

Атомдардың электрондық
конфигурациясы. Паули принципі,
Хунд ережесі, минималды энергия
принципі, Клечковский ережесі

3 дәріс

Электрондық құрылым

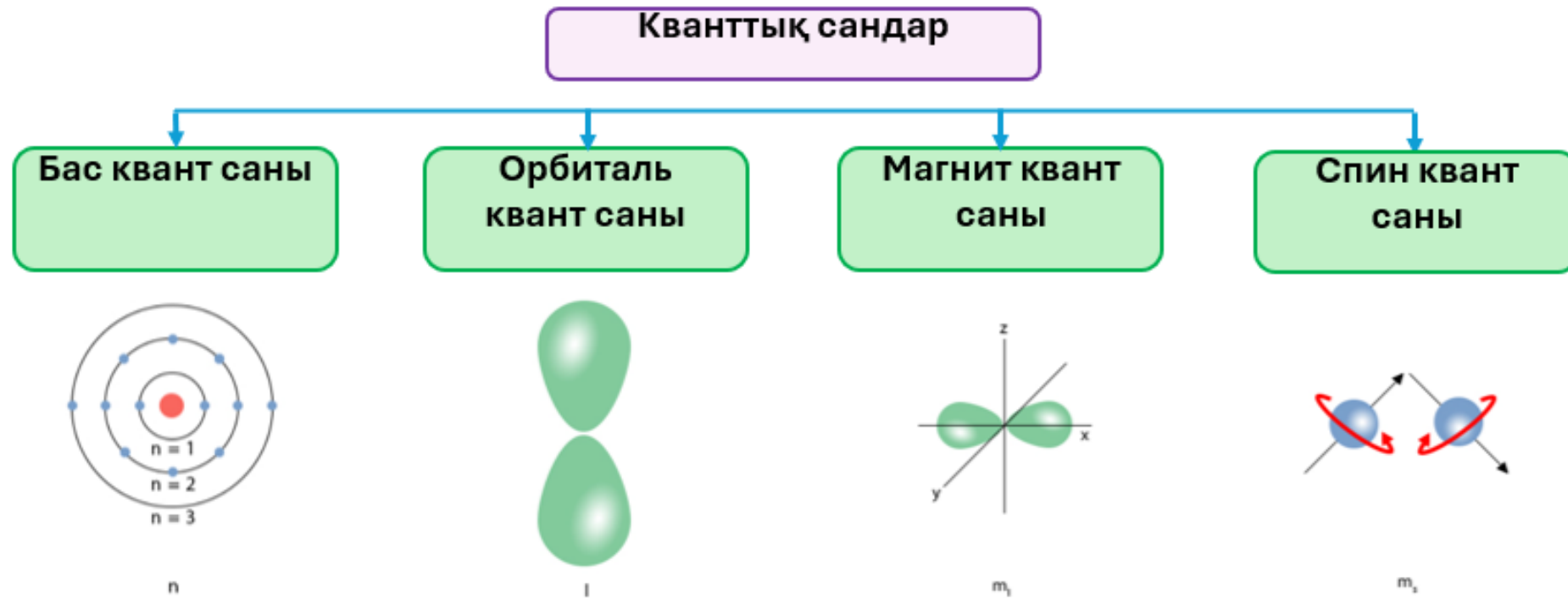
Шредингер теңдеуінің шешімдері (түбірлері) n , l , m_l тұрақтыларын қамтиды, олар **кванттық сандар** деп аталады. Бұл кванттық сандар толқындық функцияның $\Psi(x,y,z)$ дискретті сипаттамалары болып табылады, және электрон болуы мүмкін ядро айналасындағы күш өрісін сипаттайды, яғни оның энергетикалық деңгейлерін, қосымша деңгейлерін және атомдық орбиталдарын анықтайды.

Атомдағы электронның кез келген тұрақты күйі төрт кванттық санның нақты мәндерімен сипатталады: **n** (негізгі кванттық сан), **l** (орбитальдық кванттық сан), **m_l** (магниттік кванттық сан), және **m_s** (спиндік кванттық сан).

