

# Квантова теорія будови атомів. Закономірності у зміні властивостей елементів ПС по групам та періодам

## План

1. Історія розвитку уявлень про будову атома. Ядро атома. Протони, нейтрони
2. Квантова теорія будови атома
3. Квантові числа
4. Принцип Паулі. Правило Гунда. Правило Клечковського.
5. Періодична система елементів
6. Закономірності у зміні властивостей елементів ПС по групам та періодам

## Історія розвитку уявлень про будову атома. Ядро атома. Протони, нейтрони.

Весь навколишній світ складається із речовин. У природі речовини бувають прості та складні. Прості речовини складаються із однорідних атомів якого-небудь елемента.

**Атомом** називається найменша частка хімічного елемента, яка зберігає його властивості. Всі речовини складаються із атомів, але атом не є найменшою неподільною складовою частиною речовини, а складається із великої кількості більш дрібних, так званих елементарних частинок, які мають різну природу та властивості. Найбільш важливими із декількох сотен відомих елементарних частинок, які визначають властивість елемента, є **протони, нейтрони, електрони та позитрони**.

**Протони (p)** – це частинки, які мають масу, що дорівнює 1 (1 вуглецева одиниця (в.о.), та елементарний позитивний заряд величиною у  $4,8 \cdot 10^{-10}$  електростатичних одиниць.

**Нейтрони (n)** – частинки, що не мають заряду, мають масу, яка дорівнює 1 в.о.

**Електрони (e<sup>-</sup>)** – частинки, які мають нега-тивний електричний заряд, рівний за величиною заряду протона і масу, рівну 1/1840 частині маси протона ( $9,1 \cdot 10^{-28}$  г).

**Позитрони (e<sup>+</sup>)** – частинки, які мають позитивний заряд, рівний за величиною заряду електрона, і такої ж величини масу.

На початку XX століття англійський вчений Резерфорд розробив ядерну модель будови атома. Згідно з цією моделлю, атом складається із позитивно зарядженого ядра, в якому знаходяться протони, нейтрони та інші елементарні частинки, а навколо ядра обертаються негативно заряджені електрони. Позитивний заряд ядра визначається кількістю протонів у ядрі і дорівнює порядковому номеру елемента в періодичній системі Д.І. Менделєєва. Оскільки атом електронейтральна частинка, тоді він має таку ж саму кількість негативно заряджених частинок – електронів, як і протонів. Електрони безперервно обертаються навколо ядра по орбітах, які розташовані на енергетичних рівнях і підрівнях. Елементи відрізняються один від одного кількістю елементарних частинок, з яких складається атом. Електрони утворюють так звану електронну оболонку атома.

### **Квантова теорія будови атома**

В основі сучасної теорії будови атома лежать наступні основні положення:

- 1.** Електрон має двоїсту (корпускулярно хвильову) природу. Він може поводитися і як частка, і як хвиля: подібно частці, електрон має визначену масу і заряд; у той же час потік електронів, що рухається, виявляє хвильові властивості, наприклад характеризується здатністю до дифракції. Довжина хвилі електрона  $\lambda$ , і його швидкість зв'язані співвідношенням де Бройля:  $\lambda = h/mv$ , де  $m$  — маса електрона.
- 2.** Для електрона неможливо одночасно точно вимірити координату і швидкість. Чим точніше ми вимірюємо швидкість, тим більше невизначеність у координаті, і навпаки. Математичним вираженням принципу невизначеності служить співвідношення:  $\Delta x \cdot \Delta v = h / 2$ , де  $\Delta x$  — невизначеність положення координати,  $\Delta v$  — погрішність виміру швидкості
- 3.** Електрон в атомі не рухається по визначених траєкторіях, а може знаходитися в будь-якій частині біля ядерного простору, однак імовірність його перебування в різних частинах цього простору неоднакова. Простір навколо ядра, у якому імовірність перебування електрона досить велика, називають орбітальною.
- 4.** Ядра атомів складаються з протонів та нейтронів. Число протонів в ядрі рівне порядковому номеру елемента, а сума чисел протонів і нейтронів відповідає його масовому числу.

## Квантові числа

**Квантові числа** – це енергетичні параметри, що визначають стан електрона і тип атомної орбіталі, на якій він знаходиться. Квантові числа необхідні для опису стану кожного електрона в атомі. Згідно з квантово-механічною теорією, стан електрона в атомі характеризується значеннями чотирьох квантових чисел: **n** — **головного**, **l** — **орбітального**, **m** – **магнітного**, **s** – **спінового**.

- **Головне квантове число n** визначає загальну енергію електрона на даній орбіталі. Воно може приймати будь-які цілі значення, починаючи з одиниці ( $n = 1, 2, 3, \dots$ ). Під головним квантовим числом, рівним, мають на увазі, що електрону повідомлена енергія, достатня для його повного відділення від ядра (іонізація атома).

