

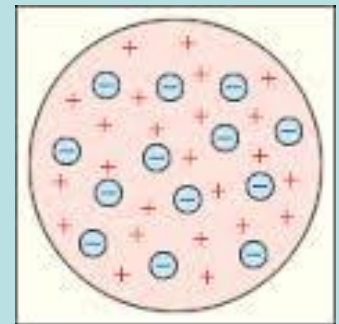
Лекція № 14. БУДОВА АТОМА

1. Теорія Бора
2. Рівняння Шредінгера для атома водню;
3. Квантування енергії, механічного та магнітного моментів орбітального руху електрона. Спін електрона
4. Спектр атома водню та воднеподібних атомів
5. Принцип Паулі. Розподіл електронів в атомах за енергетичними станами
6. Періодична система елементів
7. Рентгенівські спектри атомів

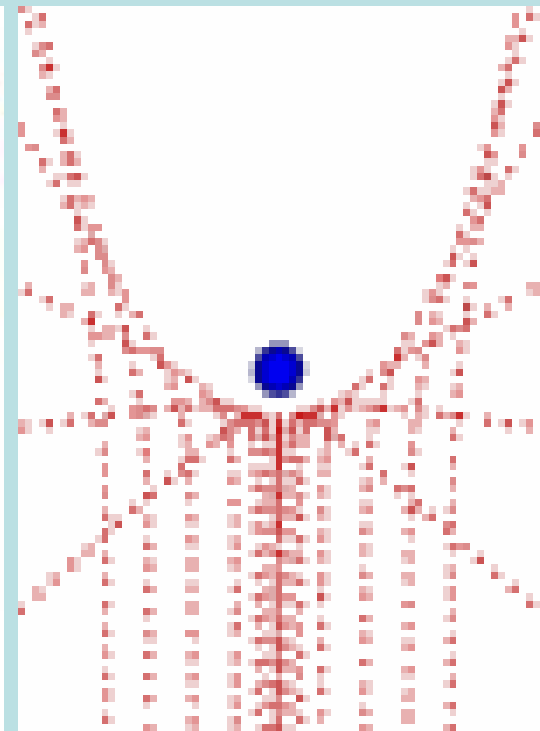
1. Теорія Бора

Передумови створення сучасної моделі атома. Термін атом - «неподільний» ввів Демокрит (давньогр. вч., 300 р. до н.е.). Такі метафізичні уявлення щодо структури атома панували до кінця ХІХст., коли завдяки великій кількості видатних відкриттів, таких як: досліди Фарадея (ХІХ ст.), пропускання електричного струму через рідини, відкриття Круксом катодного флюоресцентного випромінювання у вакуумі, вивчення фотоефекту стало зрозуміло, що атом – це надзвичайно складна система.

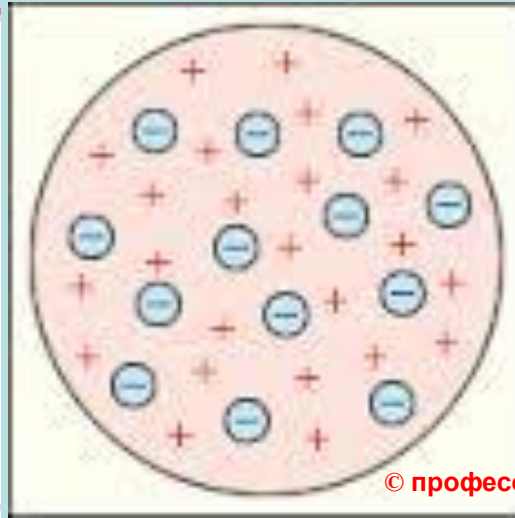
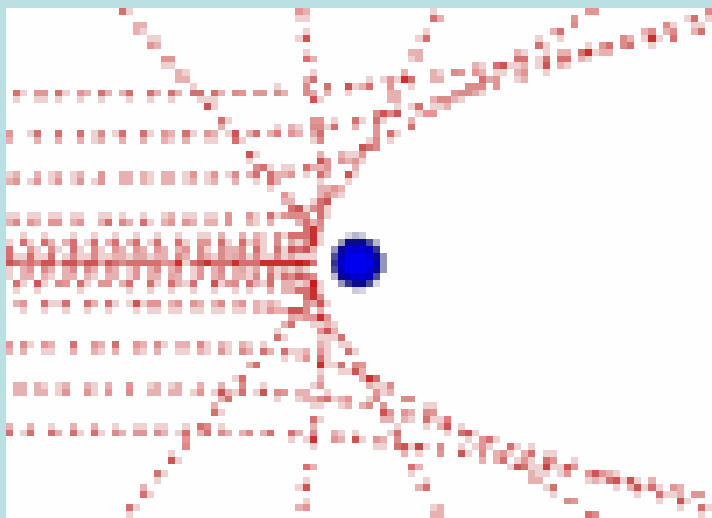
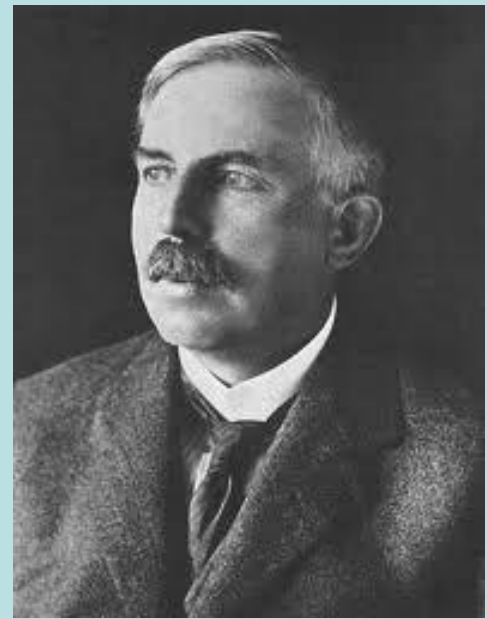
У 1901 р. Дж. Томсон першим спробував створити модель атому узагальнюючи експериментальні дані. Модель атому за Томсоном являє собою рівномірно заряджену кулю радіусом $\sim 10^{-10}$ м, всередині якої біля своїх положень рівноваги коливаються електрони, їх сумарний від'ємний заряд дорівнює додатному заряду кулі.



У 1911 р. Е. Резерфорд для експериментального підтвердження моделі атому Томсона здійснив досліди із розсіяння α -частинок тонкою металевою фольгою.



На основі результатів дослідів Резерфорд запропонував ядерну або планетарну модель атому: атом являє собою нейтрально заряджену систему, в центрі якої знаходиться позитивно заряджене ядро зарядом Ze , розмірами 10^{-15} – 10^{-14} м і масою практично рівною масі самого атому, а навколо ядра, в області діаметром $\sim 10^{-14}$ м, по замкненим орбітам рухаються Z електронів, утворюючи електронну оболонку атому.

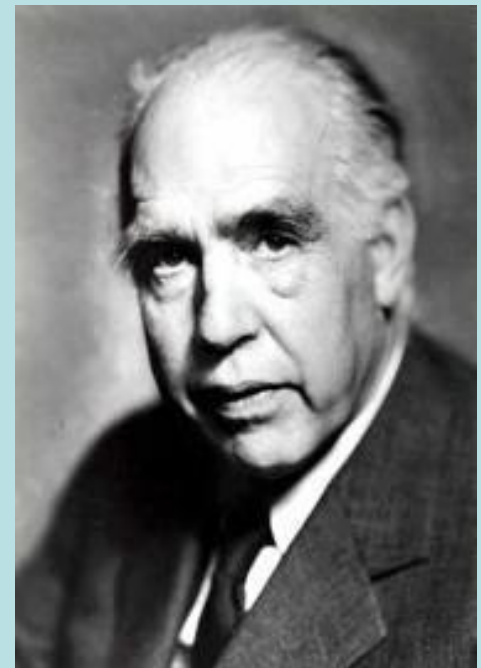


Відеофрагмент
“Природа лінійчатих спектрів
атому водню за Бором”

Оскільки електрон в атомі рухається по коловій орбіті з доцентровим прискоренням, то згідно законів класичної електродинаміки, вони мають неперервно випромінювати електромагнітні хвилі. В результаті, електрон, рухаючись по спіралі, мав би наблизитись до ядра і впасти на нього.

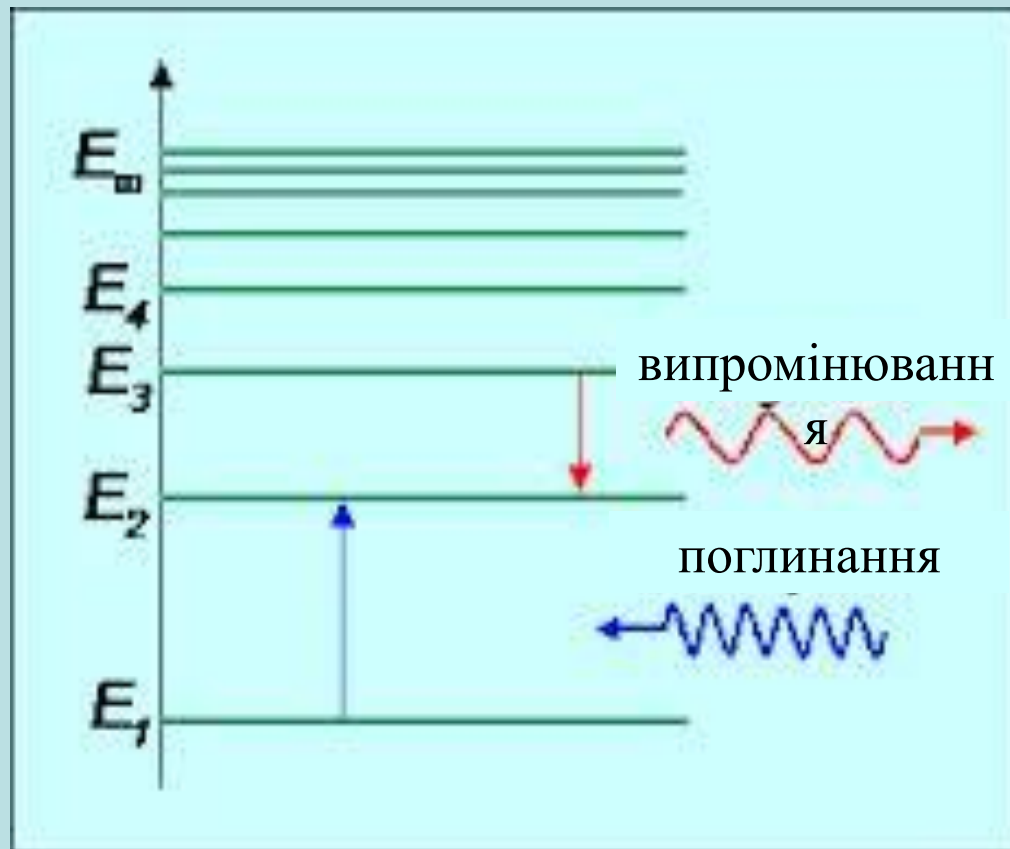
Експериментальні факти ж свідчать про стійкість атому та дискретність електромагнітного випромінювання атомами.