Әрбір **атомдық орбиталь**, яғни электронның ең ықтимал кванттық күйі, өзінің сәйкес **кванттық сандар жиынтығымен** сипатталады.

Кванттық сандар

Кванттық механикада **квант сандары** дегеніміз қандай да бір субатомды бөлшектің (кванттық айнymалының сандық сипаттамасы. Бізге 4 кванттық сан белгілі.

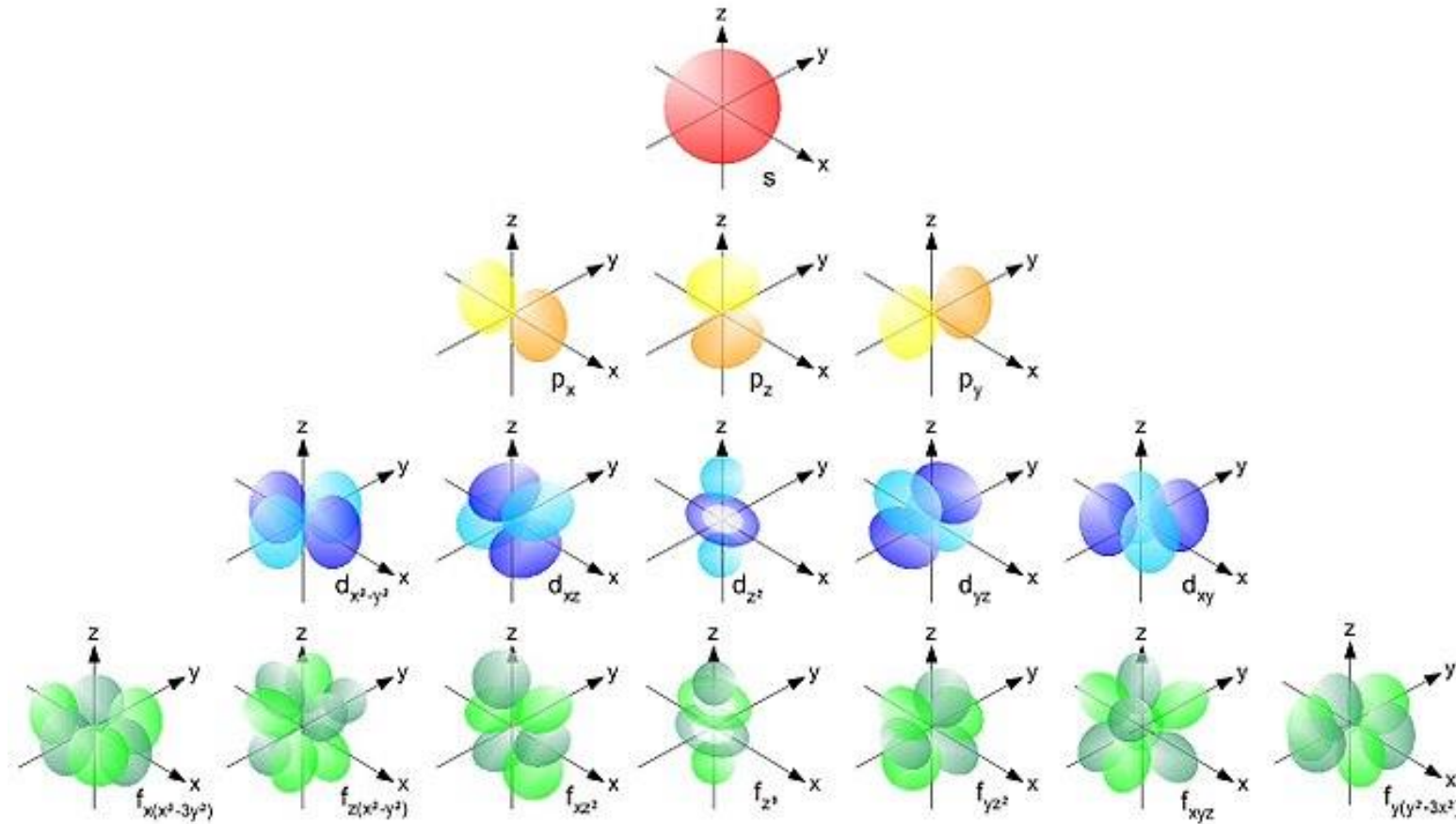


Бас квант саны, орбиталь квант саны және магнит квант санының нақты мәндері, яғни белгілі форма, энергия және кеңістіктегі орналасуы белгілі «электрондық бұлтты» **электронды атомдық орбиталь** деп атаймыз.

