

УНИВЕРЗИТЕТ У КРАГУЈЕВЦУ
ФАКУЛТЕТ МЕДИЦИНСКИХ НАУКА



THE UNIVERSITY OF KRAGUJEVAC
FACULTY OF MEDICAL SCIENCES

СТРУКТУРА АТОМА

► **Далтонова хипотеза атома** - 1807. године

Постулат: атом је недељива и неуништива честица

Данас знамо да се материја састоји од преко **200 елементарних честица** - субатомских честица.

Интеракцијом елементарних честица настају атоми, а атоми различитих елемената се међусобно разликују бројем и врстом елементарних честица које их чине.

► **Thomson** - 1897. године - Први модел атома дао је Томсон, замишљајући га као компактну целину протона и електрона.

Томсон је утврдио да је електрон негативно наелектрисана честица наелектрисања 1.602×10^{-19} C, масе 9.10939×10^{-31} kg.

► **Raderford** – планетарни модел атома

► **Mozli** – одредио је наелектрисање језгра

Позитивна честица у језгру се назива **протон**. Број протона у језгру \equiv атомски број, **Z**.

Протон је честица **позитивног** наелектрисања

$1.602 \times 10^{-19} \text{ C}$, масе $1.67262 \times 10^{-27} \text{ kg}$.

► **Čedvik** – 1932. године

Открио трећу субатомску честицу **неутрон**.



Маса неутрона је $1.67495 \times 10^{-27} \text{ kg}$.

Сваки елемент описан је атомским симболом (E), атомским (Z) и масеним (A) бројем.

► Nils Bor - 1913. године

Да би објаснио линијски карактер емисионог спектра водоника, чији атом је целина која садржи само један протон и електрон, Нилс Бор (Niels Bohr), дански физичар, је применио Планкову (Planck) квантну теорију и Ајнштајнову (Einstein) теорију фотоелектричног ефекта. Он је дао свој модел атома у облику три постулата:

Први Боров постулат

Било који атом постоји у одредјеним стањима у којима не емитује енергију.

Ова стања назвао је ***стационарним стањима***. Електрон у атому се креће по тачно одредјеним путањама, које се зову ***допуштеним путањама*** или ***орбитама*** а да при том кретању не емитује енергију. Допуштена путања са најмањом енергијом одговара ***основном стању атома***.

Други Боров постулат

Атом апсорбује или емитује енергију само при преласку електрона са једне на другу допуштену путању.

То значи да при прелазу електрона са путање ниже енергије E_1 у допуштену путању више енергије E_2 , атом мора **апсорбовати** енергију једнаку разлици енергија ове две допуштене путање:

$$E_2 - E_1 = h \cdot \nu$$

Пошто се електрон *kratko* задржи на допуштеној путањи E_2 враћа се на допуштену путању E_1 , али при томе **емитује** енергију исте фреквенце ν коју је и апсорбовао.

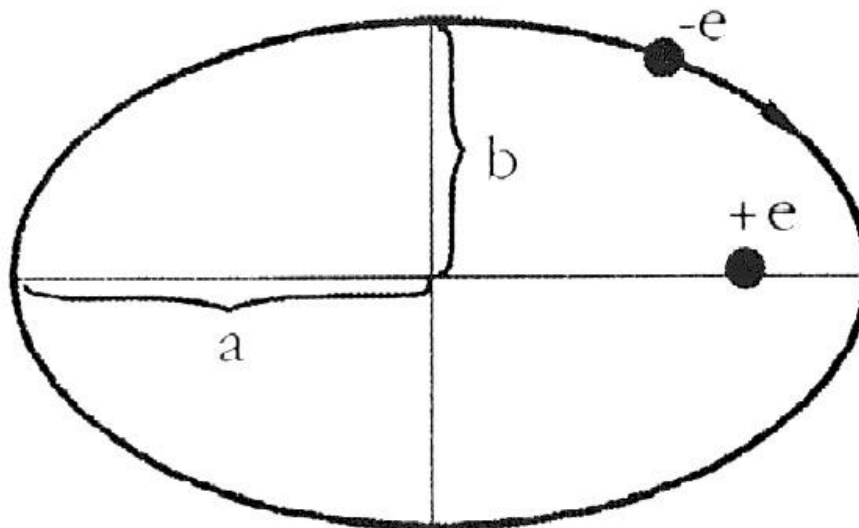
$$E = h \nu = E_{\text{више}} - E_{\text{ниже}}$$

Трећи Боров постулат

Електрон може прећи у било коју енергетски ниво (орбиту).

