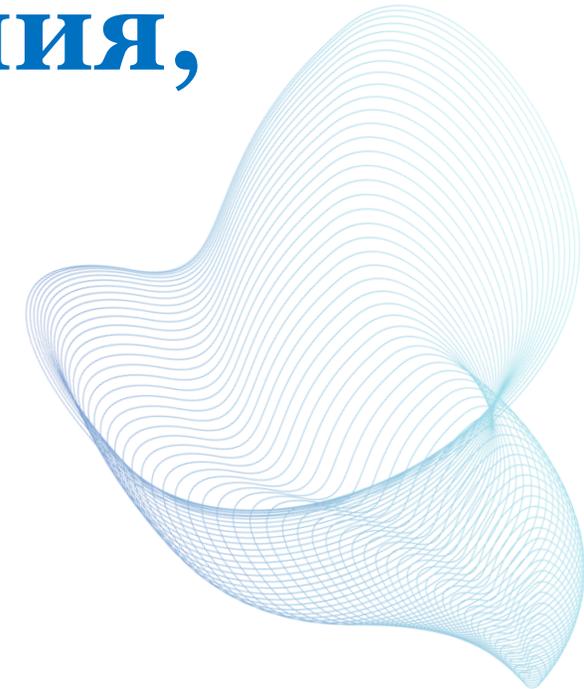


КазНУ им аль-Фараби
Кафедра общей и неорганической химии

Важные характеристики атома с позиции орбитального приближения, радиальная функция орбиталей

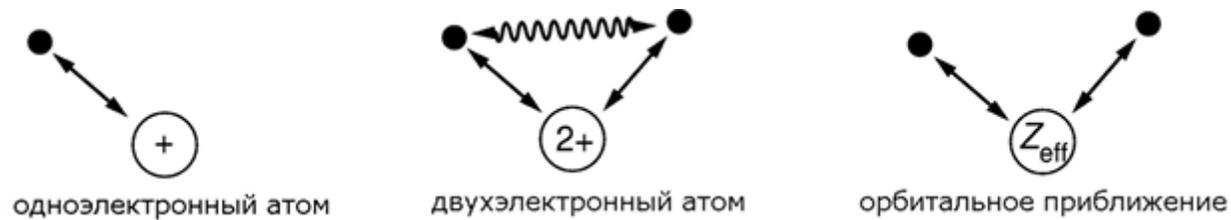
4 лекция



PhD Кеңес Қ.М.

Введение в орбитальное приближение

Орбитальное приближение: каждый электрон движется в сферическом поле, создаваемом ядром и остальными электронами. Орбитали водородоподобные, с эффективными зарядами Z_i .



Орбитальное приближение, метод, который описывает электроны как волновые функции (орбитали) вокруг ядра атома.

Основная идея: Электроны на разных орбиталях обладают различной энергией и пространственным распределением.

Каждая орбиталь характеризуется набором квантовых чисел.

Важность подхода: позволяет предсказать распределение электронов и их вклад в химические свойства атома.

