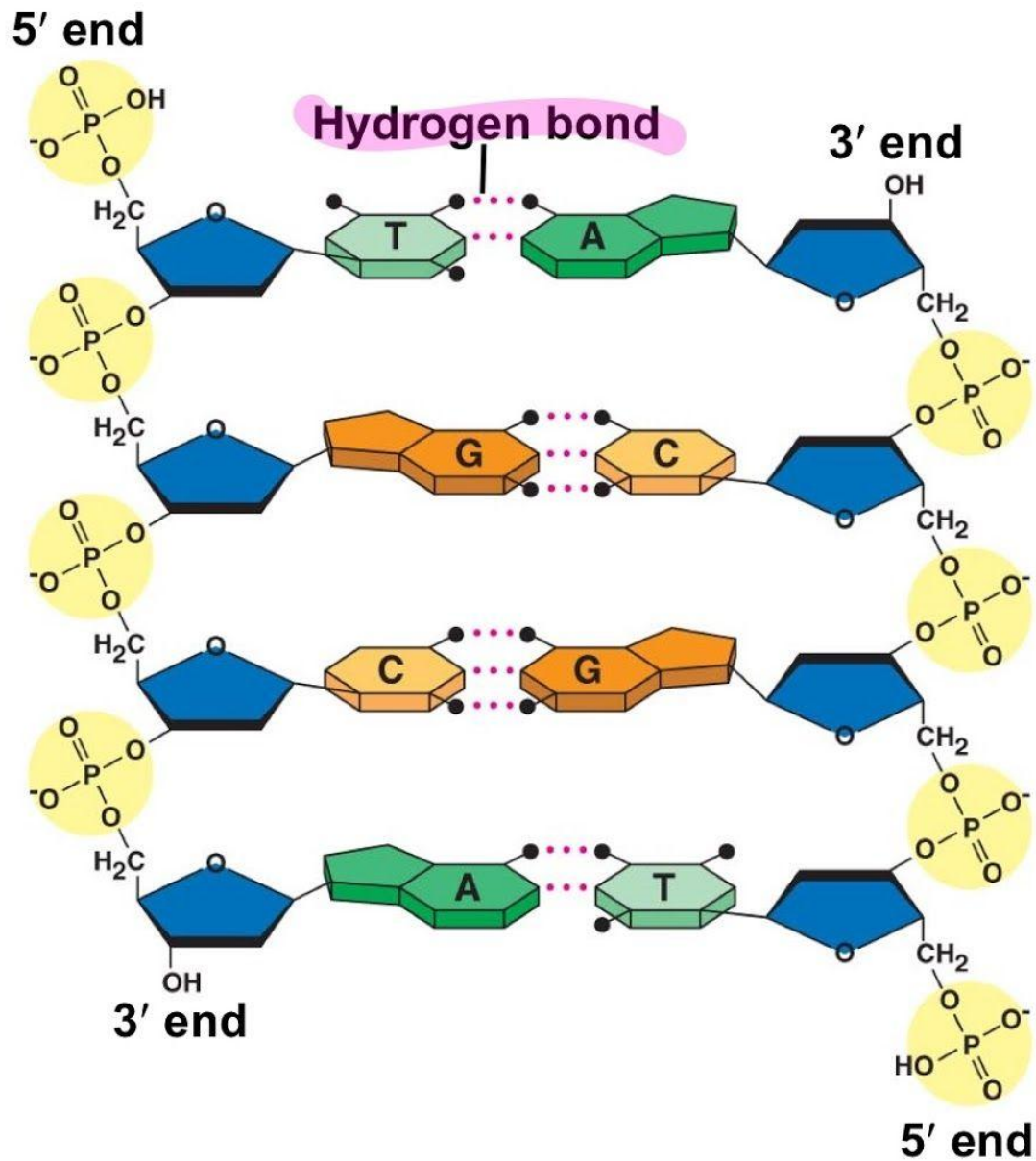


Фиксируют вторичную
структуру белка

Fig. 16-7a



(a) Key features of DNA structure



(b) Partial chemical structure

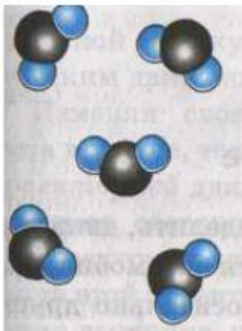
4. Агрегатное состояние вещества

газообразное

силы межмолекулярного взаимодействия очень малы.

Поэтому молекулы газов находятся на больших расстояниях друг от друга, поэтому газы сжимаются.

Их молекулы находятся в постоянном хаотическом движении, поэтому газы могут заполнять весь предоставленный им объем.



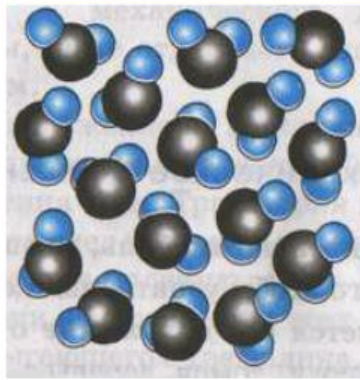
жидкое

Силы межмолекулярного взаимодействия очень велики.