► **Somerfeld** - 1915. године

Проширио Борову теорију о структури атома, претпоставком да се електрони могу кретати око језгра, не само по **кружним**, као што то тврди Бор, већ и по **елиптичним путањама**, као планете око Сунца. У том случају путања електрона је одредјена великом (a), малом (b) полуосом елипсе.

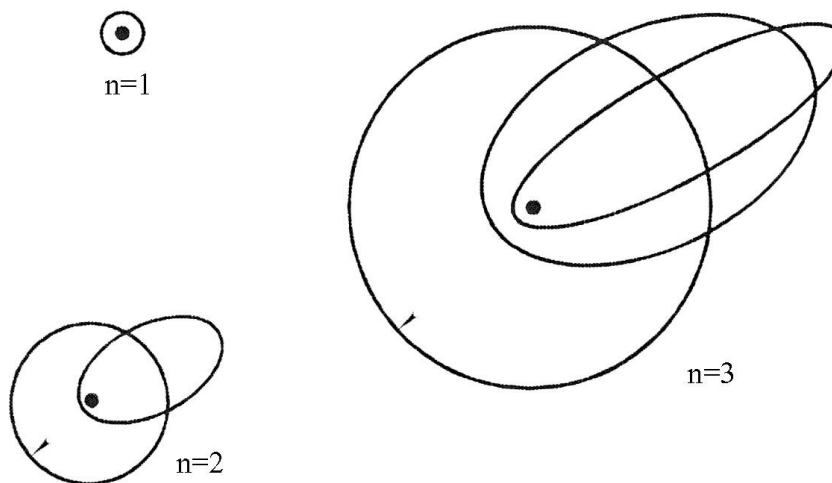


► **Somerfeld** - 1915. године

Zomerfeld је показао да велика полуоса елипсе a зависи од главног квантног броја n , а да је мала полуоса b одредјена односом:

$$a/b = n/k$$

где је k *споредни или азимутски* квантни број који има целобројне вредности од 1 до n .



Путање у оквиру **главног енергетског нивоа** називамо **енергетским поднивоима**.

ТАЛАСНО-МЕХАНИЧКИ МОДЕЛ АТОМА

КВАНТНА МЕХАНИКА - или *нови* поглед на свет

Основна начела квантне механике која су важна за хемију су:

- *дуалистичка природа материје и зрачења*
- *начело неодређености*
- *квантизација одређених својстава (енергије, простора, ...)*
- *Паулијево начело.*

Хипотеза Де Броља (1924.) – дуалистичко понашање малих честица

Честица масе m и брзине v ($< 300000 \text{ km/s}$) има **својство таласа** таласне дужине λ :

$$\lambda = \frac{h}{m \times v} = \frac{h}{p}$$

p је количина (момент) кретања честице, h је Планкова константа ($6.6208 \times 10^{-34} \text{ J.s}$).

Комбиновањем de Broglieove једначине с Bohrovom дефиницијом орбите електрона даје:

$$2r\pi = n\lambda \quad \Rightarrow \quad \lambda = \frac{2r\pi}{n}$$



$$mvr = n \frac{h}{2\pi}$$

Таласни концепт даје објашњење Bohrovog постулата о квантном броју n !

Хајзенбергов принцип неодређености (1927.) –

Није могуће истовремено одредити точан положај и момент кретања (а тиме и брзину) честице.

$$\Delta x \times \Delta p_x \geq \frac{1}{2} \hbar \quad \Rightarrow \quad \Delta q \times \Delta v \geq \frac{\hbar}{2m}^{**} \quad \hbar (= h/2\pi)$$

Шредингер (1926.) - је дао таласно-механичку једначину

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\Psi}{\partial y^2}+\frac{\partial^2\Psi}{\partial z^2}\right)+V(x,y,z)\Psi=E\Psi$$

$$\hat{H}\Psi = E\Psi$$

H : Хамилтониан оператор

Ψ : Таласна функција

E : Енергија

Решење таласне једначине даје таласну функцију $\Psi(\mathbf{r})$,

$$\Psi = f(\mathbf{r}, t)$$

Таласна функција је окарактерисана са три квантна броја и назива се атомска орбитала.