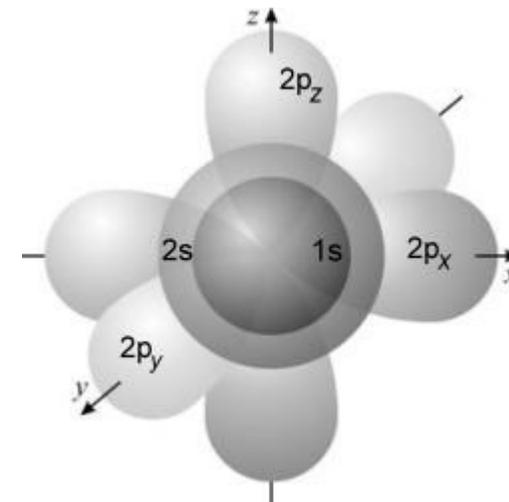
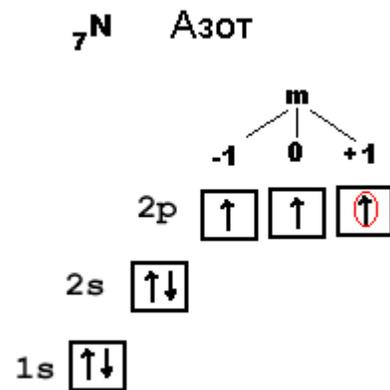
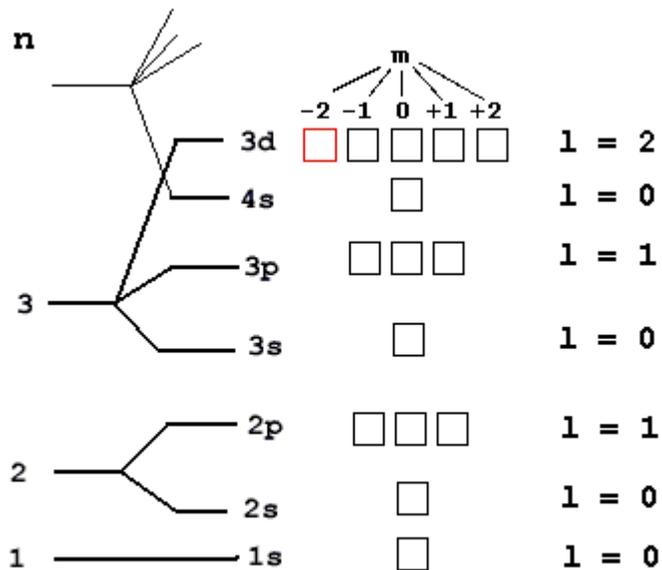
Квантовые числа и их роль в орбитальном приближении

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

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

Магнитное квантовое число (m): описывает ориентацию орбитали в пространстве.

Спиновое квантовое число (s): характеризует спин электрона.



Радиальная и угловая части атомных орбиталей

- **Разделение волновой функции:**

- Волновая функция атомной орбитали делится на радиальную ($R(r)$) и угловую ($Y(\theta, \phi)$) части.

- **Радиальная часть ($R(r)$):**

- Зависит от расстояния до ядра, описывает вероятность нахождения электрона вблизи ядра.

- **Угловая часть ($Y(\theta, \phi)$)**

- Зависит от угловых координат и описывает пространственное распределение формы орбитали.

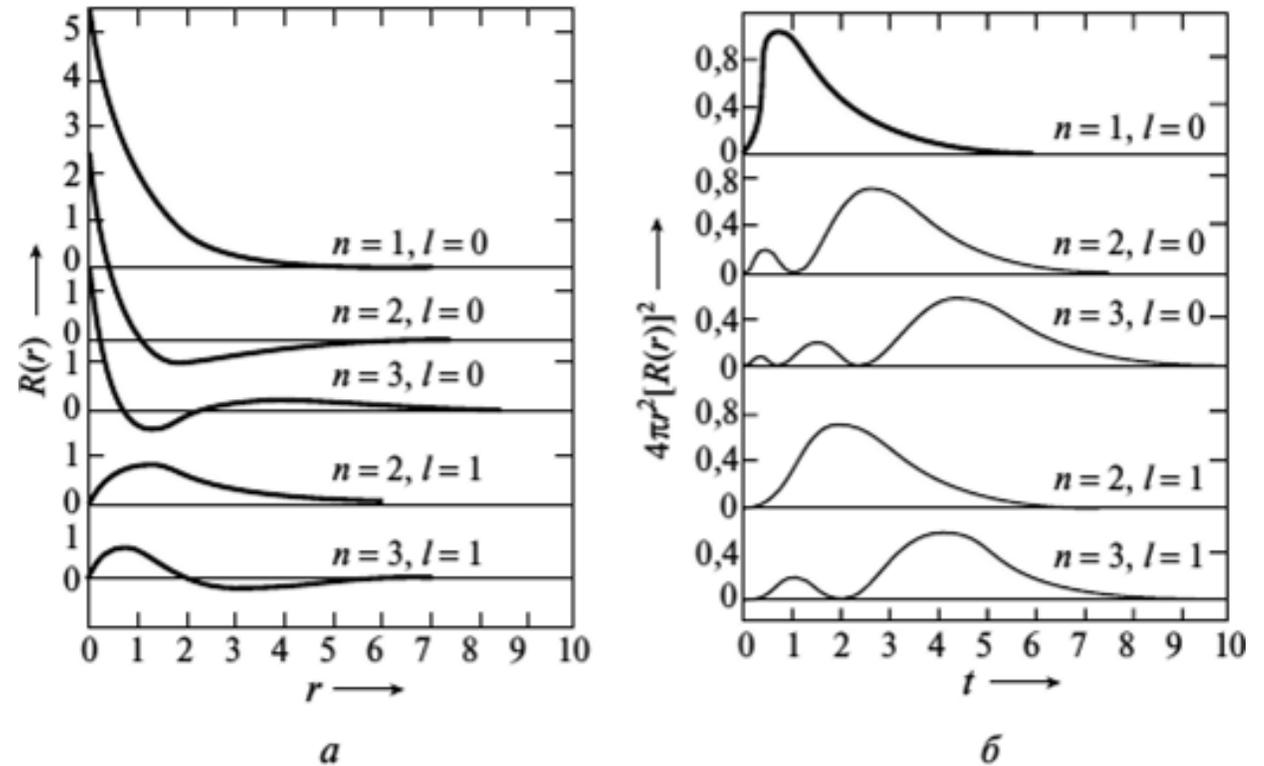
$$\psi_{nlm}(r, \theta, \phi) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta, \phi)$$