Для пояснення розбіжностей між уявленнями класичної електродинаміки і експериментальними фактами, Н. Бор поєднав планетарну модель атома Е. Резерфорда з гіпотезою М. Планка про квантову природу світла.



В основі теорії Н. Бора лежать три постулати:

Перший постулат Бора (постулат стаціонарних станів): існують деякі стаціонарні стани атома з відповідними значеннями енергії E_1, E_2, \dots, E_n перебуваючи в яких, він не випромінює енергію.



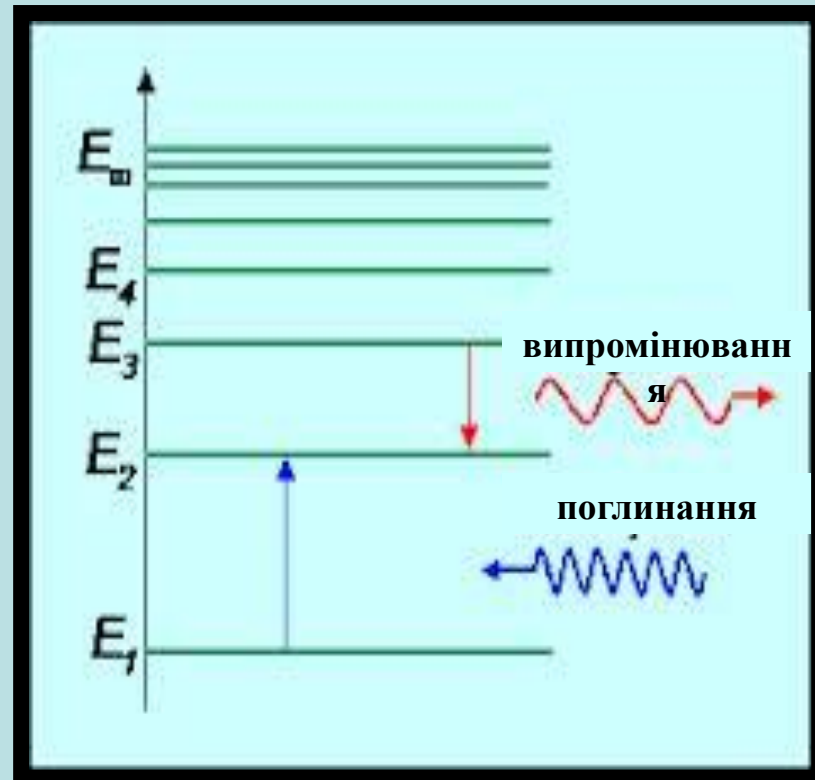
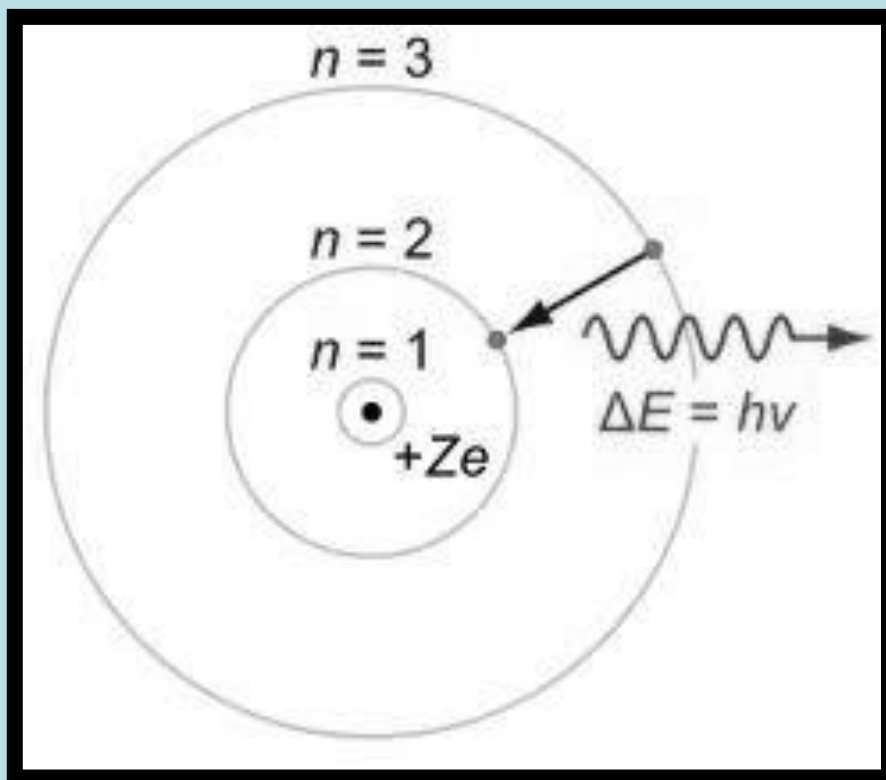
Другий постулат Бора (правило квантування орбіт): в стаціонарному стані атома електрон, рухаючись по коловій орбіті, повинен мати квантові значення моменту імпульсу, які задовольняють умову

$$L_n = m v_n r_n = n \hbar, \quad (n = 1, 2, \dots), \quad \hbar = \frac{h}{2\pi},$$

де m – маса електрона,
 v_n – його швидкість,
 r_n – радіус орбіти електрона.

Третій постулат Бора (правило частот):

при переході атома з одного стаціонарного стану в інший випромінюється або поглинається один фотон з енергією $h\nu_{kn} = E_k - E_n$, яка дорівнює різниці енергій відповідних стаціонарних станів.



Випромінювання фотона відбувається при переході атома зі стану з більшою енергією E_k стан з меншою енергією E_n тобто при переході електрона з орбіти більш віддаленої від ядра на ближчу до ядра орбіту. Поглинання енергії супроводжується переходом атома у стан з більшою енергією, і електрон переходить на віддаленішу від ядра орбіту. Набір можливих частот $\nu_{kn} = \frac{E_k - E_n}{h}$ квантових переходів і визначає лінійчатий спектр атома.

Постулати, висунуті Бором, дозволили розрахувати спектр атома водню і воднеподібних систем, а також теоретично розрахувати сталу Рідберга.

2. Рівняння Шредінгера для атома водню.

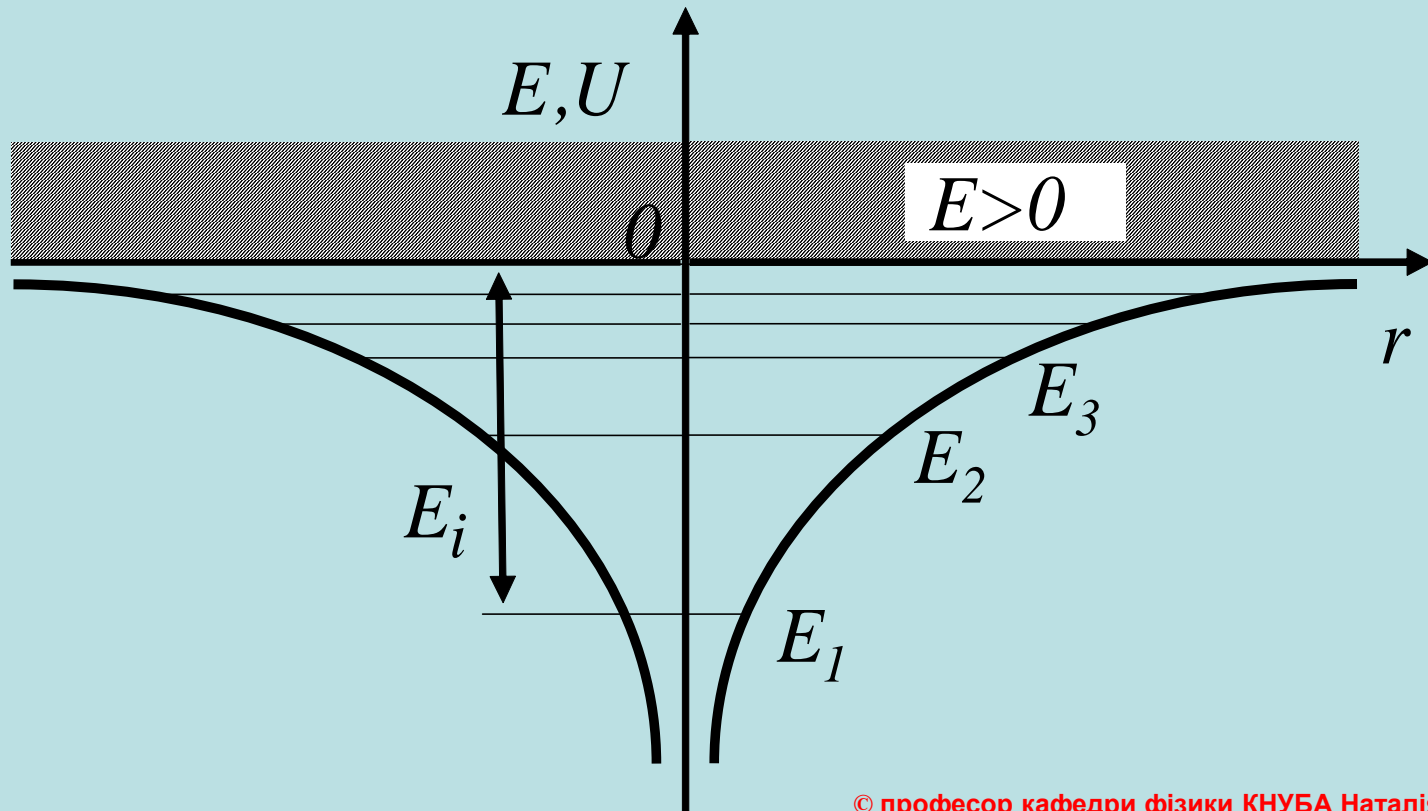
Розглянемо основи систематики квантових станів атомів на прикладі воднеподібних атомів – найпростіших атомів, які містять єдиний зовнішній електрон.