КВАНТНИ БРОЈЕВИ

Симбол	Назив	Вредност	Улога
n	Главни квантни број	1, 2, 3, ...	Одређује енергију енергетског нивоа по коме се електрон може кретати
l	Орбитални квантни број	0, 1, 2, ..., n-1	Дефинише енергију поднивоа у оквиру истог енергетског нивоа (иста вредност главног квантног броја n)
m_l	Магнетни квантни број	-1, 0, +1	Одређује вредност магнетног момента поља које је последица кретања електрона
m_s	Спински квантни број	$\pm 1/2$	Одређује ангуларни (магнетни) моменат електрона условљен кретањем електрона око сопствене осе

<i>l</i>	0	1	2	3	4	5
орбитале	<i>s</i>	<i>p</i>	<i>d</i>	<i>f</i>	<i>g</i>	...

***n* = 1** један подниво $l = 0$, *s* – подниво

***n* = 2** два поднивоа $l = 0$ и $l = 1$, односно *s* и *p* – поднивоје

***n* = 3** три поднивоа $l = 0$, $l = 1$ и $l = 2$, односно *s*, *p* и *d* – поднивоје

***l* = 2** пет орбитала у оквиру *d* поднивоа $m_l = 2, 1, 0, -1, -2$

ЗАДАТАК

- (a) За $n = 4$, које су могуће вредности за l ? (b) За $l = 2$ које су могуће вредности m_l ? О којим орбиталама је реч за вредности l под (a)?
- (c) Које су могуће вредности за l и m_l када је $n = 3$; $n = 5$?

ОРБИТАЛЕ

s-орбитале

$$l = 0$$

Растојање од нуклеуса је исто у свим правцима па простор који заузима електрон има сферну симетрију.

р-орбитале

$l = 1$ $m_l = -1, 0, +1$ па од другог нивоа ($n \geq 2$), постоје по три р-орбитале, исте по енергији, величини и облику

Разликују се по правцу у коме су усмерене у простору, три осе, x, y, z , стоје под углом од 90° једна према другој.

d и f-орбитале

d-орбитале

$$l = 2 \quad m_l = -2, -1, 0, +1, +2,$$

има их укупно пет

f-орбитале

$$l = 3 \quad m_l = -3, -2, -1, 0, +1, +2, +3$$

има их укупно седам

ЕЛЕКТРОНСКЕ КОНФИГУРАЦИЈЕ АТОМА

При изградњи електронског омотача важе три принципа:

1. Принцип минимума енергије

Прво се образују орбитале ниже, а затим орбитале више енергије.

2. Паулијев принцип искључења

У једном атому не могу постојати два електрона која би имала сва четири квантна броја иста.

3. Хундово правило

Формирање дегенерованих орбитала се врши тако да је у орбиталама што више неспарених електрона паралелних спинова.

Енергија јонизације

Енергија јонизације (I) представља минимум енергије потребан да се дода атому у гасној фази да би се од њега одвојио један електрон на бесконачну удаљеност :



Прва енергија јонизације (I_1) представља енергију јонизације атома при удаљавању првог, најслабије везаног електрона, **друга (I_2)** представља јонизацију добивеног катјона итд. Јонизациона енергија се изражава у **електронволтима (eV)** ($1\text{eV} = 96,49 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$).

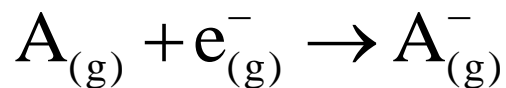
Прва енергија јонизације расте са порастом редног броја у периоди из истих разлога због којих величина атома опада.

АФИНИТЕТ ПРЕМА ЕЛЕКТРОНУ, E_a

Афинитет према електрону – је енергија која се ослобађа или апсорбује

када неутрални атом у гасовитом стању прими електрон

- изражава се у eV или kJ/mol



Електронегативност атома

Расподела електронске густине у молекулу између два атома најчешће се разматра преко релативне тенденције сваког атома да привуче заједничке електроне, односно електронски пар (или парове ако између атома има више ковалентних веза) из ковалентне везе.

