

КазНУ им аль-Фараби
Кафедра общей и неорганической химии

Строение атома. Электрон: электронные конфигурации, орбитальное приближение, эффективный заряд ядра

2 лекция

PhD Кеңес Қ.М.

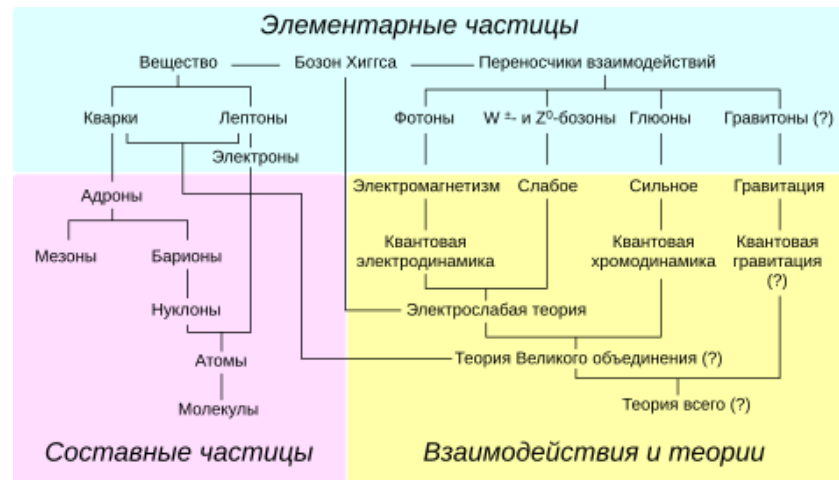
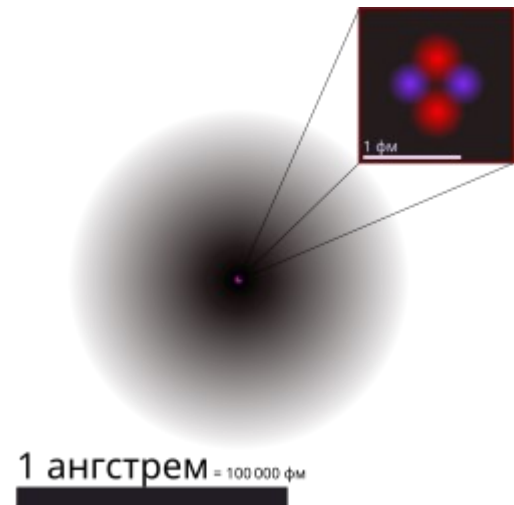


Строение атома: история моделей

Атом — наименьшая частица вещества, неделимая химическим путем. В XX веке было выяснено сложное строение атома.

Толчком к подробному изучению строения атома послужили:

- открытие рентгеновского излучения (1895 г., В.К. Рентген);
- открытие радиоактивности и новых радиоактивных элементов (1896 г., А. Беккерель, М. и П. Кюри);
- открытие электрона (1896 г., Дж. Дж. Томсон).