У межах визначених рівнів енергії електрони можуть відрізнитися своїми енергетичними підрівнями. Існування розходжень в енергетичному стані електронів, що належать до різних підрівнів даного енергетичного рівня, відбивається побічним (іноді його називають орбітальним) квантовим числом **l**. Це квантове число може приймати ціле числове значення від 0 до  $n - 1$ . Звичайно чисельні значення **l** прийняте позначати наступними буквеними символами:

Значення **l**: 0 1 2 3 4

Літерне позначення: s p d f g

У цьому випадку говорять про s-, p-, d-, f-, g-станах електронів, чи про s-, p-, d-, f-, g-орбіталах.

- **Побічне (орбітальне) квантове число l** характеризує різний енергетичний стан електронів на даному рівні, визначає форму електронної хмари, а також орбітальний момент **p** — момент імпульсу електрона при його обертанні навколо ядра.

Таким чином, електрон, володіючи властивостями частки і хвилі, з найбільшою імовірністю рухається навколо ядра, утворити електронну хмару, форма якого в s-, p-, d-, f-, g-станах різна.

Форма електронної хмари залежить від значення побічного квантового числа **l**. Так, якщо  $l = 0$  (s-орбіталь), та електронна хмара має сферичну форму (кулясту симетрію) і не має спрямованість у просторі. При  $l = 1$  (p-орбіталь) електронна

хмара має форму гантелі, тобто форму тіла обертання, отриманого з "вісімки".  
Форми електронних хмар d-, f- і g-електронів набагато складніше.

- Рух електричного заряду (електрона) в замкнутій орбіті викликає поява магнітного поля. Стан електрона, обумовлений орбітальним магнітним моментом електрона, характеризується третім квантовим числом — **магнітним**  $m_l$ . Це квантове число характеризує орієнтацію орбіталі в просторі, виражаючи проекцію орбітального моменту імпульсу на напрямок магнітного поля.

Відповідно орієнтації орбіталі щодо напрямку вектора напруженості зовнішнього магнітного поля магнітне квантове число  $m_l$  може приймати значення будь-яких цілих чисел, як позитивних, так і негативних, від -1 до +1, включаючи 0, тобто усього  $(2l + 1)$  значень.

Таким чином,  $m_l$  характеризує величину проекції вектора орбітального моменту кількості руху на виділений напрямок. Наприклад, p-орбіталь ("гантель") у магнітному полі може орієнтуватися в просторі в трьох різних положеннях, тому що у випадку  $l = 1$  магнітне квантове число може мати три значення: -1, 0, +1. Тому електронні хмари витягнуті по координатних осях x, y і z, причому вісь кожного з них перпендикулярна двом іншим.

Для повного пояснення усіх властивостей атома була висунута гіпотеза про наявність в електрона так названого спіна.

- **Спін** — це чисто квантова властивість електрона, що не має класичних аналогів. Спін — це власний момент імпульсу електрона, не зв'язаний з рухом у просторі. Для всіх електронів абсолютне значення спіна завжди дорівнює  $s = \frac{1}{2}$ . Проекція спіна на вісь z (магнітне спінове число  $m_s$ ) може мати лише два значення:  $m_s = +\frac{1}{2}$  чи  $m_s = -\frac{1}{2}$ .

Оскільки спін електрона  $s$  є величиною постійною, його звичайно не включають у набір квантових чисел, що характеризує рух електрона в атомі, і говорять про чотири квантові числа.

Тому при хімічних реакціях ядра реагуючих атомів залишаються без зміни (за винятком радіоактивних перетворень), те фізичні і хімічні властивості атомів залежать, насамперед, від будівлі електронних оболонок атомів.

Для складання електронних формул використовують три правила, за якими, згідно з сучасною теорією будови атома, утворюються електронні оболонки атомів.

### **Принцип Паулі. Правило Гунда. Правило Клечковського.**

Перше правило – принцип Паулі, який формулюється так: в атомі не може бути двох електронів з однаковими значеннями всіх чотирьох квантових чисел.

За цим принципом можна розрахувати максимальне число електронів на орбіталі, підрівні, рівні. Так, на s-орбіталі не може бути більш ніж 2, на p-орбіталі –6, на d-орбіталі –10 електронів. Звідси, максимальне число електронів, яке може бути на 1 енергетичному рівні –2, на другому енергетичному рівні –8, на третьому –18 і т.д.