Електронегативност (χ) се најчешће дефинише као снага неког атома да привуче заједнички електронски пар у ковалентној вези.

Електронегативност је први увео Лајнус Полинг (Linus Pauling) на бази енергије молекула и дао скалу *коефицијената релативне електронегативности*.

Хемијске везе.

Теорије хемијских веза.

Хемијске везе, Lewis-ова теорија и октетно правило

Прости молекули су мале дискретне групе атома у којима је сваки атом повезан са одређеним бројем других атома везама које називамо *хемијским везама*.

Везе између атома имају одређене карактеристичне особине као што су, пре свега, дужина и јачина.

Било која теорија о структури молекула мора бити способна да објасни шта је то што одређује колико веза неки атом може формирати, зашто су локалне особине везе приближно исте упркос променама у осталим деловима молекула као и карактеристичне облике молекула у простору.

- Елементи се једине у једињења преко електрона у спољашњим орбиталама, односно орбиталама највишег енергетског нивоа због чега овај ниво, односно слој, називамо *валентни ниво или слој*, а електроне у тим орбиталама *валентним електронима*.
- Основни услов за грађење једињења између два или више елемената, је да то једињење буде енергетски стабилнији систем, односно ниже енергије од полазних елемената.
- При грађењу једињења елементи међусобно размењују своје валентне електроне при чему, у већини случајева, сви елементи постижу електронску конфигурацију најближег племенитог гаса, тј. електронску конфигурацију са осам електрона у последњем, енергетски највишем нивоу $ns^2 np^6$ (где је n главни квантни број енергетски највишег нивоа елемента).

Размена валентних електрона може се вршити тако да:

- настану јони (позитивни и негативни) који се међусобно повезују привлачним електростатичким силама, што називамо **јонском везом**, или
- награде један или више заједничких електронских парова, што називамо **ковалентном везом**.

МЕЂУАТОМСКЕ хемијске везе

1. Јонска

2. Ковалентна

а) неполарна

б) поларна

ц) координативна

3. Метална веза

Јонска веза

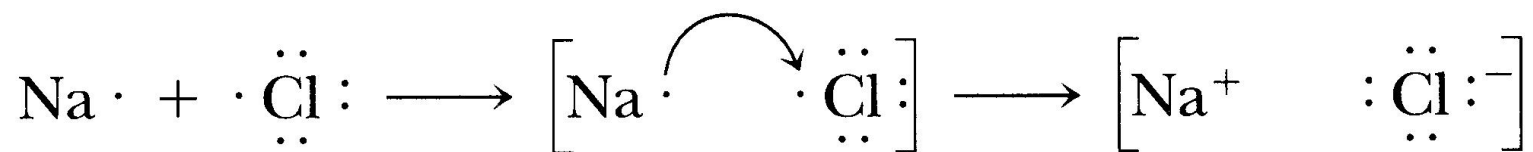
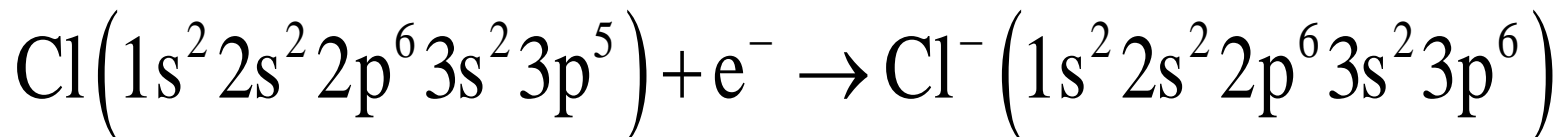
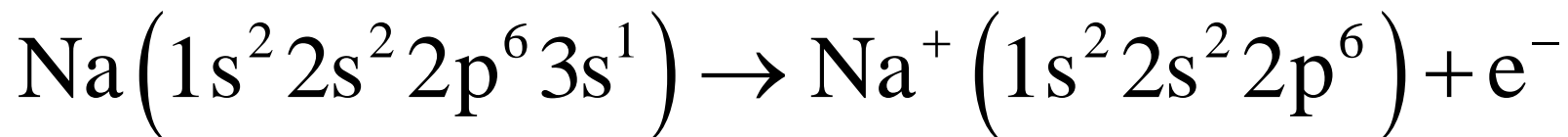
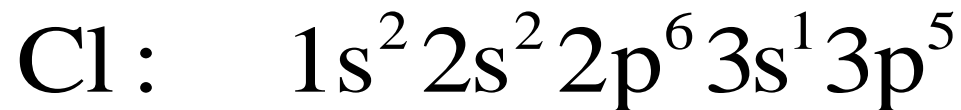
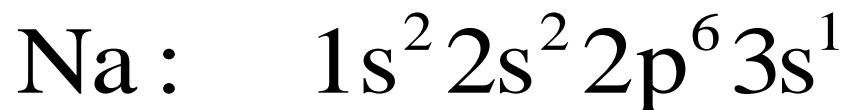
Јонска (електровалентна) веза настаје:

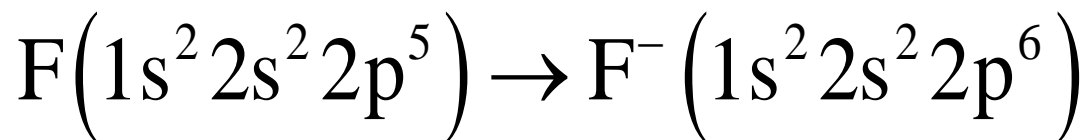
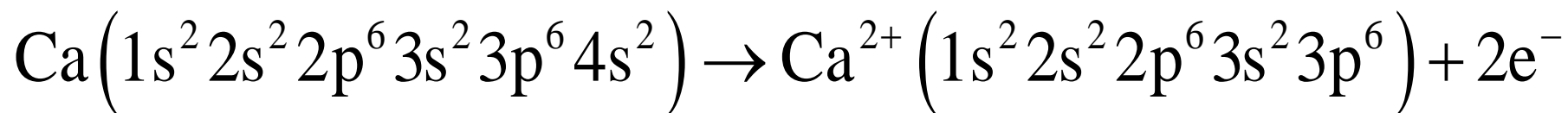
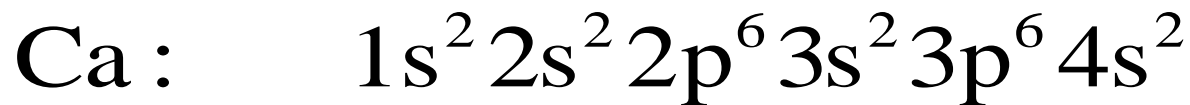
Елемент – метал

- ниску енергије јонизације
- лако се оксидишу
- катјони

Елемент – неметал

- велику електронегативност
- лако се редукују
- анјони





Познавајући групу Периодног система може се тачно предвидети број електрона који атом отпушта или прима - и у којој форми елемент постоји

Стабилни јони репрезентативних елемената појединих група

<i>I група</i>	<i>II група</i>	<i>III група</i>	<i>V група</i>	<i>VI група</i>	<i>VII група</i>
Li⁺	Be²⁺	Al³⁺	N³⁻	O²⁻	F⁻
Na⁺	Mg²⁺		P³⁻	S²⁻	Cl⁻
K⁺	Ca²⁺			Se²⁻	Br⁻
Rb⁺	Sr²⁺			Te²⁻	I⁻
Cs⁺	Ba²⁺				

Код прелазних метала је то теже предвидети, зато што они често формирају више од једног јона.

Стабилни јони прелазних метала

<i>Метал</i>	<i>Јон</i>
Кадмијум	Cd^{2+}
Хром	Cr^{2+} , Cr^{3+}
Кобалт	Co^{2+} , Co^{3+}
Бакар	Cu^{+} , Cu^{2+}
Гвожђе	Fe^{2+} , Fe^{3+}

Енергија кристалне решетке

Енергија која се ослобађа при настајању једног мола кристала на константној температури, од појединачних јона у гасовитом стању, назива се енергија кристалне решетке - E_c .

Зависи од наелектрисања јона и њиховог међусобног растојања

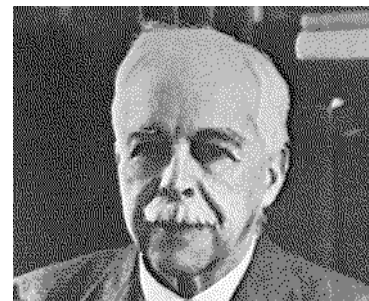
$$E_l = k \frac{Q_1 Q_2}{d}$$

k је константа ($8.99 \times 10^9 \text{ J}\cdot\text{m}/\text{C}^2$), Q_1 и Q_2 су наелектрисања јона, и d је растојање између јона.