Потенціальна енергія взаємодії електрона з атомним ядром, заряд якого Ze .

$$U(r) = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r},$$

На графіку наведено вигляд функції $U(r)$.

$$U(r) = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r},$$



Стан електрона в атомі водню описується хвильовою функцією ψ , яка є розв'язком стаціонарного рівняння Шредінгера

$$\Delta\psi + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E + \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) \psi = 0,$$

де E – повна енергія електрона в атомі,
 m – маса електрона.

Рівняння Шредінгера має розв'язки лише при таких власних дискретних значеннях енергії

$$E_n = -\frac{1}{n^2} \frac{Z^2 m e^4}{8h \varepsilon_0^2}, \quad (n = 1, 2, 3, \dots),$$

Нижній рівень E_1 – основний, відповідає мінімально можливій енергії електрона в атомі водню, всі інші енергетичні рівні ($E_n > E_1$) – *збуджені*.

Якщо $E < 0$ рух електрона є зв'язаним, а при $E > 0$ рух електрона – вільний, тобто електрон може покинути межі атома.

Енергія іонізації атома водню дорівнює:

$$E_i = -E_1 = \frac{me^4}{8h^2 \varepsilon_0^2} = 13,55 \text{ eV}$$

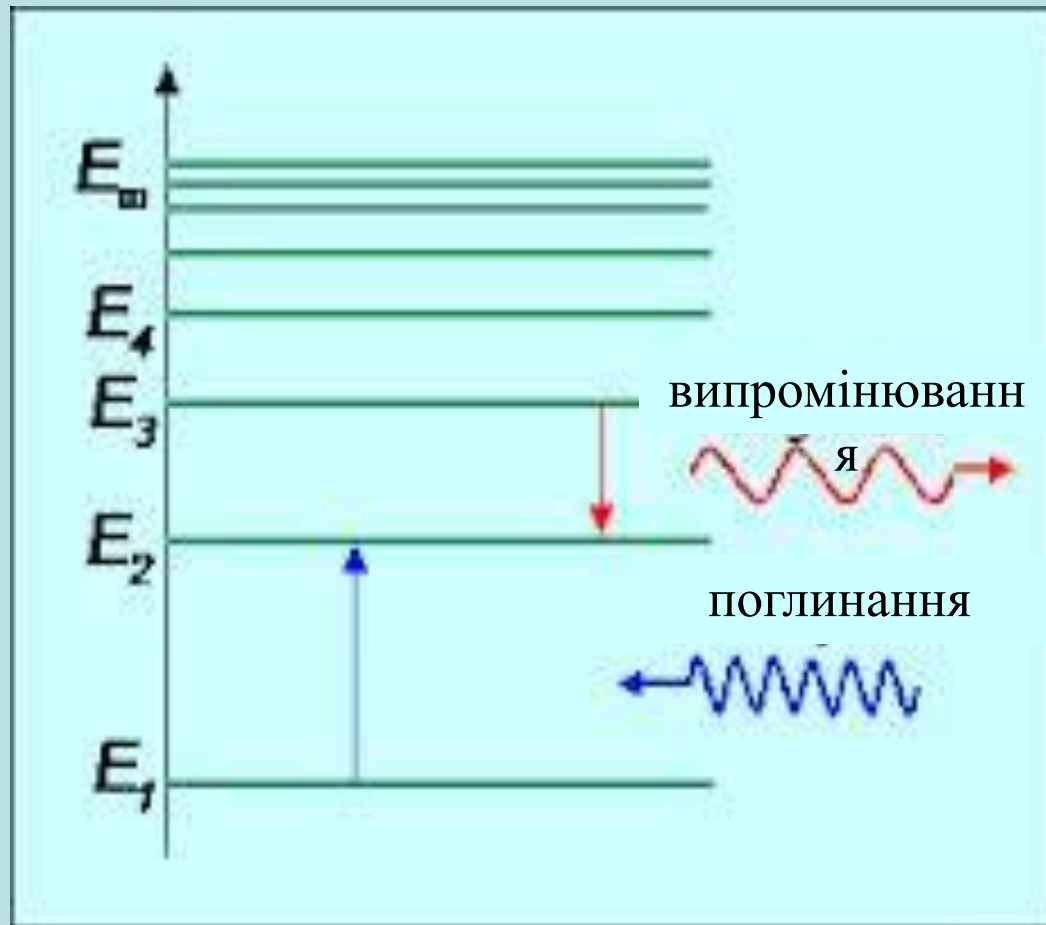
3. Квантування енергії, механічного та магнітного моментів орбітального руху електрона. Спін електрона

Рівняння Шредінгера задовольняють власні функції $\Psi_{n,l,m}$ визначається числами n , l , m , які отримали назву *квантових чисел*:

- n – головне квантове число;
- l – азимутальне квантове число;
- m_l – магнітне квантове число;
- m_s – спінове квантове число.

Головне квантове число n визначає енергію електрона в атомі:

$$n=1, 2, 3\dots$$



Орбітальне (азимутальне) квантове число l при заданому n приймає значення:

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

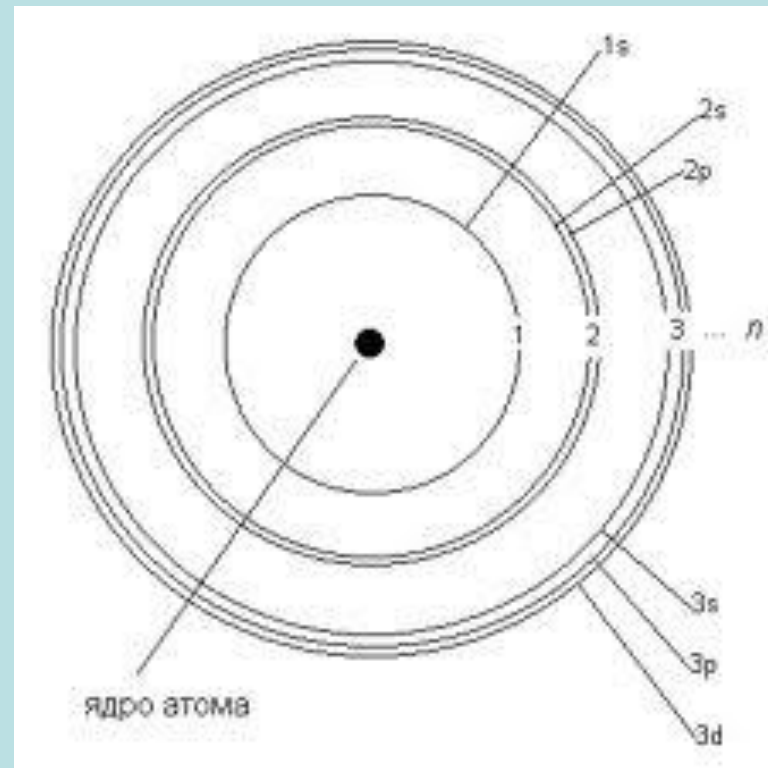
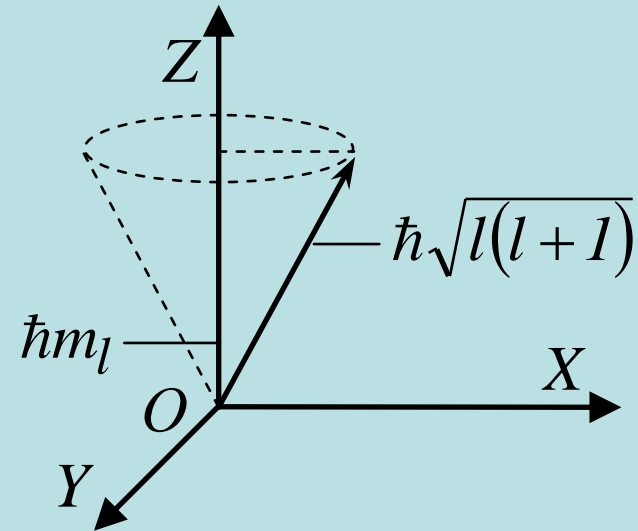
l визначає величину моменту імпульсу (механічного орбітального моменту) електрона в атомі:

$$L_l = \hbar \sqrt{l(l+1)}$$

$$L_n = m v_n r_n = n \hbar,$$

де m – маса електрона,
 v_n – його швидкість,
 r_n – радіус орбіти електрона.

$$\hbar = \frac{h}{2\pi}, \quad (n = 1, 2, \dots),$$



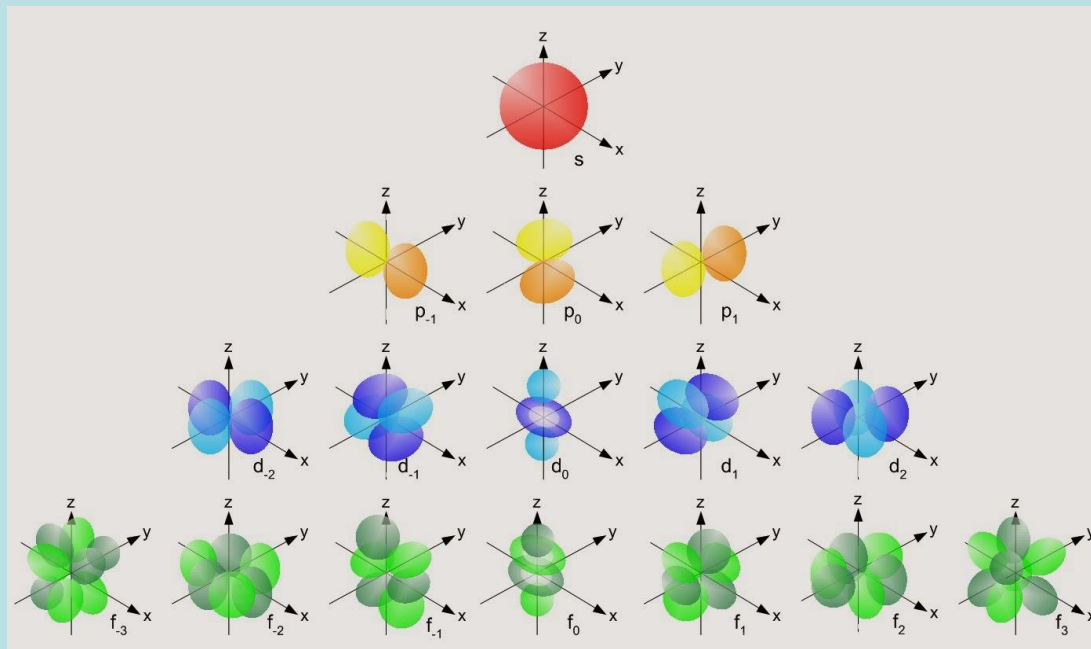
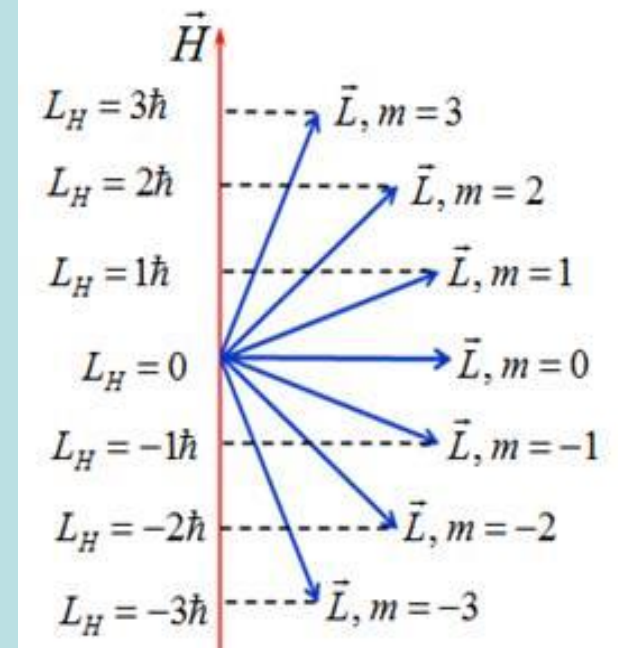
Магнітне квантове число m_l