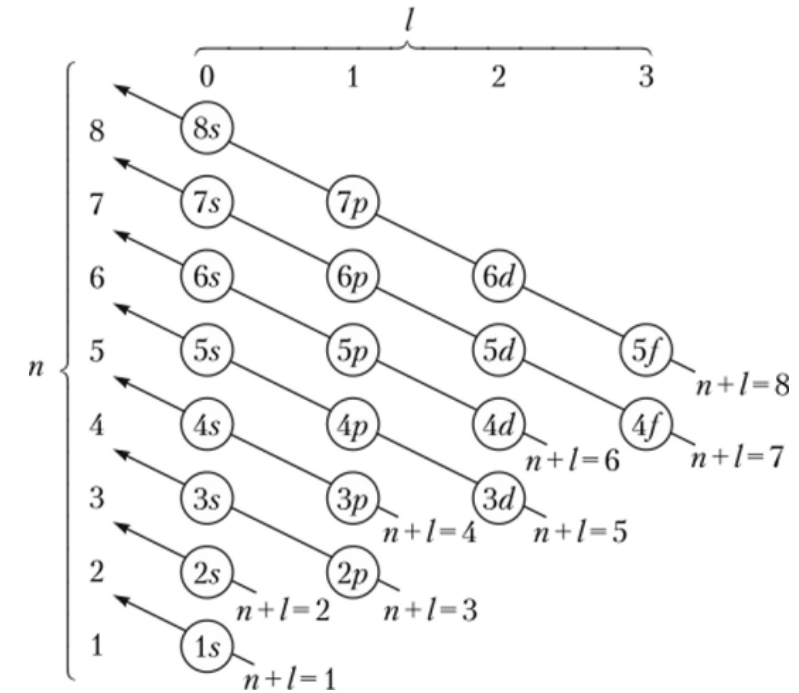
МОДЕЛЬ «СЛИВОВЫЙ ПУДИНГ» Дж. Дж. Томсон (1903г.) 	ЯДЕРНАЯ МОДЕЛЬ Э. Резерфорд (1911г.)
ПЛАНЕТАРНАЯ МОДЕЛЬ Э. Резерфорд – Н. Бор (1913г.) 	ВОЛНОВАЯ МОДЕЛЬ Эл. де Бройль (1924г.)
КВАНТОВО–МЕХАНИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ Э. Шредингер (1926г.) 	ОРБИТАЛЬНАЯ МОДЕЛЬ Г. Уайт (1931г.)
КОЛЬЦЕГРАННАЯ МОДЕЛЬ К. Снелсон (1963г.) 	ВОЛНОГРАННАЯ МОДЕЛЬ

Электронные конфигурации атомов

Электронная конфигурация — формула расположения электронов по различным электронным оболочкам атома химического элемента или молекулы.

Электронная конфигурация обычно записывается для атомов в их основном состоянии. Для определения электронной конфигурации элемента существуют следующие правила:

- **Принцип заполнения.** Согласно принципу заполнения, электроны в основном состоянии атома заполняют орбитали в последовательности повышения орбитальных энергетических уровней. Низшие по энергии орбитали всегда заполняются первыми.
- **Принцип запрета Паули.** Согласно этому принципу, никакие два электрона в одном атоме не могут иметь одинаковые значения четырех квантовых чисел.
- **Правило Хунда.** Согласно этому правилу, заполнение орбиталей одной подоболочки начинается одиночными электронами с параллельными (одинаковыми по знаку) спинами, и лишь после того, как одиночные электроны займут все орбитали, может происходить окончательное заполнение орбиталей парами электронов с противоположными спинами.

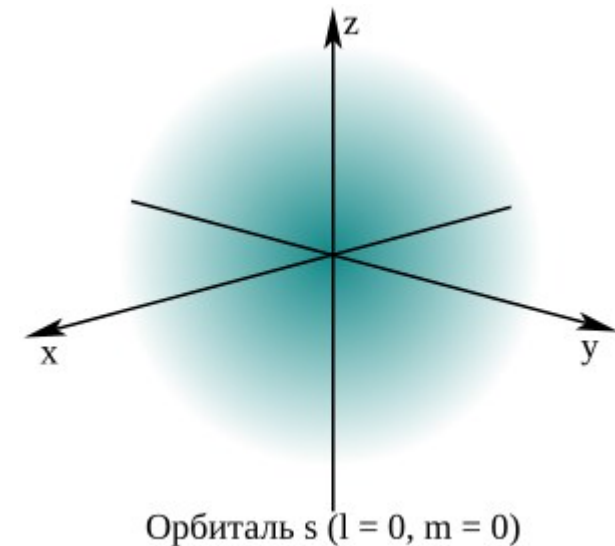


Атомная орбиталь

Атомная орбиталь – одно из многих возможных состояний электрона в атоме.

Молекулярная орбиталь – одно из многих возможных состояний электрона в молекуле.

Поведение электрона и других микрочастиц изучает квантовая или волновая механика. В квантовой механике поведение электрона описывается довольно сложным уравнением, которое называется **волновым уравнением** или **уравнением Шрёдингера** (по имени Эрвина Шрёдингера – австрийского физика, предложившего это уравнение в 1926 году). Точное решение уравнения Шрёдингера возможно только для системы из двух частиц, например, для атома водорода. Для более сложных атомов уравнение решается приближенно с использованием ЭВМ. Решая уравнение Шрёдингера, можно найти возможные состояния электрона в атоме (атомные орбитали, АО).



Вероятностная картина местоположения единственного электрона в атоме на s-орбитали.