Кванттық сандар

	Бас квант саны	Орбиталь квант саны	Магнит квант саны	Спин квант саны
Белгіленуі	n	ℓ	m_ℓ	m_s
Мәндері	1,2,3...7... ∞	0 ден бастап (n-1)	- ℓ , 0, + ℓ	$\pm 1/2$
Физикалық мәні	<p><i>Сипаттайды:</i></p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Энергетикалық деңгейдегі электронның энергиясының мөлшерін 2. Электрондық бұлттың өлшемін (яғни, атом радиусы) 3. Химиялық элементтер кестесіндегі период номерімен сәйкес келеді 	<p><i>Сипаттайды:</i></p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Энегетикалық топшадағы (подуровень) электронның энергиясының мөлшерін 2. Электрондық бұлттың (орбитальдың) пішінін: s - орбиталь- сфера; p - орбиталь- гантель формады және т.б. 	<p>Сыртқы магниттің өріске не электр өрісіне қатысты атомдық орбитальдың кеңістіктегі орналасуын сипаттайды. Мысалы s орбитальда магнит квант саны 0-ге тең, ол деген шар формасы қай жағынан қарасаңда әркез бірдей орналасады. Ал p-орбиталь үшін -1,0,1. Бұл «гантельдің» x,y,z өстерге қатысты үш түрлі орналасу мүмкіндігін білдіреді.</p>	<p>Электронның өздік күйін анықтайды. Яғни электронның ядроға қатысты орналасу не қозғалуы емес, электронның өзінің өз осіне қатысты айналуын сипаттайды.</p>

Электрондық орбитальдар



Атомдық s-, p-, d- және f-орбиталдарының пішіні мен кеңістіктегі орналасуы. Түрлі реңктермен белгіленген «қанаттар», мұнда толқындық функцияның әртүрлі таңбаларын көрсетеді.

