

Атомдардың электрондық  
құрылымы. Атом құрылымының  
кванттық механикалық  
теориясының негізгі ережелері.

2 дәріс

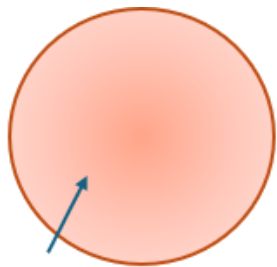
# Кіріспе: Атом

Атом – заттың химиялық қасиеттерін сақтайтын ең кіші бөлшек.

Атом құрылысын сипаттаудың бірнеше модельдері бар.

**Дж. Дальтон (1803 ж.)**

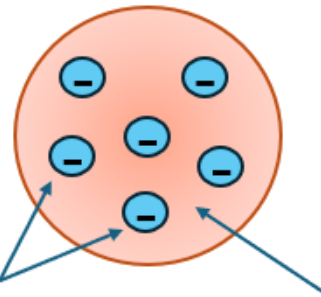
Ертедегі грек философтарының «атомос» бөлуге болмайтын, тығыз, көзге көрінбейтін кішкентай шар ұғымы негізінде құралған модель.



бөлінбейтін тығыз  
зат не бильярд  
шары

**Дж. Томпсон (1904 ж.)**

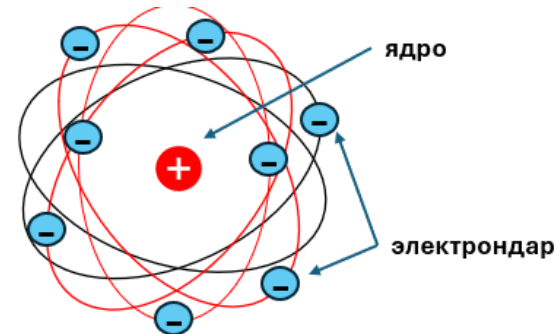
Атом деген толықтай оң заряды бар үлкен «пудинг». Ол пудингтің ішінде мейіз. Кез-келген химиялық элементтің ең кішкентай бөлінбейтін бөлігі.



электрондар  
оң зарядты зат

**Э. Резерфорд (1911 ж.)**

Атомда теріс зарядты электрон оң зарядты ядроны айналып жүреді деп түсіндірді. Ол күн жүйесіндегі планеталар күнді айналуына ұқсас деп болжады.



ядро

электрондар

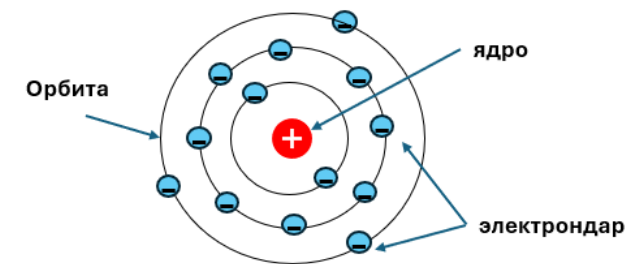
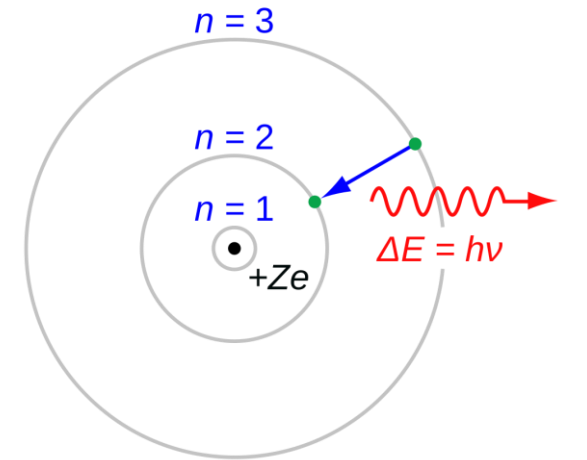
# Бор моделі

**Бор атомының моделі** (немесе **Бор–Резерфорд моделі**) – бұл Нильс Бор ұсынған жартылай классикалық атом моделі. 1913 жылы Бор осы модельді ұсынған кезде, ол Эрнест Резерфордтың планетарлық атом моделін негізге алды.

Энергияны шашу немесе сіңіру тек электрон бір орбитадан екінші орбитаға ауысқанда ғана болады. Сонымен қатар, стационарлы орбиталар деп тек электронның қозғалысы барысында оның қозғалыс мөлшері (импульс моменті) Планк тұрақтысының бүтін санына тең болған жағдайдағы орбиталар аталады:

$$m_e v r = n \hbar$$

мұндағы  $m_e$  — электронның массасы,  $v$  — оның жылдамдығы,  $r$  — орбитаның радиусы,  $n$  — бүтін сан,  $\hbar$  — азайтылған Планк тұрақтысы.



# Электрондық құрылым

**Атомдардың электрондық құрылымы** — атомдағы электрондардың энергия деңгейлері мен орбитальдардағы таралуын сипаттайды. Электрондардың атом ішіндегі орналасуы мен тәртібі кванттық механика заңдарына негізделген.

**Электрон** (грек. ἤλεκτρον — «янтарь») — субатомдық бөлшек, оның электр заряды теріс және ол элементарлық электр зарядына тең ( $e^-$  немесе  $\beta^-$ ).