при заданому l набуває значень:

$$m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l;$$

і визначає проекцію моменту імпульсу електрона на заданий напрямок (просторове квантування):

$$L_{l_z} = m_l \hbar$$

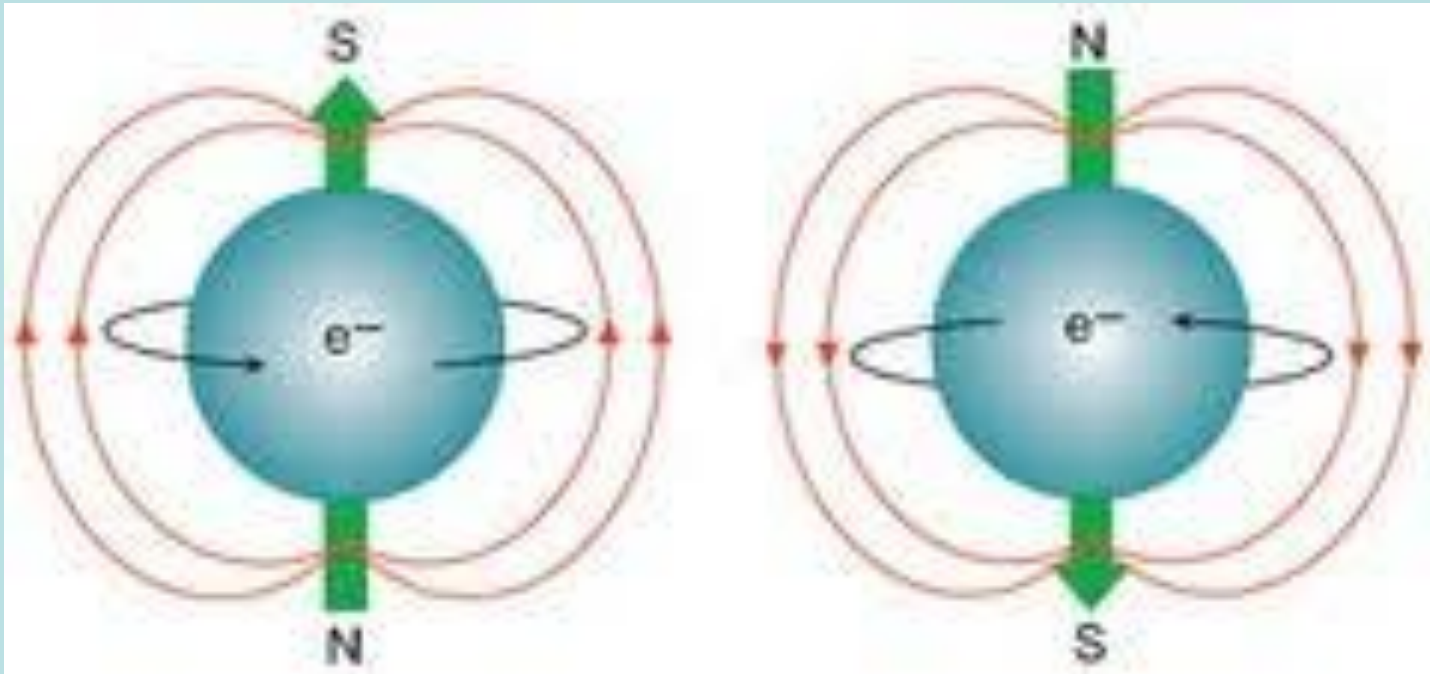


Спінове квантове число m_s має лише два значення

$$m_s = +1/2 \text{ і } -1/2.$$

і визначає проекцію власного моменту імпульсу електрона на заданий напрямок:

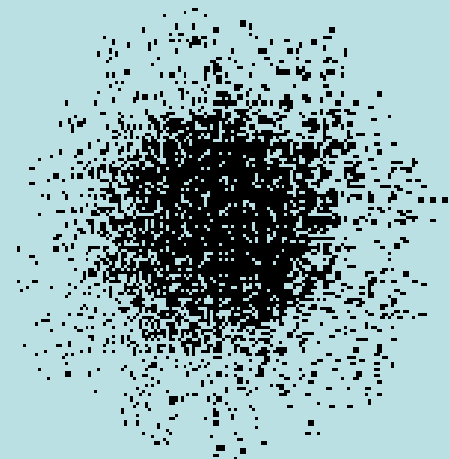
$$L_{sz} = \hbar m_s$$



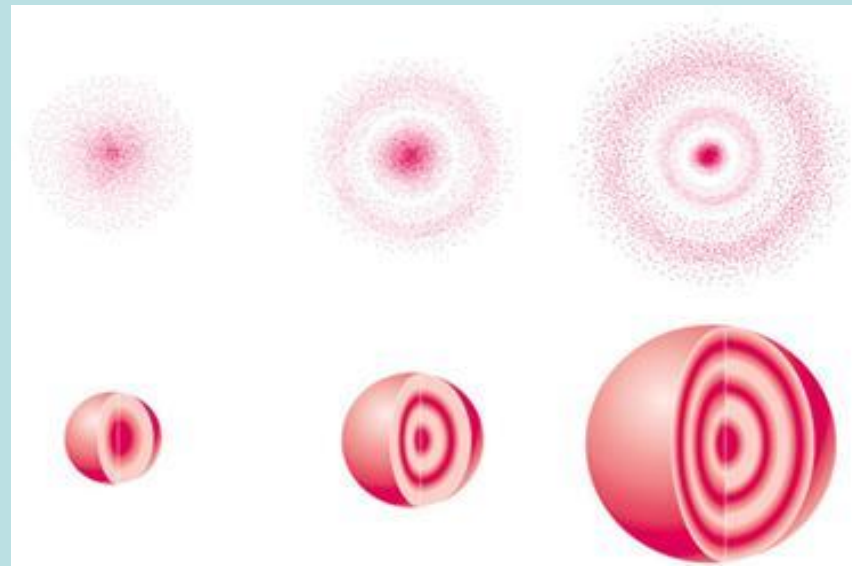
Ймовірність знаходження електрона у різних частинах атому різна. Електрон при своєму русі ніби “розмазаний” по всьому об’єму, утворюючи електронну хмаринку, густина якої характеризує ймовірність знаходження електрону у різних точках об’єму атома.

На рисунку наведено вигляд електронної хмаринки як набору миттєвих “фотографій” електрона: а – вигляд з боку, б – вигляд у перерізі.

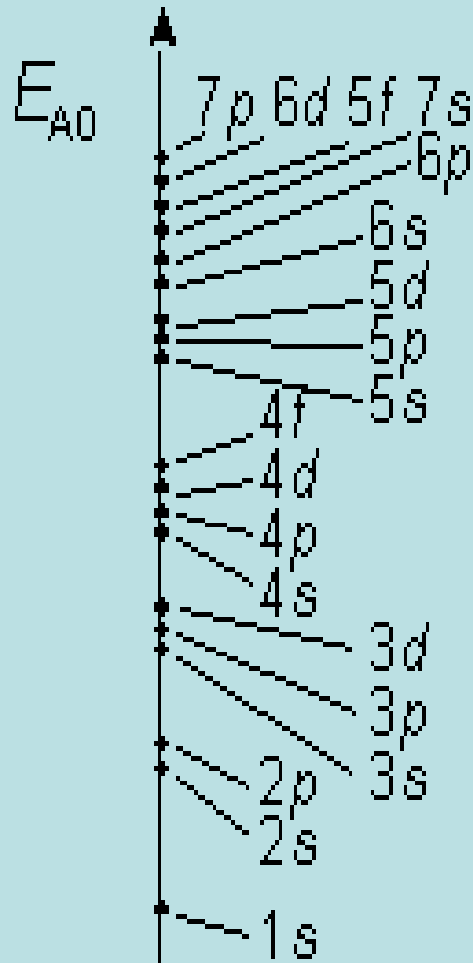
а

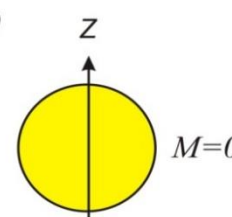
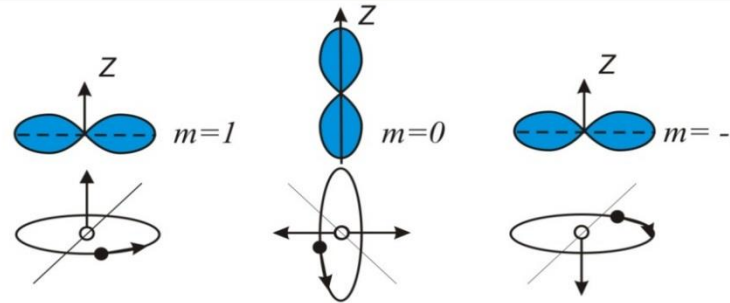
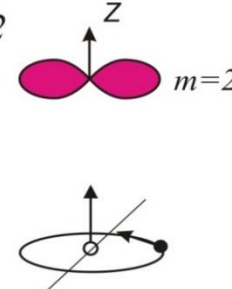
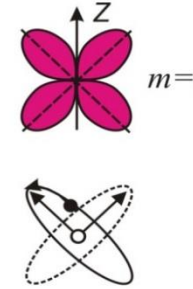
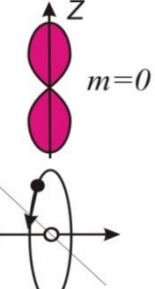
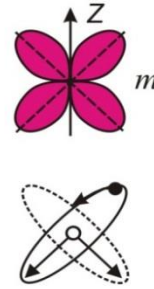
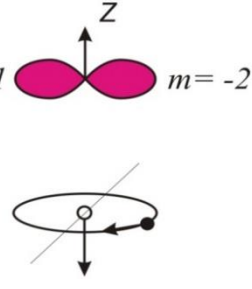
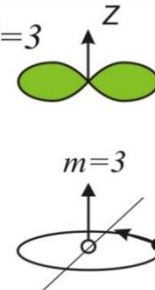
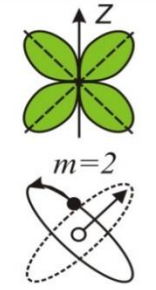
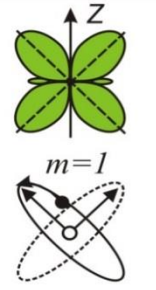
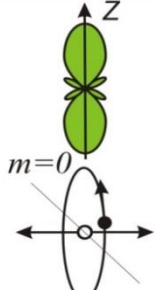
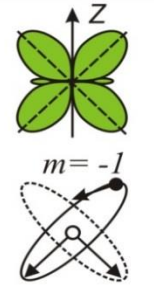
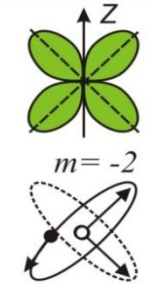
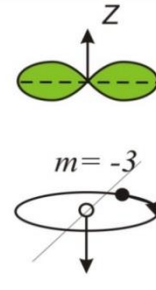