Друге правило – правило найменшого запасу енергії (правило Клечковського): заповнення електронами енергетичних підрівнів відбувається зі зростанням їх енергії, яка характеризується сумою  $n + l$ . В багатоелектронних атомах заповнення електронами енергетичних рівнів і підрівнів відбувається залежно від їх енергії у такій послідовності:

$1s \rightarrow 2s \rightarrow 2p \rightarrow 3s \rightarrow 3p \rightarrow 4s \rightarrow 3d \rightarrow 4p \rightarrow 5s \rightarrow 4d \rightarrow 5p \rightarrow 6s \rightarrow 5d \rightarrow 4f \rightarrow 6p \rightarrow 7s \rightarrow 6d \rightarrow 5f \rightarrow 7p$ .

Третє правило – правило Гунда: сумарне спінове число електронів певного підрівня має бути максимальним.

Спочатку заповнюються орбіталі по одному електрону, а потім по другому. Два електрони з протилежними спінами на одній і тій же орбіталі утворюють двох електронну хмару (спарюються), називаються спареними і їх сумарний спін дорівнює нулю.

### **Періодична система елементів**

Формулювання Періодичного закону, яке було вперше введене Д. І. Менделєєвим: Фізичні й хімічні властивості елементів, що виявляються у властивостях простих і складних тіл, перебувають у періодичній залежності від їх атомної маси. Графічним зображенням Періодичного закону Д. І. Менделєєва є: Періодична система хімічних елементів.

**Періоди** — це горизонтальні ряди в таблиці Менделєєва. Періодів усього сім. Періоди поділяються на малі, що складаються з одного ряду (1—3 періоди), і

великі, що складаються з двох рядів (4—7 періоди). У періодах добре помітна періодичність зміни властивостей елементів, простих речовин, утворених цими елементами, та їх сполук. У періодах із зростанням порядкового номера елементів їх металічні властивості слабшають, а неметалічні посилюються.

**Група** — це вертикальний стовпчик у таблиці Менделєєва, у якому розміщені подібні за властивостями хімічні елементи. У коротко періодному варіанті Періодичної системи кожна група поділяється на підгрупи — головну (або А) і побічну (або Б). До складу головної підгрупи входять елементи великих і малих періодів, а до складу побічних підгруп — тільки великих періодів і лише метали. У групах у головних підгрупах виявляється подібність елементів (наприклад однакова вища валентність) та їхніх сполук (наприклад загальні формули вищих оксидів і водневих сполук). У групах із зростанням порядкового номера металічні властивості елементів посилюються, а неметалічні послаблюються.

Фізичний зміст Періодичного закону:

В атомах елементів із зростанням порядкового номера відбувається збільшення кількості протонів у ядрі й електронів, що обертаються навколо ядра. При цьому періодично повторюється будова зовнішнього енергетичного рівня. Оскільки властивості елементів багато в чому залежать від числа електронів на зовнішньому енергетичному рівні, то й вони періодично повторюються.

Сучасне формулювання Періодичного закону:

Властивості хімічних елементів, а також форми й властивості сполук елементів перебувають у періодичній залежності від заряду ядер їхніх атомів.

### **Закономірності у зміні властивостей елементів ПС по групам та періодам**

1. Фізичний зміст порядкового номера, номера періоду і номера групи. Порядковий номер дорівнює числу протонів і електронів, заряду ядра; номер періоду дорівнює числу заповнюваних електронних слоїв; номер А - групи дорівнює числу електронів на зовнішньому шарі (валентних електронів).
2. Горизонтальна періодичність.

У періоді зліва направо:  $\longrightarrow$

- Заряди атомних ядер збільшуються;
- Число електронів на зовнішньому електронному шарі збільшується;
- Число електронних слоїв не змінюється;

- Радіус атомів зменшується;
- ЕО збільшується;
- Ступінь окислення елемента у вищих оксидах збільшується з +1 до +7 (+8);
- Ступінь окислення елемента в гідридах (твердих солеподібних з'єднаннях металів з воднем) збільшується з +1 до +3, а потім в летючих водневих сполуках (ЛОМ) з -4 до -1.
- Металеві (відновні) властивості зменшуються, неметалеві (окислювальні) властивості збільшуються;
- Основні властивості сполук (основних оксидів, основ) зменшуються, змінюються амфотерні, кислотні властивості (кислотних оксидів, кисневих кислот) збільшуються;
- Кислотні властивості водневих з'єднань неметалів (ЛОМ) посилюються.

### 3. Вертикальна періодичність.



В А - групі зверху вниз:

- Заряди атомних ядер збільшуються;
- Число електронів на зовнішньому електронному шарі не змінюється;
- Число електронних слоїв збільшується;
- Радіус атомів збільшується;
- ЕО зменшується;
- Металеві (відновні) властивості збільшуються, неметалеві (окислювальні) властивості зменшуються;
- Основні властивості сполук (основних оксидів, основ) збільшуються, кислотні властивості сполук (кислотних оксидів, кисневих кислот) зменшуються;
- Кислотні властивості водневих з'єднань неметалів посилюються, основні властивості слабшають.