Орбитальное приближение

Концепция орбитального приближения:

Электроны описываются волновыми функциями (орбиталями) вместо точных траекторий. Орбитали определяются квантовыми числами, которые описывают состояние электрона в атоме.

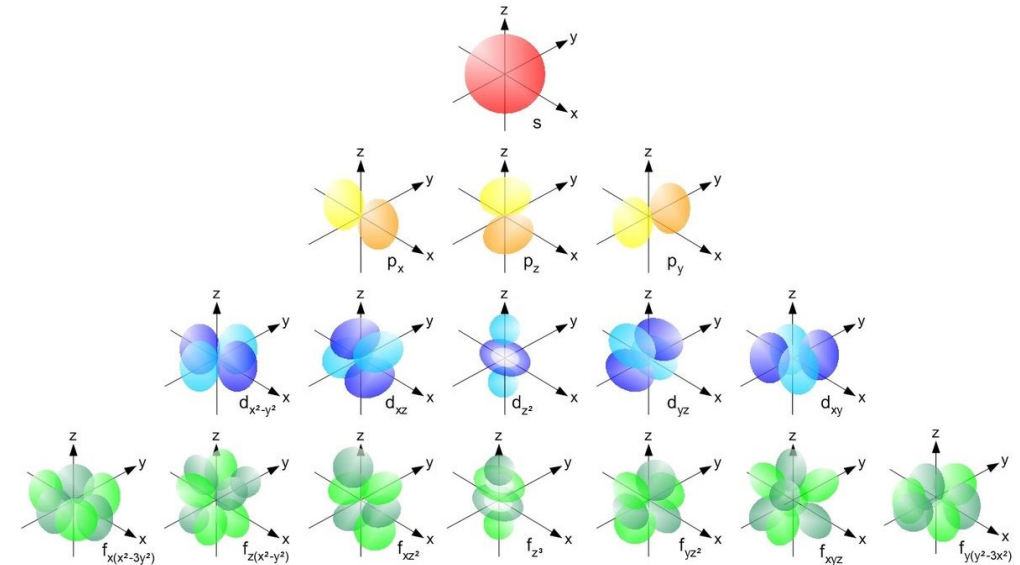
Квантовые числа:

Главное квантовое число (n): Определяет энергию и размер орбитали.

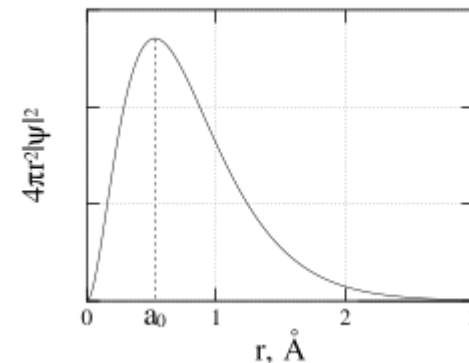
Орбитальное квантовое число (l): Определяет форму орбитали (s , p , d , f).

Магнитное квантовое число (m_l): Определяет ориентацию орбитали в пространстве.

Спиновое квантовое число (m_s): Определяет направление спина электрона ($\pm\frac{1}{2}$).



Вещественные комбинации угловых функций.



Атомная орбиталь — та же, что на рисунке выше, в виде волновой функции (точнее, построена не ψ , а $4\pi r^2 |\psi(r)|^2$). В этом простом случае зависимости от углов θ и φ нет.

Квантовые числа

Набор атомных орбиталей определяется ограничениями, наложенными на значения квантовых чисел.

Главное квантовое число (n) может принимать любые целочисленные положительные значения:

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

Орбитальное квантовое число (l) может принимать любые целочисленные значения от нуля до $n - 1$:

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

Магнитное квантовое число (m) может принимать любые целочисленные значения от $-l$ до $+l$, включая ноль:

$m = -l, \dots, -1, 0, +1, \dots, +l$.

n	l	m	Число АО	Обозначение АО
1	0	0	Одна	1s
	1	-1, 0, 1	Три	2p
2	0	0	Одна	3s
	1	-1, 0, 1	Три	3p
	2	-2, -1, 0, 1, 2	Пять	3d
3	0	0	Одна	4s
	1	-1, 0, 1	Три	4p
	2	-2, -1, 0, 1, 2	Пять	4d
	3	-3, -2, -1, 0, 1, 2, 3	Семь	4f