б

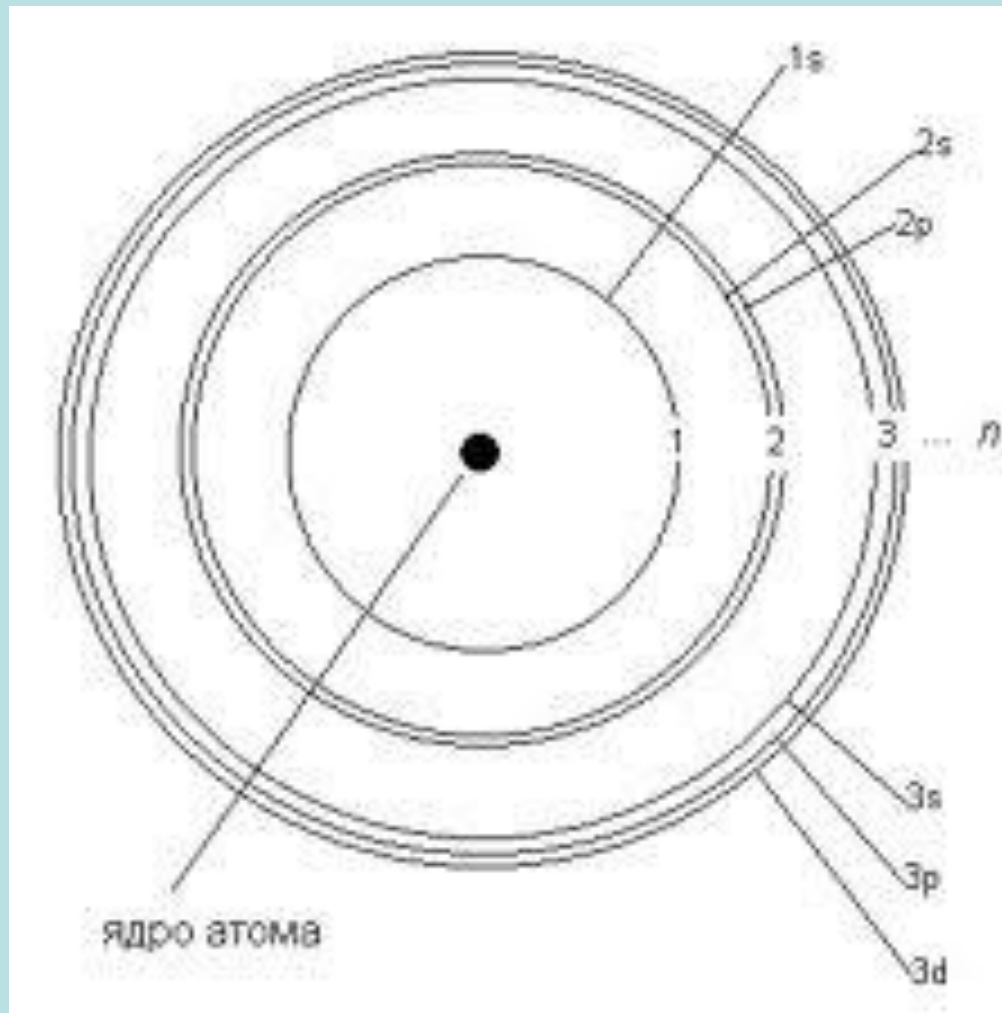


Квантові числа n і l характеризують розмір і форму електронної хмаринки, а квантове число m характеризує орієнтацію електронної хмаринки у просторі.



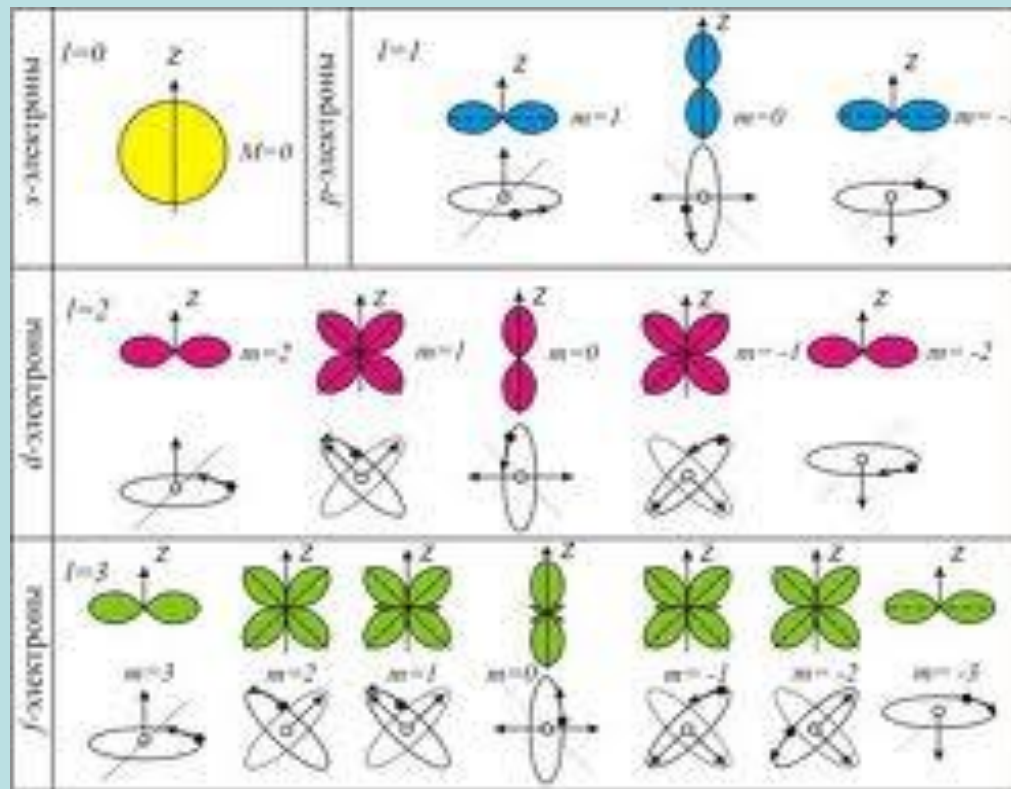
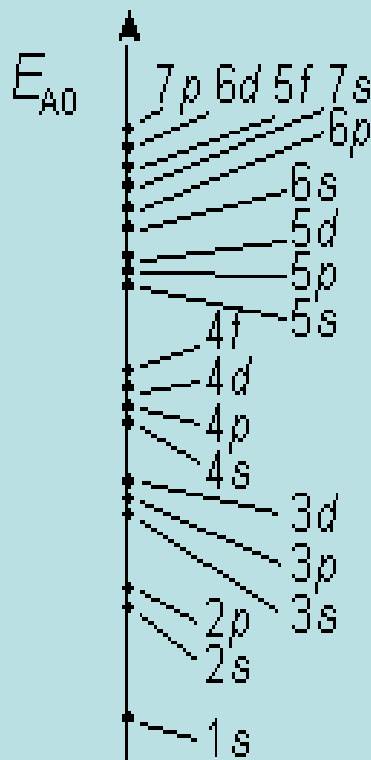
s-електрони	$l=0$  $M=0$	p-електрони	$l=1$  $m=1$ $m=0$ $m=-1$				
d-електрони	$l=2$  $m=2$	 $m=1$	 $m=0$	 $m=-1$	 $m=-2$		
f-електрони	$l=3$  $m=3$	 $m=2$	 $m=1$	 $m=0$	 $m=-1$	 $m=-2$	 $m=-3$

В оболонці електрони підрозділяються на підоболонки s, p, d, f, \dots . Якщо для електрона $l=0$, то його стан називають s -станом; $l=1$ – p -станом; $l=2$ – d -станом; $l=3$ – f -станом; $l=4$ – g -станом.



