

Chemistry. Lectures

Шамсутдинов Максим

25 февраля 2024 г.

1 Что нас ждёт...

- Будут рубежки, по 15 баллов максимум
- За лабы максимум 40 баллов (7 лабораторных + 1 для пропускавших — по 5 баллов каждая (2 балла за проведение и 3 балла за отчёт))
- Дифференцированный зачёт — максимум 30 баллов
- 3 дополнительных балла (писать по поводу баллов нужно заранее)
- *Контрольных точек нет*

2 Строение атома

Было несколько концепций:

- Модель Бора
 - Электрон в атоме вращается по строго стационарным орбитам
 - При переходе между стационарными орбитами, происходит излучение или поглощение
 - При движении по орбите энергия не выделяется и не поглощается
- Корпускулярно-волновой дуализм (частицы обладают свойствами как частиц, так и волн)
- Принцип неопределённости Гейзенберга — если мы знаем импульс частицы, то мы не можем определить её положение и наоборот ($\Delta x \cdot \Delta p \geq \hbar/2$)

Химия начинается, когда происходит взаимодействие между электронами различных атомов. Перераспределение электронной плотности при взаимодействии частиц.

$\hat{H}\psi = E\psi$ — уравнение Шрёдингера для стационарного состояния

где \hat{H} — оператор Гамильтона, E — энергия, ψ — волновая функция электрона в атоме (ВФ) (не имеет физического смысла)

$\psi\psi^* = |\psi(\vec{r}_0, \tau_0)|^2$ — вероятность нахождения частицы

$$\int \psi\psi^* dr = 1$$

$$\langle \psi^* | \psi \rangle = 1$$

Энергия электрона в атоме водорода:

$$E = E_k + V(r) = \frac{p^2}{2m_e} - \frac{Ze^2}{r}$$

где p — импульс, m_e — масса электрона, Z — заряд ядра, e — заряд электрона, r — расстояние между электроном и ядром атома

Переписал оператор Лапласа в сферической системе координат и попытавшись решить получившееся выражение, ничего не получаем

s орбиталь	одна маленькая сфера
$2s$ орбиталь	два шара побольше и поменьше
...	...

Если записать как функции, зависящие от координаты и разделив переменные, Получаем Φ, Θ и R уравнения, которые легко разрешимы.

$$\Phi_m = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\phi}, \text{ где } m = \pm 1, \pm 2, \dots$$

Угловая часть волновой функции определяет ориентацию области пространства нахождения электрона. Радиальная часть определяет протяжённость этой области.

Область пространства, где вероятность обнаружить электрон наибольшая и которая однозначно определяется набором чисел n, l и m называется атомной орбиталью (АО).

n — главное квантовое число, принимает значения 1, 2, 3, ... — определяет положение АО, энергию электрона

l — орбитальное квантовое число 0, ..., $(n-1)$ — определяет форму АО

l	0	1	2	3
	s	p	d	f

m — магнитное квантовое число, принимает значение от $-l$ до $+l$ (включая ноль) — определяет ориентацию

Заполнение электронных подуровней

$n = 1$	1s
$n = 2$	2s 2p
$n = 3$	3s 3p 3d
$n = 4$	4s 4p 4d 4f
...	...

Уровень 5g не заполняется в реальности

Спин (s) — собственный момент количества движения электрона, принимает значения $\pm 1/2$

Все решения уравнения Шрёдингера для атома водорода представляют собой всевозможные ориентации n атомов водорода (количество равно количеству степеней свободы)

Радиальная часть волновой функции для электрона s типа ненулива. Так как вероятность нахождения электрона связана с квадратом радиальной части волновой функции, она тоже ненулевая. Вероятность обнаружить s электрон внутри орбитали ненулевая (верно и для $6s$)

$$\psi_{nlm}^2 = R_{nl}^2 V_{lm}^2 \pm f(r)$$

Количество узловых точек увеличивается, структура становится сложнее

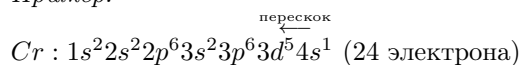
Принцип Пауле — в атоме нельзя обнаружить два электрона с одинаковым набором квантовых чисел.

Правило Хунда — заполнение электронами электронных оболочек в атоме идёт таким образом, чтобы суммарный спин атома был максимальный.

Правило Клечковского — электроны в атоме будут заполнять электронные подуровни по мере увеличения суммы $n + l$. При одинаковой сумме первым заполняется подуровень с меньшим значением n .

Эффект проскока электрона — бывает такое, что электрон переходит на следующий слой, оставив недозаполненным предыдущий (это связано с характеристикой устойчивости конфигурации — всегда электроны стремятся к более устойчивому состоянию)

Пример:



Проскок наблюдается у Cr, Cu, Ag, Au, Mo

3 Теория химической связи

Кайносимметричные электроны — электроны, которые появляются в атоме впервые (подобных в атоме ещё не было).

Пример: $2p$ — кайносимметричны, а $2s$ — нет

Вероятность обнаружить кайносимметричные $2p$ электроны ближе к ядру больше, чем вероятность обнаружить $2s$

Следствия:

1. Связь кайносимметричных электронов с ядром сильнее, чем некайносимметричных
2. Уменьшение размера атома кайносимметриков
3. Увеличение потенциала ионизации
4. Ослабление металлических свойств по сравнению с некайносимметриками

Слоевые аналоги — элементы- типовые аналоги, у которых нет внешних и предвнешних кайносимметричных электронов.

Периодический закон:

Свойства простых веществ, а также формы и свойства соединений элементов находятся в периодической зависимости от заряда ядер атомов элементов

Эффект инертной пары — $6s^2$ электроны держатся так крепко, что удалить их требует больших энергетических затрат, что приводит к нестабильности высших степеней окисления для Tl, Pb, Bi .