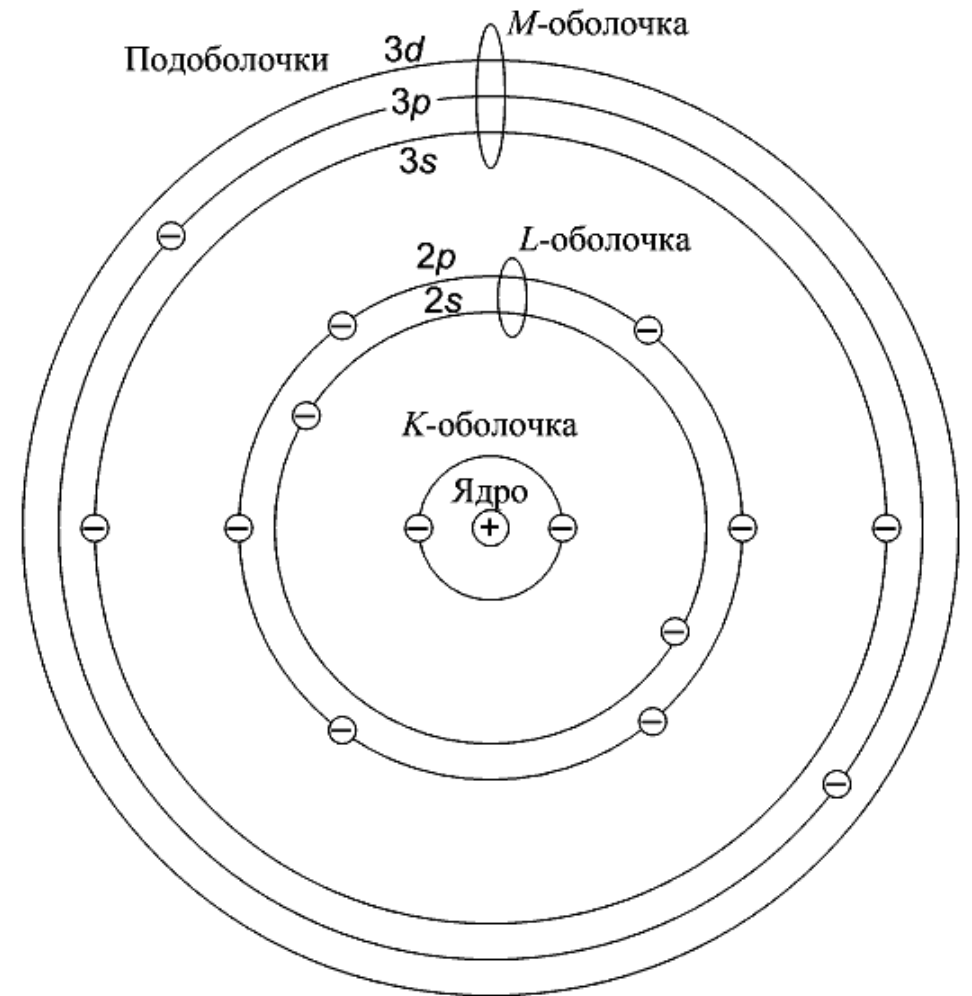
Атомдағы энергетикалық деңгейлер

Атомды ядро айналасындағы электрондық қабықшалардың жиынтығы ретінде қарастыруға болады.

Әрбір қабықшада электронның энергиясының нақты мәні болады.

Әрбір қабықшада белгілі бір шектеулі саны ғана электрондар бола алады.

Бұл шектеулер кванттық механиканың принциптері мен Паулидің ашықтық принципіне негізделеді, мысалы, бірінші қабықшада тек 2 электрон болуы мүмкін, екінші қабықшада – 8, үшінші қабықшада – 18, және т.б.