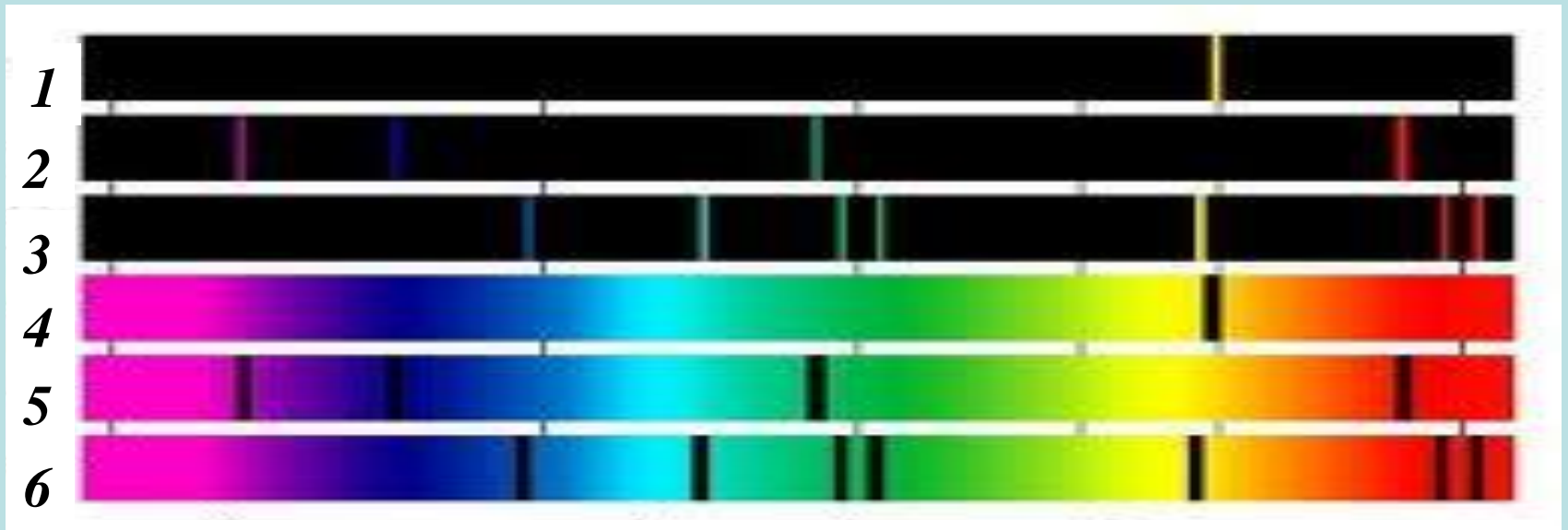
Для значень головного квантового числа $n=1, 2, 3, 4, 5, \dots$ відповідно можливі такі стани: $1s$; $2s2p$; $3s3p3d$; $4s4p4d4f$; $5s5p5d5f5g$; \dots

s -орбіталь має вигляд сфери,
 p -орбіталь – гантелі,
 d -орбіталь має складну форму,
 f -орбіталь – ще більш складну форму.



4. Спектр атома водню та воднеподібних атомів.

Експериментальне дослідження спектрів випромінювання розріджених газів (окремих атомів), показали, що кожному газу властивий певний лінійчатий спектр, який являє собою набір окремих спектральних ліній.



Спектри випромінювання: 1 – натрію, 2 – водню, 3 – гелію.

Спектри поглинання: 1 – натрію, 2 – водню, 3 – гелію.

Найбільш вивченим є спектр атома водню. Частоти хвиль ліній спектра атома водню обчислюють *узагальненою формулою Бальмера* :

$$\nu = R \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad n = 3, 4, 5, \dots,$$

де $R = 3,29 \cdot 10^{15} \text{ c}^{-1}$, R – стала Рідберга,

$$m = 1, 2, 3, 4, 5, 6,$$

$$n = m + 1, m + 2, m + 3, \dots$$

Довжини (частоти) хвиль ліній спектра атома водню у видимій області спектру називають серією Бальмера і обчислюють за формулами:

$$\frac{1}{\lambda} = R' \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad n = 3, 4, 5, \dots,$$

Або оскільки $\nu = \frac{c}{\lambda}$ то

$$\nu = R \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad n = 3, 4, 5, \dots,$$

де $R' = 1,097 \cdot 10^7 \text{ м}^{-1}$, $R = R'c = 3,29 \cdot 10^{15} \text{ с}^{-1}$ – сталі Рідберга.

Пізніше в ультрафіолетовій області була
винайдена :

$$\text{серія Лаймана: } \nu = R \left(\frac{1}{1^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad (n = 2, 3, 4, \dots)$$

В інфрачервоній області:

$$\text{серія Пашена: } \nu = R \left(\frac{1}{3^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad (n = 4, 5, 6, \dots)$$

$$\text{серія Брекета: } \nu = R \left(\frac{1}{4^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad (n = 5, 6, 7, \dots)$$

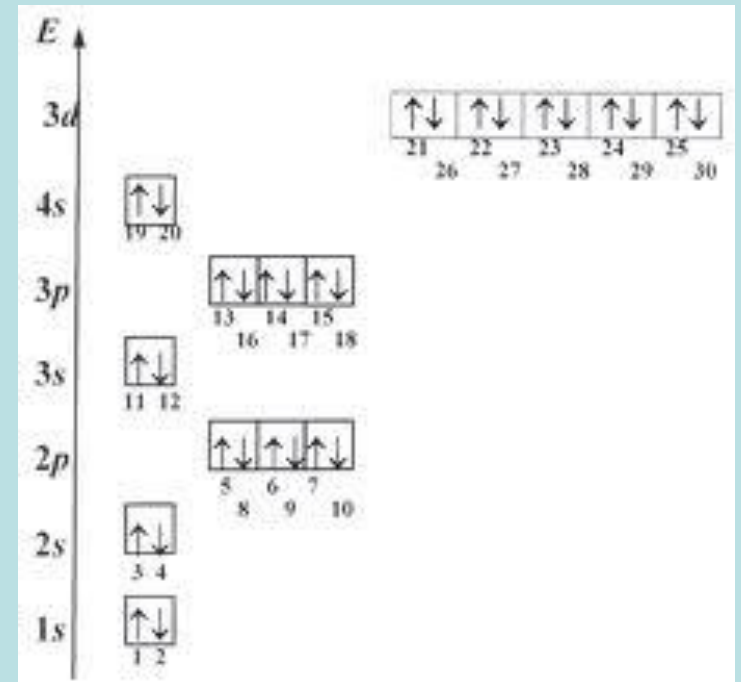
$$\text{серія Пфунда: } \nu = R \left(\frac{1}{5^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad (n = 6, 7, 8, \dots)$$

$$\text{серія Хемфрі: } \nu = R \left(\frac{1}{6^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad (n = 7, 8, 9, \dots)$$

5. Принцип Паулі.

Багатоелектронні атоми можна утворити заповнюванням енергетичних рівнів атома електронами. Ці заповнення підкоряються двом правилам, які сформулював Паулі:

- заповнення починаються з самих нижніх рівнів;
- на одному рівні не можуть знаходитись два електрона з однаковими квантовими числами.



6. Розподіл електронів в атомах за енергетичними станами

Повне число станів, що відповідає головному квантовому числу визначається формулою .

$$z = 2n^2$$

Сукупність електронів з однаковим числом n утворюють електронні оболонки

$n=1 \rightarrow$ К-оболонку,

$n=2 \rightarrow$ L-оболонку,

$n=3 \rightarrow$ М-оболонку,

$n=4 \rightarrow$ N-оболонку,

$n=5 \rightarrow$ O-оболонку.

В оболонці електрони підрозділяються на підоболонки s, p, d, f, \dots

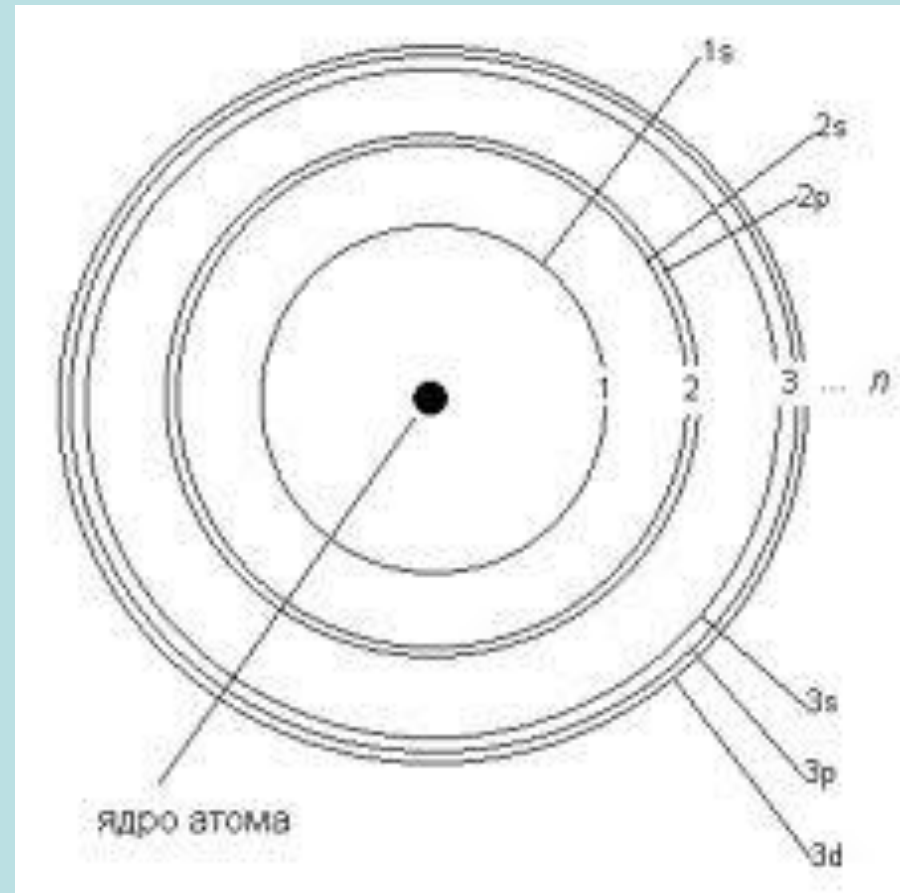
Якщо для електрона $l=0$, то його стан називають s -станом;

$l=1$ – p -станом;

$l=2$ – d -станом;

$l=3$ – f -станом;

$l=4$ – g -станом.