Они удерживают частицы жидкости или твердого тела друг около друга.

Молекулы не имеют структуру.

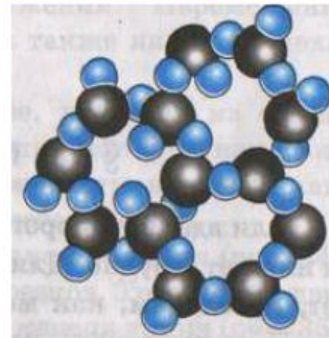
Жидкости меняют форму, но сохраняют объем.



твердое

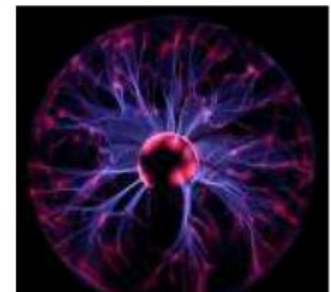
Молекулы имеют структуру (постоянный объем).

Твердое тело имеет постоянную форму и объем.



плазменное

Плазма характеризуется частичным или полным срывом электронов с их атомных орбит, при этом сами свободные электроны остаются внутри вещества. Таким образом, плазма, будучи ионизированной, в целом остается электрически нейтральной, поскольку число положительных и отрицательных зарядов в ней остается равным.



конденсированные состояния

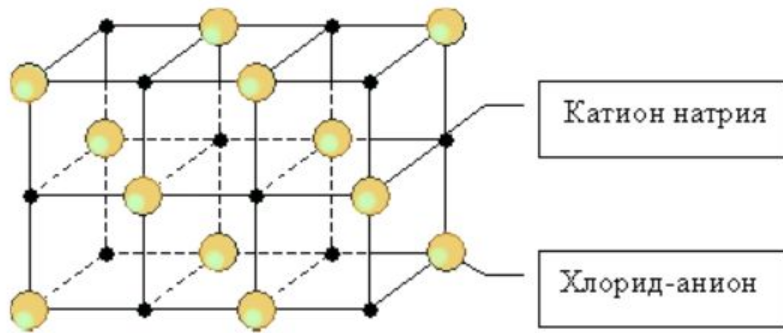
Твердые вещества

кристаллические

Кристаллическое состояние характеризуется упорядоченной структурой.

Упорядоченность в кристаллах обусловливается правильным геометрическим расположением частиц, из которых состоит твердое вещество. Каждое кристаллическое вещество имеет определенную, характерную форму.

Например, кристаллы поваренной соли имеют форму куба, калийной селитры - форму призмы, алюминиевых квасцов - форму октаэдров.

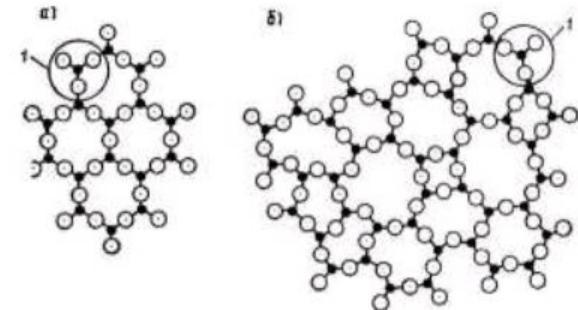


аморфные

Аморфные вещества не образуют правильной геометрической структуры, представляя собой структуры неупорядоченно расположенных молекул.

В отличие от кристаллических веществ, имеющих вполне определенную температуру плавления, аморфные вещества плавятся в широком интервале температур. При нагревании они постепенно размягчаются, затем начинают растекаться и, наконец, становятся жидкими.

Примерами аморфных веществ могут быть стекла и смолы.