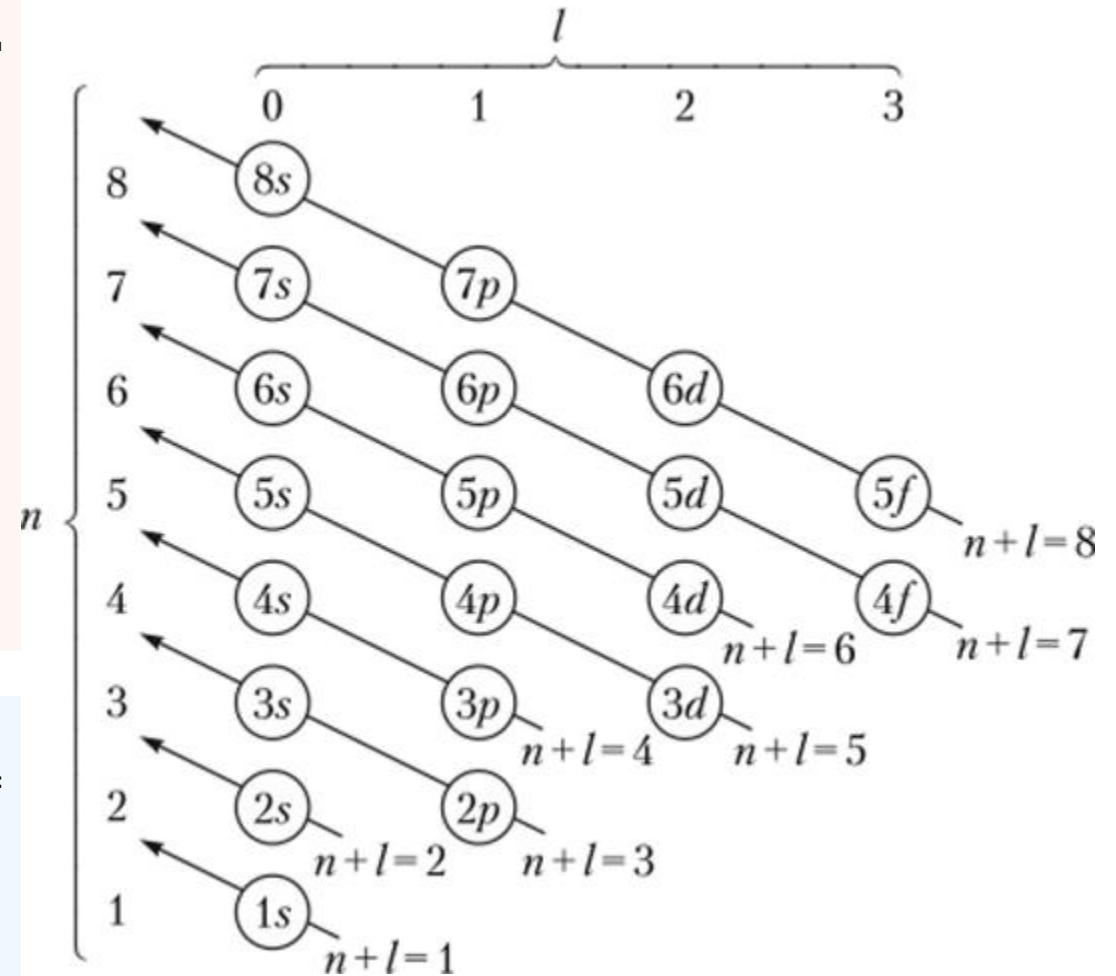
Минималды энергия принципі

Ең төмен энергия принципі атомдық орбитальдардың толтырылу тәртібін анықтайды, яғни электрондар алдымен ең төмен энергиялы орбитальдарды толтырады. Энергиясының өсуі келесідей:

$1s < 2s < 2p < 3s < 3p < 4s < 3d < 4p < 5s < 4d < 5p < 6s < 4f5d < 6p < 7s < 5f6d...$

Сутек атомы бір электроннан тұрады, және ол кез келген орбитальда болуы мүмкін. Алайда, негізгі күйде, ол ең төмен энергиялы $1s$ орбитальында орналасады.

Сондай-ақ, **$4f5d$** және **$5f6d$** жазуларының белгісіздігіне назар аудару керек. Кейбір элементтерде $4f$ подқабатының энергиясы төмен болса, басқаларында $5d$ подқабатының энергиясы төмен болады. Сол сияқты, $5f$ және $6d$ подқабаттары үшін де осындай жағдай байқалады.



Паули принципі

Паули тыйым салу принципі немесе жай ғана тыйым салу принципі — кванттық механика принципі, ол екі немесе одан көп бірдей фермиондардың (жартылай бүтін спинді бөлшектердің) бір уақытта кванттық жүйеде бірдей кванттық күйде бола алмайтындығын айтады.

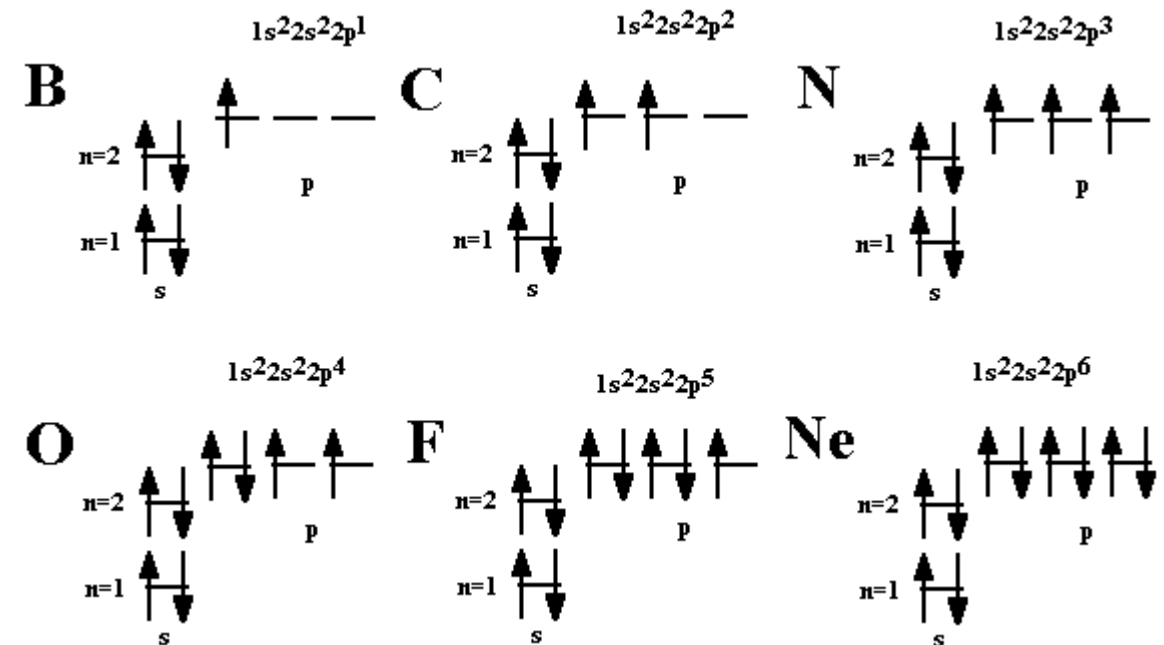
Электрондар атомдарындағы **Паули принципін** былай тұжырымдауға болады: көпэлектронды атомда екі электронның бірдей төрт кванттық санға ие болуы мүмкін емес. Яғни, екі электронның негізгі кванттық саны (n), орбиталық кванттық саны (l), магниттік кванттық саны (m) және спиннің проекциясы (m_s) бірдей бола алмайды.