Для значень головного квантового числа

$$n=1, 2, 3, 4, 5, \dots$$

відповідно можливі такі стани:

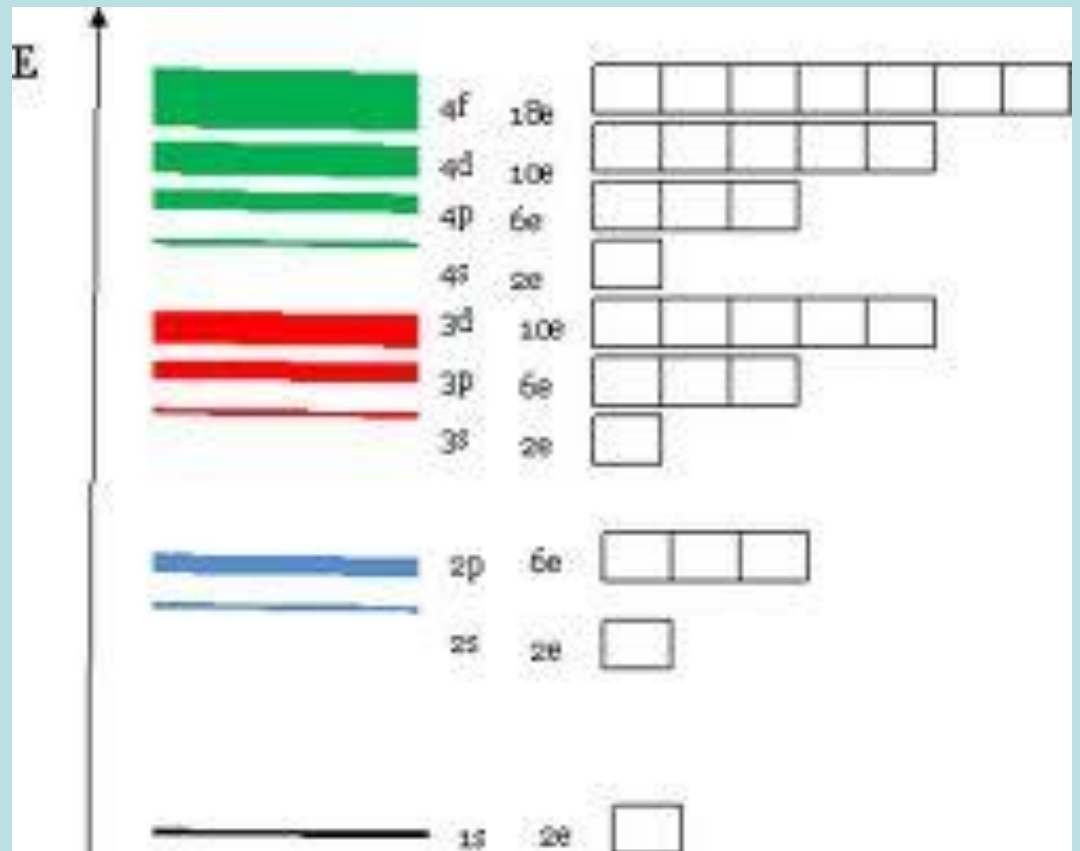
$$n=1 - 1s;$$

$$n=2 - 2s2p;$$

$$n=3 - 3s3p3d;$$

$$n=4 - 4s4p4d4f;$$

$$n=5 - 5s5p5d5f5g; \dots$$



7. Періодична система елементів

Періодична система елементів – класифікація хімічних елементів, розроблена на основі періодичного закону: властивості елементів перебувають у періодичній залежності від заряду їхніх атомних ядер.

Заряд ядра Z дорівнює атомному (порядковому) номеру елемента в системі. Елементи, розташовані за зростанням Z і утворюють 7 періодів.

Період – сукупність елементів, що починається лужним металом та закінчується благородним газом.

Вертикальні стовпці — *групи елементів* з подібними хімічними властивостями.

Періодичність властивостей елементів зумовлена періодичним повторенням конфігурації зовнішніх електронних оболонок атомів.

ПЕРИОДИЧЕСКАЯ СИСТЕМА ЭЛЕМЕНТОВ Д.И. МЕНДЕЛЕЕВА

ПЕРИОДЫ	Г Р У П П Ы								Э Л Е М Е Н Т О В							
	I	II		III	IV		V	VI	VII		VIII					
1	H 1 1,008								(H)						2 He 4,003	
2	Li 3 6,94	Be 4 9,01	5	B 6 10,81	C 7 12,01	N 8 14,01	O 9 16,0	F 10 19,0							10 Ne 20,18	
3	Na 11 22,99	Mg 12 24,3	13	Al 14 26,98	Si 15 28,09	P 16 30,97	S 17 32,06	Cl 18 35,45							18 Ar 39,95	
4	K 19 39,10	Ca 20 40,1	Sc 21 44,96	Ti 22 47,9	V 23 50,9	Cr 24 52,0	Mn 25 54,94	Fe 26 55,85	Co 27 58,93	Ni 28 58,71						
	29 Cu 63,55	30 Zn 65,4	31 Ga 69,7	32 Ge 72,59	33 As 74,92	34 Se 78,96	35 Br 79,9					36 Kr 83,80				
5	Rb 37 85,47	Sr 38 87,6	Y 39 88,9	Zr 40 91,2	Nb 41 92,9	Mo 42 95,94	Tc 43 (99)	Ru 44 101,1	Rh 45 102,9	Pd 46 106,4						
	47 Ag 107,9	48 Cd 112,4	49 In 114,8	50 Sn 118,7	51 Sb 121,75	52 Te 127,6	53 I 126,9					54 Xe 131,3				
6	Cs 55 132,9	Ba 56 137,3	* La 57 138,9	Hf 72 178,5	Ta 73 180,9	W 74 183,8	Re 75 186,2	Os 76 190,2	Ir 77 192,2	Pt 78 195,1						
	79 Au 196,9	80 Hg 200,6	81 Tl 204,4	82 Pb 207,2	83 Bi 208,9	84 Po (210)	85 At (210)					86 Rn (222)				
7	Fr 87 (223)	Ra 88 (226)	** Ac 89 (227)	Rf 104 (261)	Db 105 (262)	Sg 106 (263)	Bh 107 (264)	Hs 108 (265)	Mt 109 (266)							

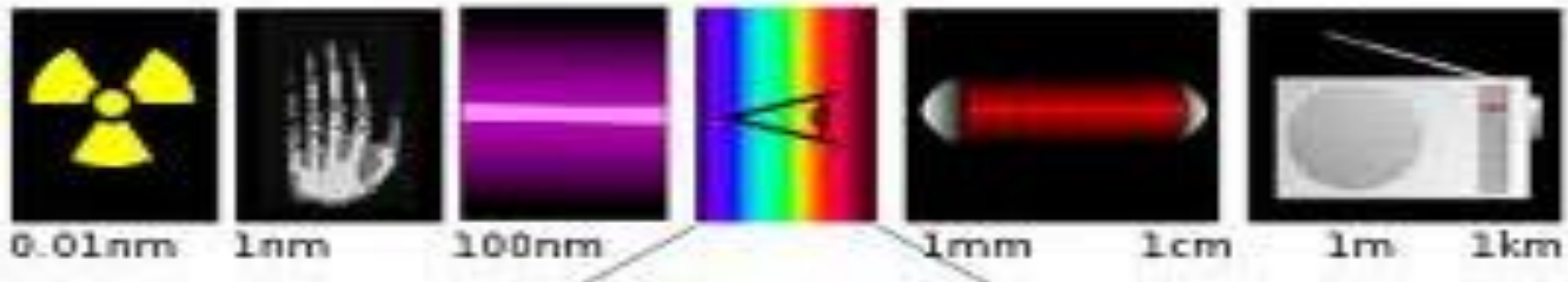
* ЛАНТАНОИДЫ

** АКТИНОИДЫ

58	59	60	61	62	63	64	65	66	67	68	69	70	71
Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu
90	91	92	93	94	95	96	97	98	99	100	101	102	103
Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr

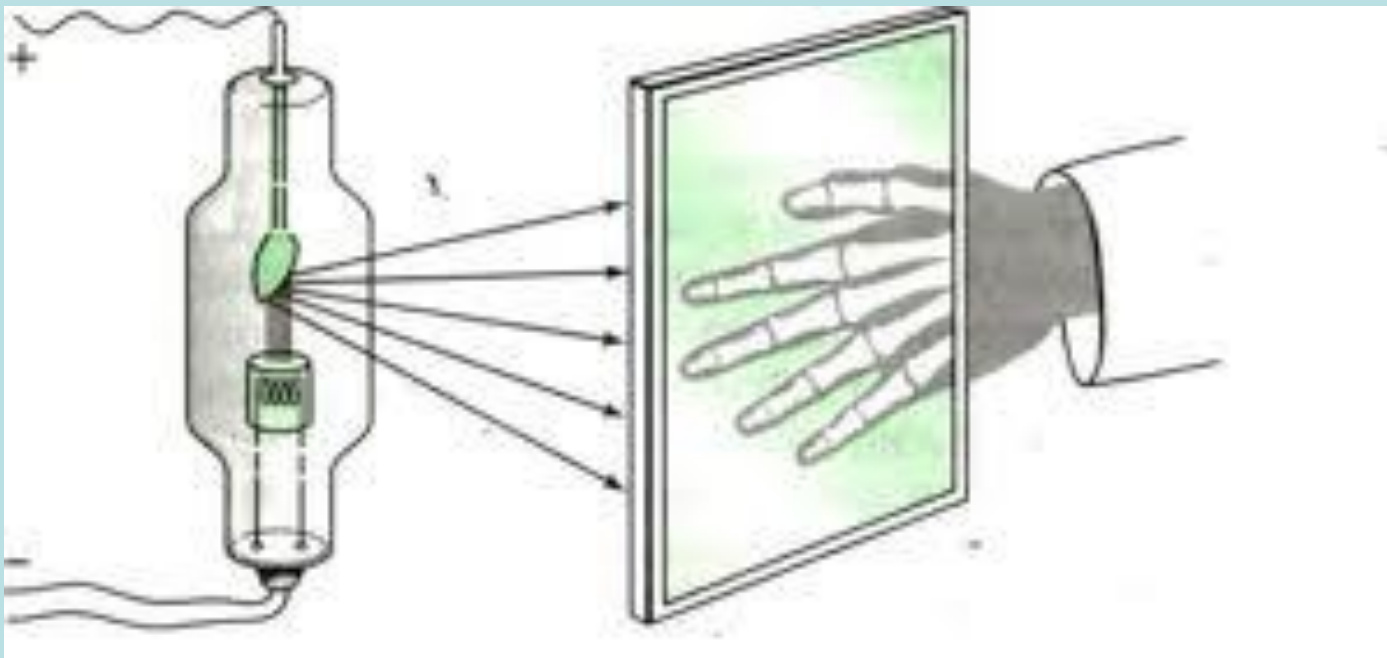
8. Рентгенівські спектри атомів.

Рентгенівське випромінювання, пулюївське випромінювання або *X-промені* – це короткохвильове електромагнітне випромінювання з довжиною хвилі від 10 нм до 0.01 нм . В електромагнітному спектрі діапазон частот рентгенівського випромінювання лежить між ультрафіолетом та гамма-променями.



Рентгенівське випромінювання виникає від різкого гальмування руху швидких електронів у речовині, при енергетичних переходах внутрішніх електронів атома.

Джерелом рентгенівського випромінювання є рентгенівські трубки, а також природні або штучні радіоактивні елементи, ряд небесних тіл.



Першовідкривачем випромінювання є *Іван Павлович Пулюй*.