В зависимости от набора квантовых чисел Ψ может иметь различную симметрию. Последняя определяется видом угловой составляющей и описывается одной из предельных групп симметрии Кюри

Радиальная функция и распределение плотности вероятности

Радиальная функция орбитали $R(r)$: функция, описывающая изменение вероятности нахождения электрона на расстоянии r от ядра.

Распределение плотности вероятности: Плотность вероятности равна квадрату радиальной функции $|R(r)|^2$. Графики радиальной функции для орбиталей s, p, d.



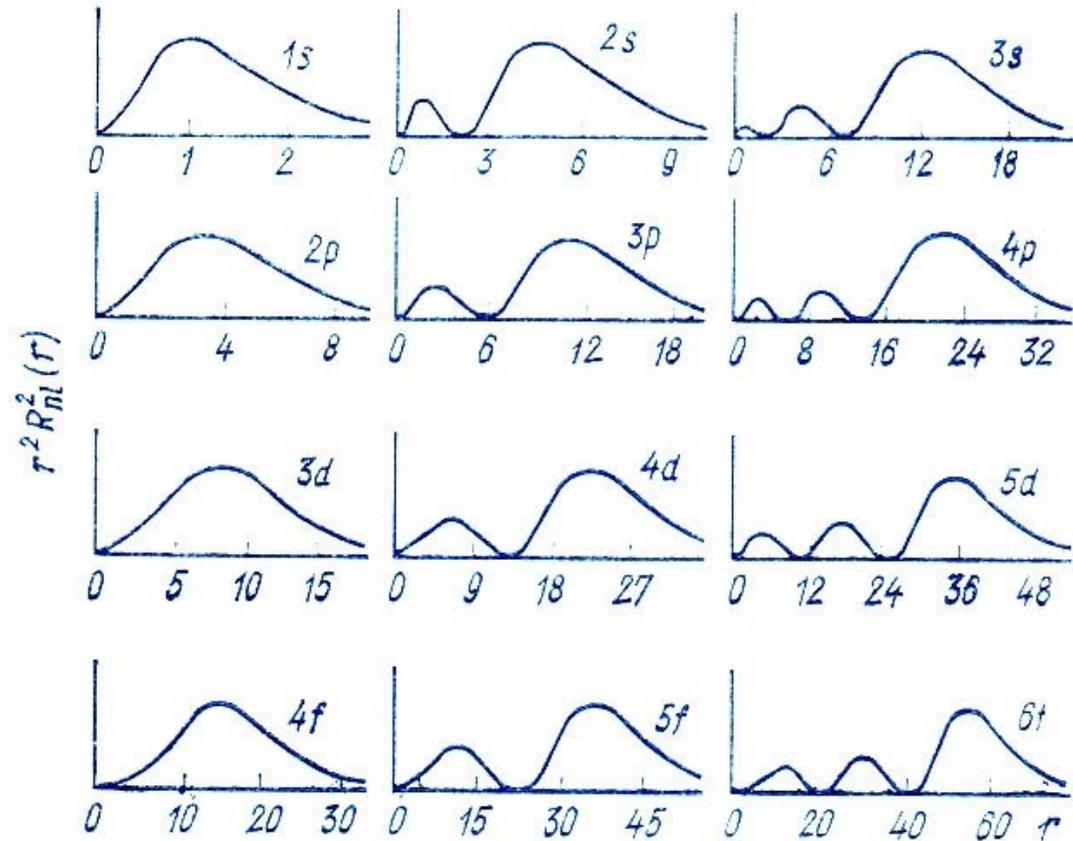
Радиальная часть волновых функций $R(r)$ (а) и величины $4\pi r^2 |R(r)|^2$ (б) для некоторых электронных состояний