Мысалы, егер екі электрон бір орбитальда орналасса, олардың n , l , m кванттық сандары бірдей болады, сондықтан m_s мәндері әртүрлі болуы керек. Осылайша, электрондардың спин проекциялары $1/2$ және $-1/2$ (\hbar бірлігінде) қарама-қарсы болуы тиіс.

Хунд ережесі

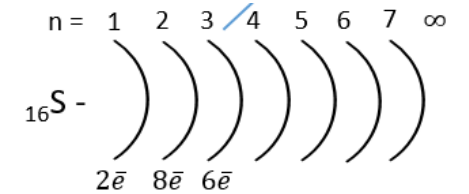
Хундтың ережесі — бұл белгілі бір қабаттың орбитальдарын толтыру тәртібін анықтайды және былай тұжырымдалады: берілген қабаттағы электрондардың спиндік кванттық санын барынша максималды ету қажет. Бұл ереже 1925 жылы **Фридрих Хундпен** формулаланған.

Бұл ереже бойынша, әр орбитальды алдымен бір электрон толтырады, тек барлық бос орбитальдар толғаннан кейін ғана екінші электрон сол орбитальға қосылады. Осы кезде бір орбитальда спиндері қарама-қарсы екі электрон болады, олар жұптасып (екіэлектронды бұлт түзеді) және нәтижесінде орбитальдың жиынтық спині нөлге тең болады.



Э.К. Жазу түрлері

а) Электрондық схемалар — ядро атом нөмірімен (ядро заряды, электрон саны) шеңбер ретінде бейнеленеді, ал оң жақта дугалар арқылы кванттық деңгейлер $n=1,2,3,4$ және т.с.с. көрсетіледі. Әрбір дуга астында осы деңгейде орналасқан электрондардың саны жазылады.



б) Электрондық формулалар — кванттық деңгейлер мен қосымша деңгейлердің энергетикалық реті жазылған жолдық жазба түрінде беріледі, мұнда қосымша деңгейлердің символдары деңгей нөмірімен көрсетіледі, ал деңгейлердегі электрондардың саны әрбір символдың дәрежесі ретінде көрсетіледі. Дәрежелердің жалпы саны атомдағы барлық электрондардың санына тең болуы тиіс, яғни элементтің атомдық нөміріне.



в) Электрондық-графикалық формулалар — электрондық формулаға сәйкес келетін кванттық деңгейлер мен қосымша деңгейлердің энергетикалық ретін көрсететін схемалар. Бұл схемалар атомдық орбитальдарды кванттық ұяшықтар арқылы бейнелейді, әрбір ұяшық белгілі бір қосымша деңгейдегі атомдық орбитальды шартты түрде көрсетеді — квадрат, шеңбер немесе сызық түрінде.