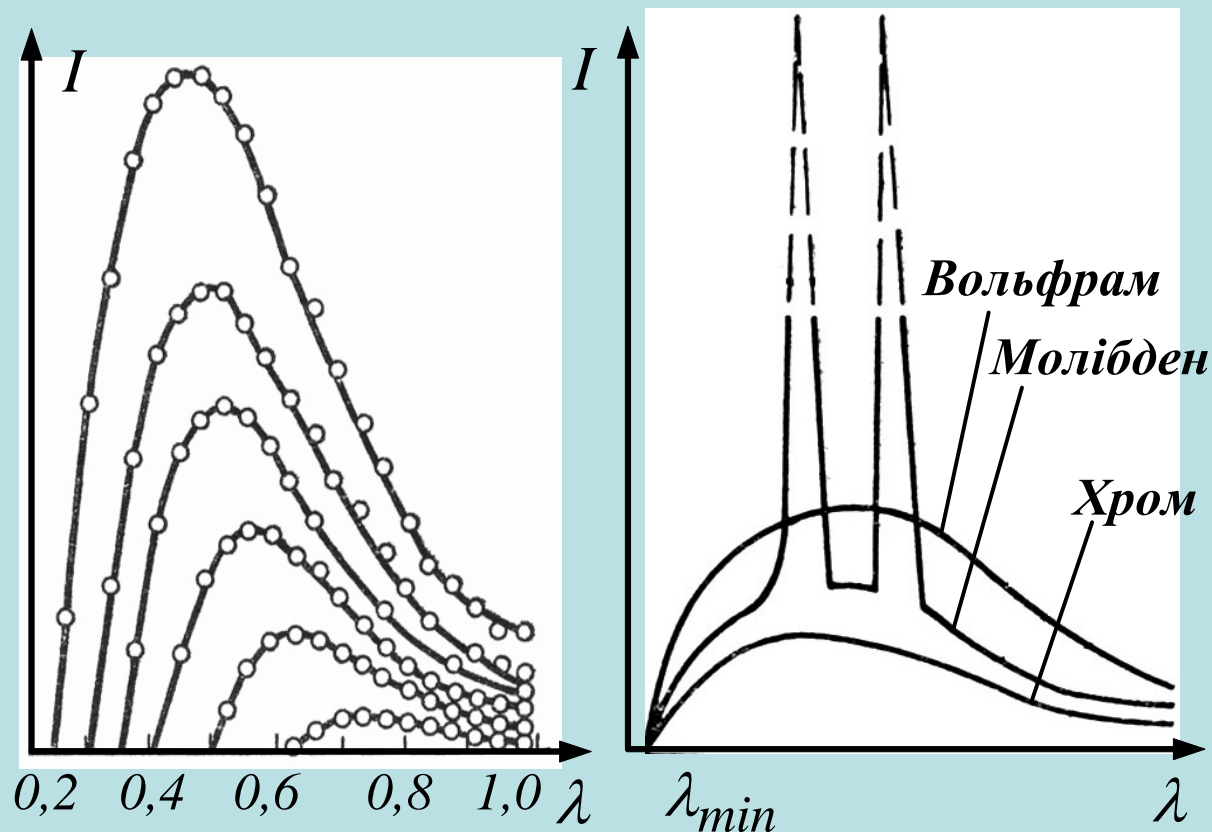
Його працями користався пізніше і Вільям Рентген, котрому було особисто Пулюєм презентовані свої праці. Рентген назвав ці промені невідомої природи X-променями.



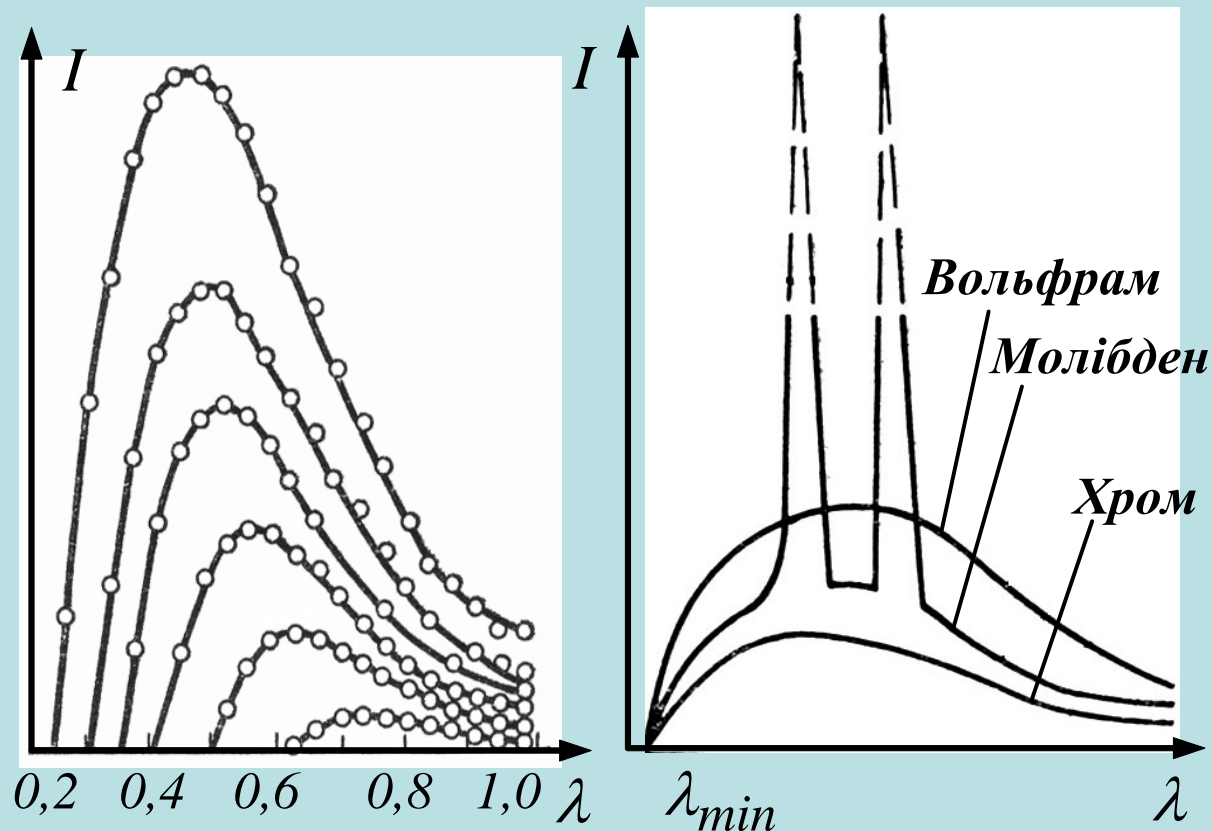
Один з перших (1895 р.) пулюєвих знімків. Рука доньки дослідника Наталі.

Рентгенівське випромінювання, яке виникає в результаті гальмування електронів, називають *гальмівним*.

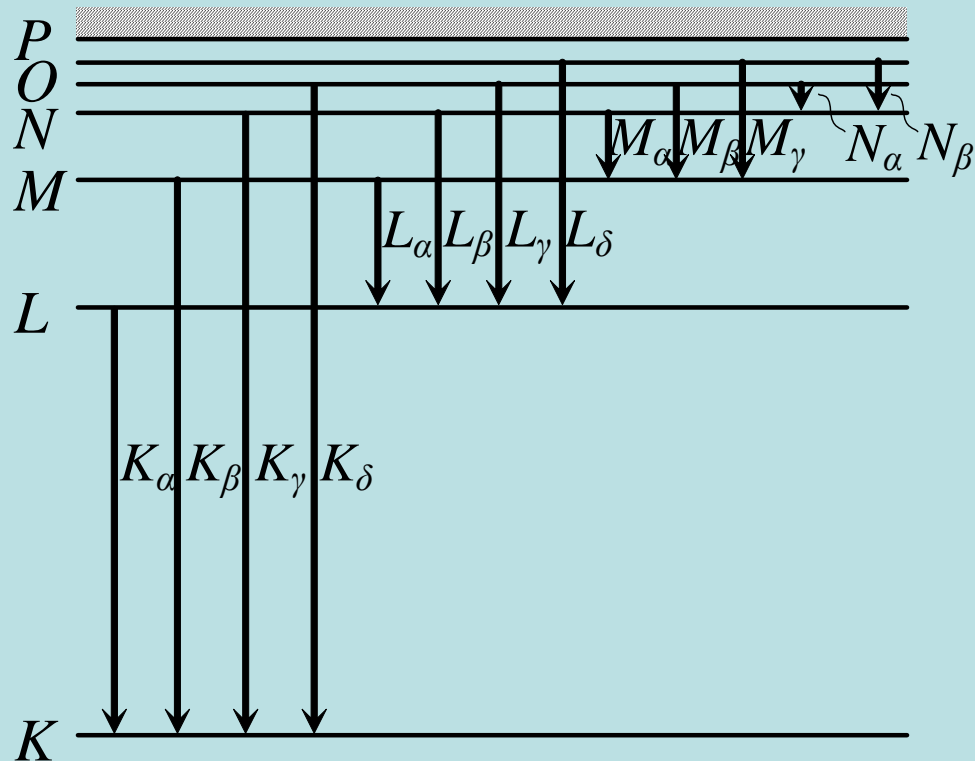
Гальмівне випромінювання має *суцільний спектр*.



Для напруги, при якій рентгенівська трубка з анодом вольфраму і хрому випромінює суцільний спектр, трубка з молібденовим анодом, крім суцільного, випромінює ще лінійчатий спектр.



Механізм виникнення лінійчатих спектрів:
якщо під впливом падаючих електронів високих енергій на атоми анода вибивається один із двох електронів $1s$ -стану K -оболонки, то звільнене місце може зайняти електрон з якої-небудь зовнішньої оболонки (L, M, N, \dots) і т.д.



У 1913 р. Г. Мозлі встановив залежність між хвильовим числом спектральної лінії ν_0 і атомним номером Z елемента, який випромінює ці частоти:

$$\nu_0 = R(Z - \sigma)^2 \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right),$$

де $m=1, n=2, 3, 4, \dots$ для ліній K -серії,
 $m=2, n=2, 3, 4, \dots$ для ліній L -серії,
 $m=3, n=2, 3, 4, \dots$ для ліній M -серії.
 σ – стала екранування.

Закон Мозлі дозволяє за виміряною довжиною хвилі рентгенівських ліній точно встановити атомний номер даного елемента. Цей закон відіграв велику роль при розміщенні елементів в періодичній системі. На основі цього закону вперше було показано, що не атомна маса, а атомний номер, який дорівнює заряду ядра, визначає хімічні властивості атомів.



Лекція № 14. БУДОВА АТОМА

1. Теорія Бора
2. Рівняння Шредінгера для атома водню;
3. Квантування енергії, механічного та магнітного моментів орбітального руху електрона. Спін електрона
4. Спектр атома водню та воднеподібних атомів
5. Принцип Паулі. Розподіл електронів в атомах за енергетичними станами
6. Періодична система елементів
7. Рентгенівські спектри атомів