Луисова теорија ковалентне везе

G.N.Lewis

1875-1946.



Ковалентна веза – заједнички електронски пар

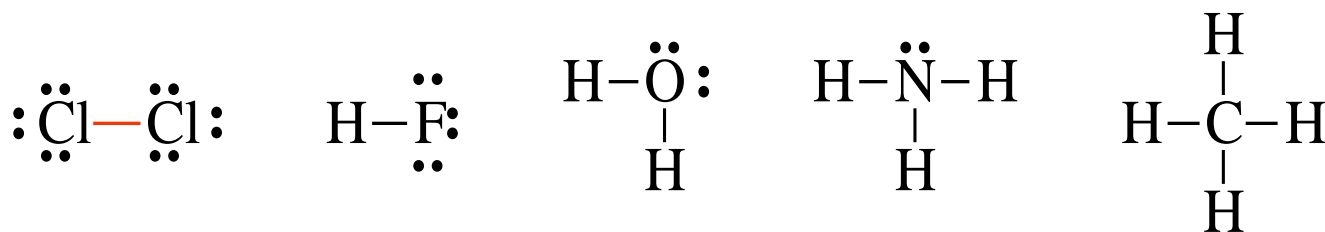
- **Ковалентна веза** - настаје стварањем једног или више заједничких електронских парова између атома, чиме они постижу електронску конфигурацију племенитог гаса.

Може бити:

- ковалентно-неполарна
- ковалентно-поларна
- ковалентно-координативна

Октетно правило - Луисове структуре

Октетно правило - Сваки атом у периодном систему тежи да у валентном слоју има осам електрона, односно да има електронску конфигурацију најближег племенитог гаса.



У многим случајевима при писању Луисових структура молекула треба појединим атомима у молекулу означити **формално наелектрисање (F.N.)**.

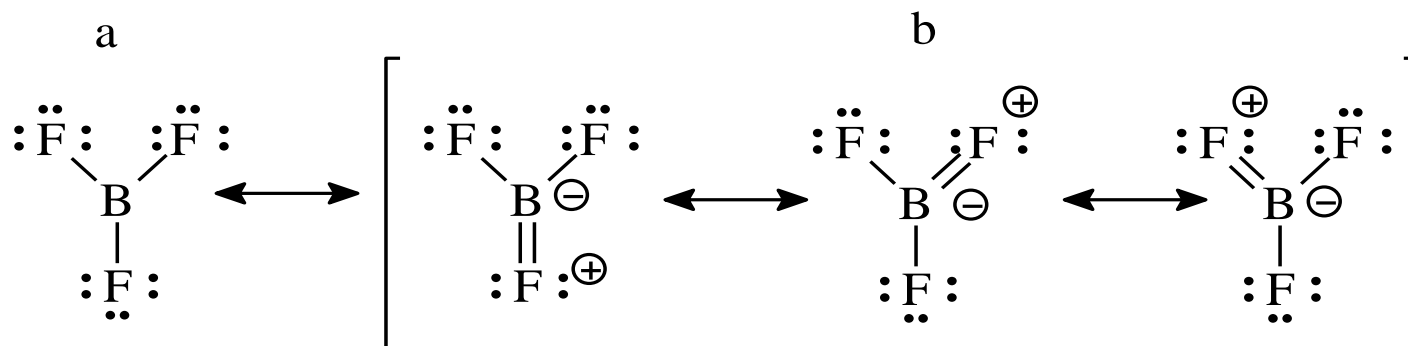
$$\text{F.N.} = (\text{BVE}) - (\text{BSE}) - 1/2 \text{ VE}$$

BVE – број валентних електрона

BSE – број слободних електрона

VE – везани електрони

BF₃ молекул се може представити следећим структурама:



Структура *a* има највећи удео у укупној енергији молекула, јер има најмање формалног наелектрисања, због чега се сматра да су у BF₃ молекулу све три B–F везе просте.

Ковалентна и јонска једињења:

- ковалентна $\Delta(\text{EN}) < 1,$
- јонска $\Delta(\text{EN}) > 1,8$