Энергия атомных орбиталей

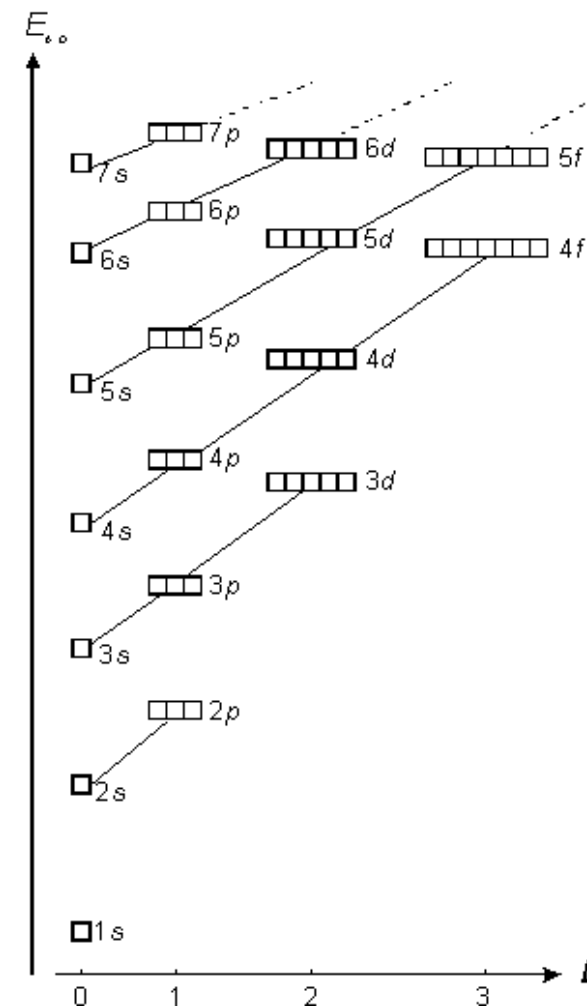
Энергия АО – энергия электрона, находящегося на этой орбитали (то есть в этом состоянии).

Квантовая ячейка – символическое изображение орбитали на энергетической диаграмме.

Электронный уровень – совокупность орбиталей с одинаковыми значениями главного квантового числа.

Электронный подуровень – совокупность орбиталей одного уровня с одинаковыми значениями орбитального квантового числа.

Энергия АО ($E_{АО}$) может быть как рассчитана из уравнения Шрёдингера, так и определена экспериментально, что давно уже сделано для атомов практически всех элементов. Но при изучении химии эти точные абсолютные значения используются редко. Обычно бывает достаточно знать, энергия какой орбитали больше, а какой меньше, а также, сильно или слабо различаются по энергии соседние орбитали.



Электронные облака

Из-за особенностей поведения электрона, нам, жителям макромира, представить себе характер такого движения невозможно. Это связано с тем, что в макромире, в соответствии с представлениями современной физики, для него просто нет никаких аналогий. Однако положение не безнадежно – мы можем воспользоваться моделью поведения электрона в атоме, в которой используется представление об электронном облаке (ЭО).

Электронное облако – область пространства, в каждой из точек которой может находиться данный электрон.

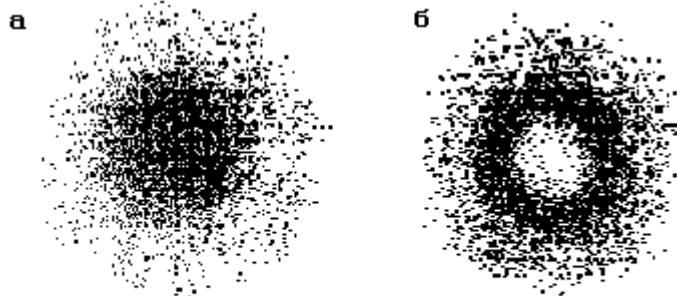


Рис 6.6. Электронное облако как набор моментальных "фотографий" электрона:
а - вид со стороны; б - вид в сечении