Максимумы и узлы радиальной функции

Максимумы радиальной функции:

Указывают на вероятностные "области" нахождения электрона. Чем больше np , тем дальше от ядра находятся максимумы.

Узлы радиальной функции: Точки, где вероятность нахождения электрона равна нулю. Количество узлов увеличивается с ростом n и l .

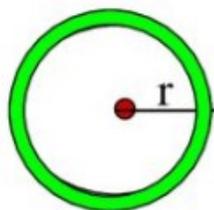


Узлы атомных орбиталей

Распределение радиальной плотности для разных орбиталей

Наглядно вероятность нахождения электрона в пространстве характеризует функция распределения эл.плотности (вероятность в элементарном объеме dV)

В общем случае $dP = \Psi^2 \cdot dV$ \rightarrow $P = \int_V \Psi^2 dV \leq 1$

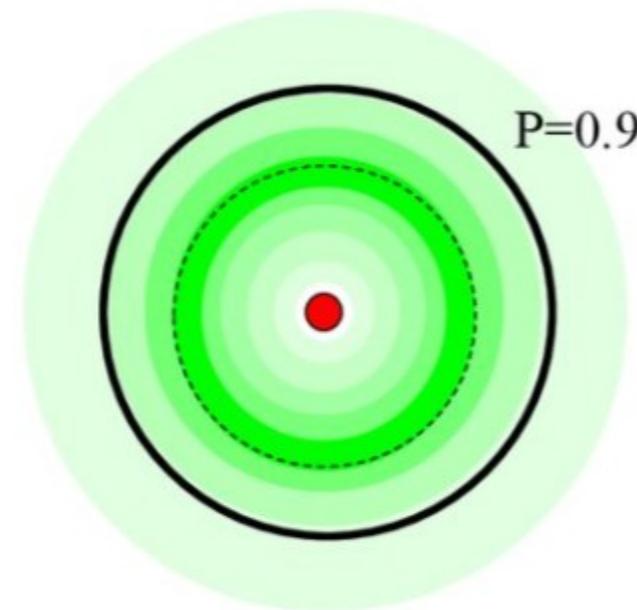
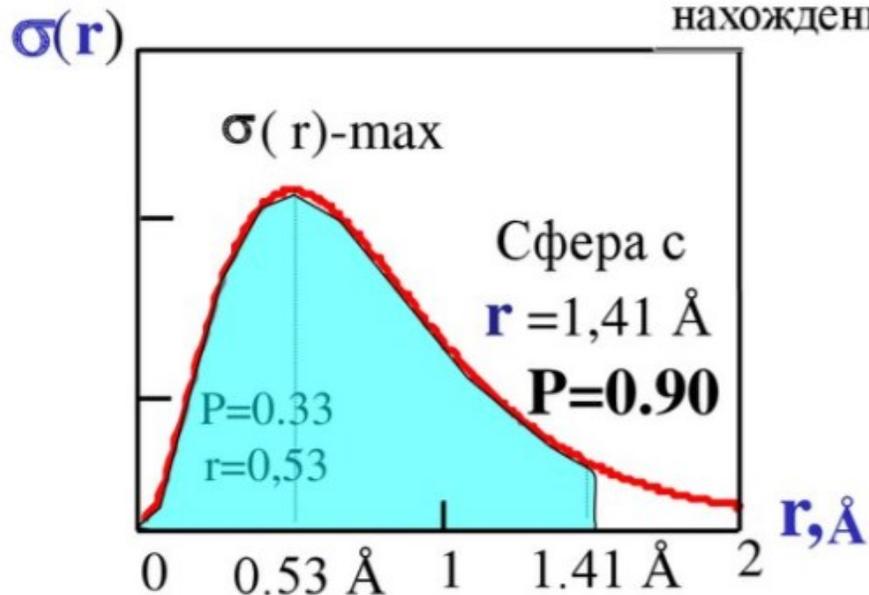