Структура кварцевого стекла

Аморфные вещества



Янтарь



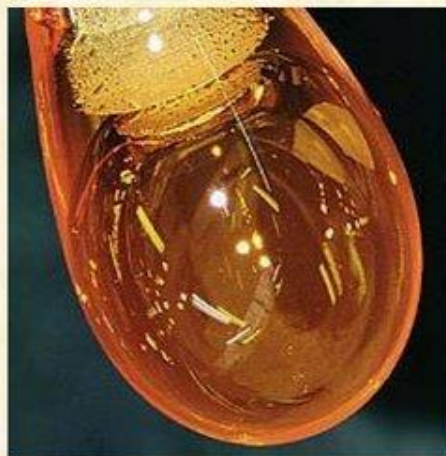
Жемчуг



Канифоль



Полиэтилен

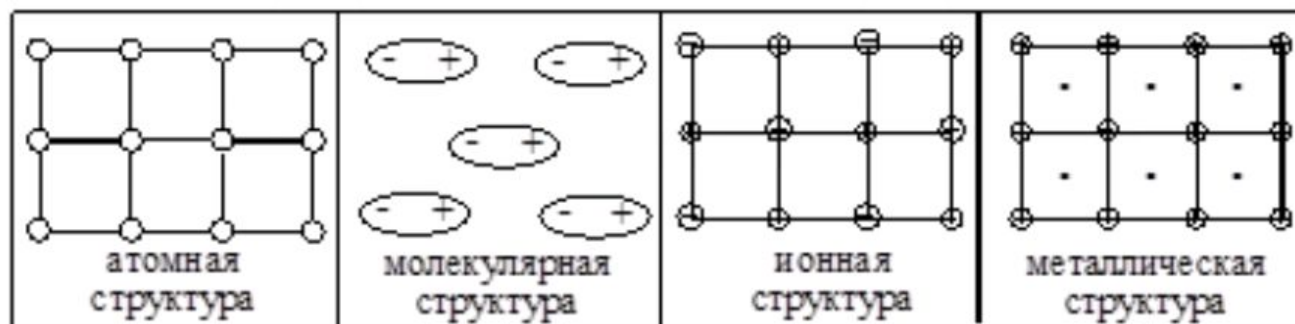


Стекло



Пчелиный воск

Типы кристаллических структур



Атомные кристаллы состоят из отдельных атомов, объединенных ковалентными связями.

Атомные кристаллы можно считать гигантскими молекулами. Они очень прочные и твердые, плохо проводят теплоту и электричество. Вещества, имеющие атомные кристаллические решетки, плавятся при высоких температурах. Они практически нерастворимы в каких-либо растворителях. Для них характерна низкая реакционная способность. Например, диоксид кремния.

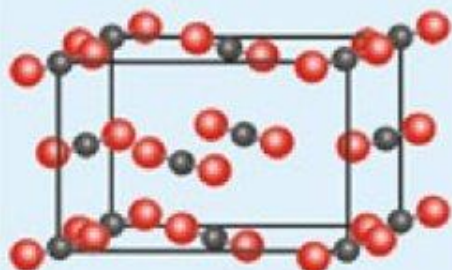
Молекулярные кристаллы построены из отдельных молекул, внутри которых атомы соединены ковалентными связями. Между молекулами действуют более слабые межмолекулярные силы. Поэтому такие кристаллы легко разрушаются, имеют низкие температуры плавления, малую твердость, высокую летучесть. Например, иод I_2

Ионные кристаллы образованы катионами и анионами (например, соли и гидроксиды большинства металлов). В них между частицами имеется ионная связь.

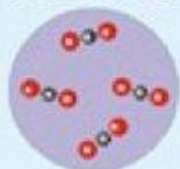
Для металлов характерна **металлическая кристаллическая решетка**. В ней имеется металлическая связь между атомами. В металлических кристаллах ядра атомов расположены таким образом, чтобы их упаковка была как можно более плотной. Связь в таких кристаллах является делокализованной и распространяется на весь кристалл. Металлические кристаллы обладают высокой электрической проводимостью и теплопроводностью, металлическим блеском и непрозрачностью, легкой деформируемостью

Примеры кристаллических решёток твердых веществ

МОЛЕКУЛЯРНЫЕ CO_2



Углекислый
газ

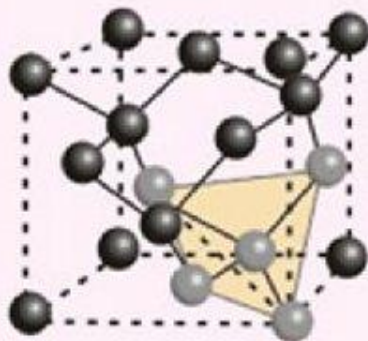


$t_{\text{кип}} -78^\circ\text{C}$

Твердая двуокись
углерода



АТОМНЫЕ C

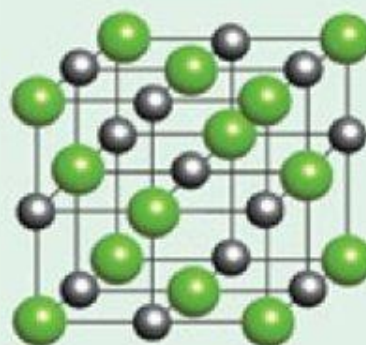


$t_{\text{пл}} 3500^\circ\text{C}$
 $t_{\text{кип}} 4200^\circ\text{C}$

Алмаз



ИОННЫЕ NaCl

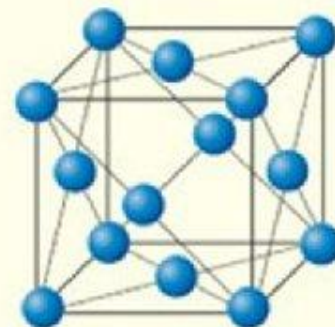


$t_{\text{пл}} 801^\circ\text{C}$
 $t_{\text{кип}} 1465^\circ\text{C}$

Галит



МЕТАЛЛИЧЕСКИЕ Cu



$t_{\text{пл}} 1083^\circ\text{C}$
 $t_{\text{кип}} 2567^\circ\text{C}$

Медь