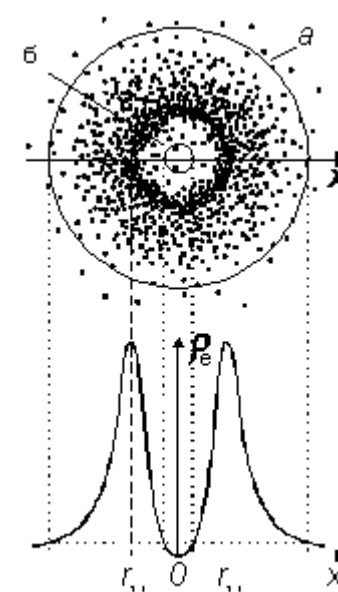


Рис 6.7. Строение 1s - ЭО

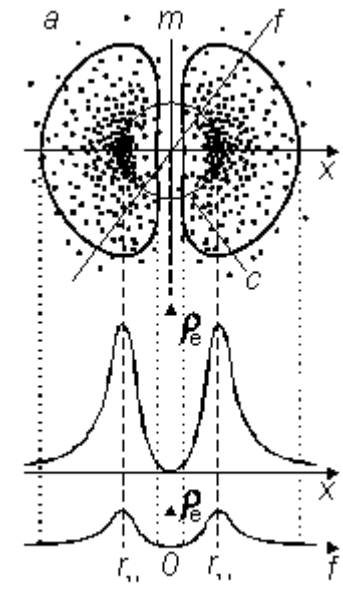


Рис 6.8. Строение 2p - ЭО

Формы облака

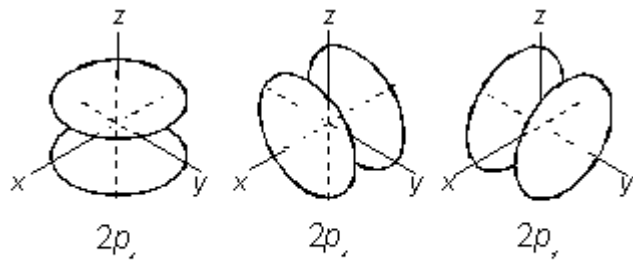


Рис 6.9. Граничные поверхности $2p$ -электронных облаков

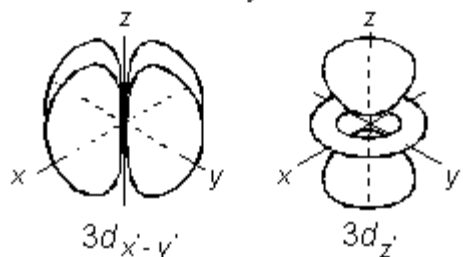
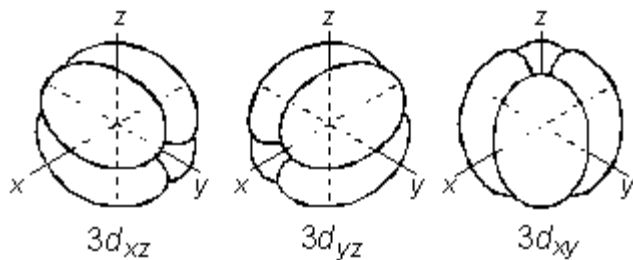


Рис 6.11. Граничные поверхности $3d$ -электронных облаков

Радиус электронного облака – радиус сферы, на которой по любому направлению от ядра электронная плотность этого облака максимальна.

Граничная поверхность электронного облака – поверхность, в любой точке которой вероятность нахождения электрона одинакова, а внутри которой общая вероятность нахождения электрона достаточно велика.

Электронный слой – совокупность электронных облаков, близких по размеру.

Основное состояние атома – состояние атома с наименьшей энергией.

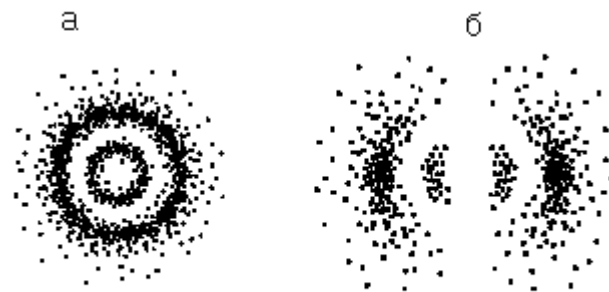


Рис 6.10. Сечения электронных облаков: а – $2s$ -ЭО; б – $3p$ -ЭО (показаны без соблюдения масштаба).