Для сферы: $dV = 4\pi r^2 dr \rightarrow dP(r) = \Psi^2 \cdot 4\pi r^2 dr (*)$; $P(r) = \int_0^r \Psi^2 \cdot 4\pi r^2 dr$
 dV -объем сферич.слоя
 тощиной dr

Из (*) \rightarrow Радиальное распределение электр. плотности $\sigma(r)$ (зависимость вероятности нахождения эл-на в сферическом слое от r):

$$\frac{dP(r)}{dr} = \sigma(r) = \Psi^2 \cdot 4\pi r^2$$

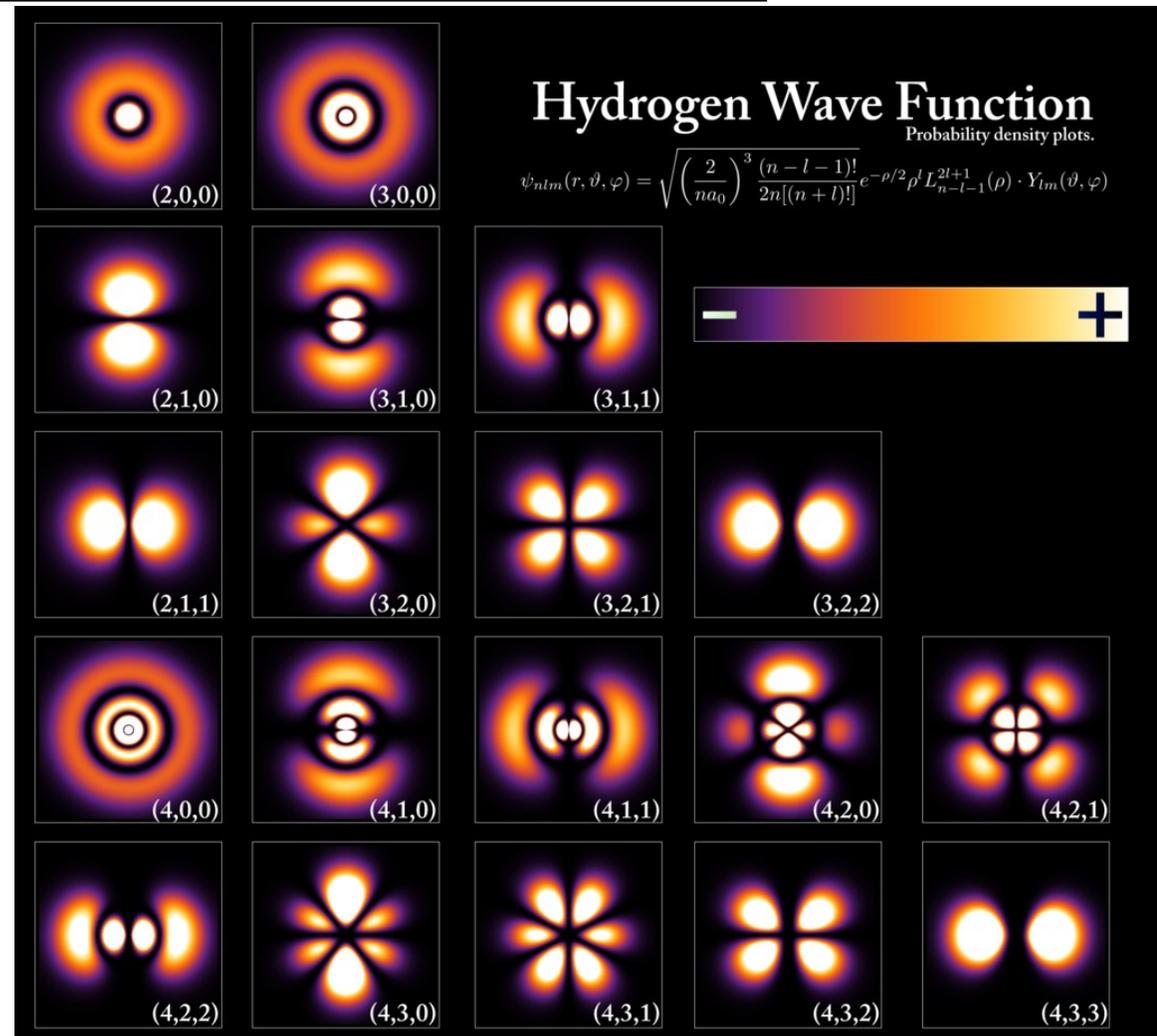
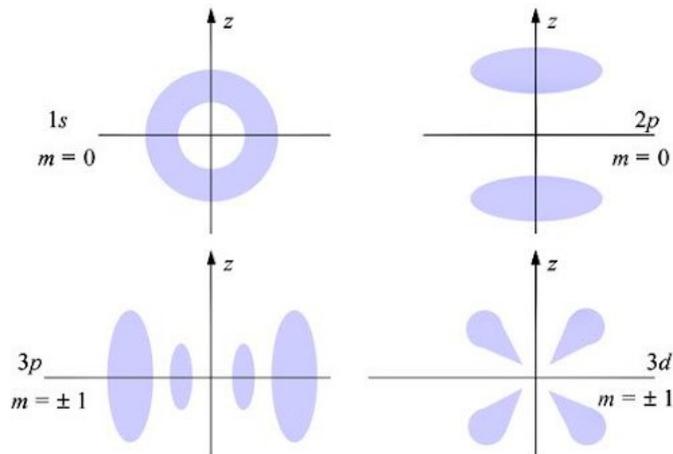
Орбиталь электрона – (объём) область пространства (для атома водорода в основном состоянии это сфера) в которой вероятность нахождения электрона $P=0.90$ (90 %)



Расчет эффективного заряда ядра

Формы радиальной плотности для s, p, d-орбиталей:

- s-орбитали: радиально симметричны вокруг ядра.
- p-орбитали: имеют два лепестка с узлом в центре.
- d-орбитали: более сложные формы с несколькими узлами.



Влияние радиальной функции на химические свойства

Энергия ионизации и радиус атома:

Радиальная плотность определяет притяжение электрона к ядру. Более высокая радиальная плотность близко к ядру увеличивает энергию ионизации.

Сравнение радиусов: Периодические изменения радиуса атома в зависимости от заполнения орбиталей.

Элемент	Эффективный заряд (Z^*)	Атомный радиус (пм)	Энергия ионизации (кДж/моль)	Электроотрицательность (по Полингу)
Литий (Li)	1.3	152	520	0.98
Бериллий (Be)	1.9	112	899	1.57
Бор (B)	2.6	87	801	2.04
Углерод (C)	3.3	77	1086	2.55
Азот (N)	3.8	70	1402	3.04
Кислород (O)	4.5	66	1314	3.44
Фтор (F)	5.1	64	1681	3.98
Неон (Ne)	5.7	62	2081	—