Электронның негізгі қасиеттері:

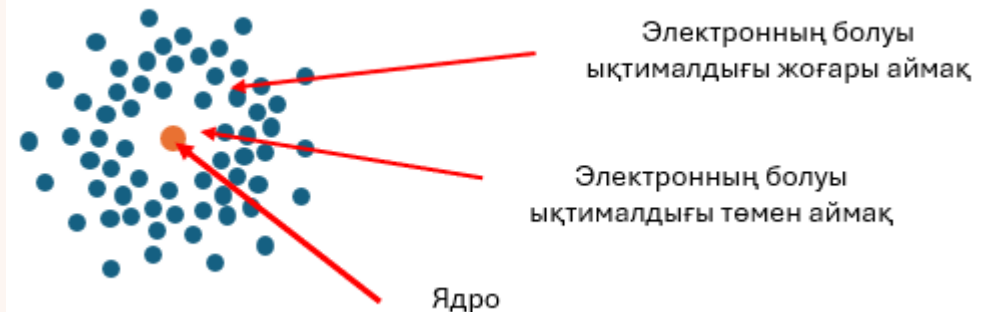
- **Электр заряды:** теріс, шамасы бір элементарлық зарядпен тең ( $-1.602 \times 10^{-19}$ )
- **Масса:** өте кішкентай ( $9.11 \times 10^{-31}$  кг), шамамен 1/1836 атомның массасынан аз.
- **Спин:** жартылай бүтін (1/2).
- **Орналасуы:** атомның ядросының айналасында орбитальдарда болады. Электрондардың қозғалысы кванттық механика заңдарына бағынады.

# Электрондық орбитальдар

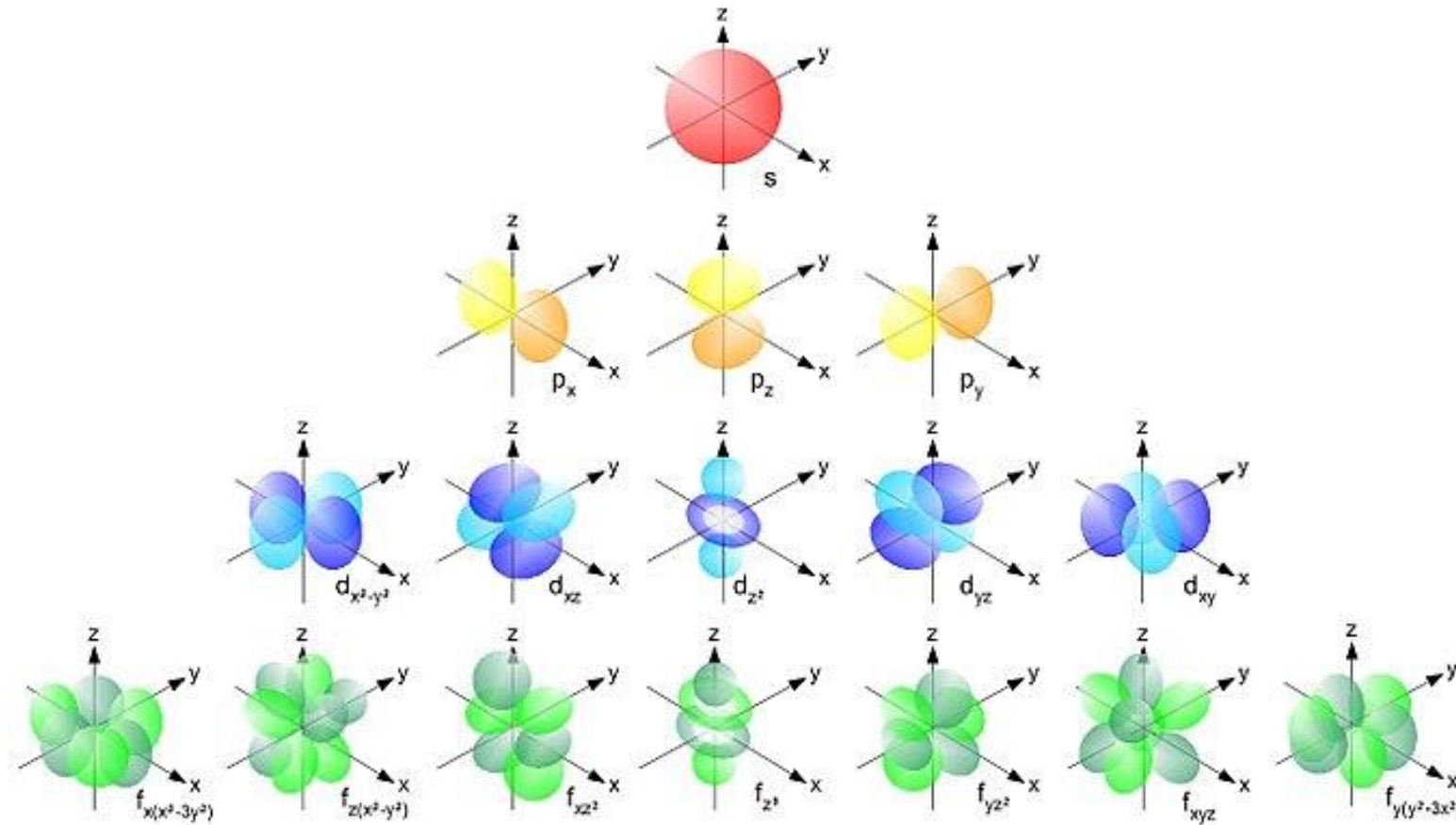
Электрондар атомда нақты орбитада (жол, сызық) емес, орбитальдарда орналасады. **Орбиталь** — бұл электрондардың болуы ықтимал аймағын көрсететін математикалық функция. Орбитальдардың пішіндері мен өлшемдері кванттық сандар арқылы анықталады.

**Атомдық орбиталь (электрондық орбиталь)** — бұл белгілі бір атом үшін Шредингер теңдеуін шешу арқылы алынған бір электронды **толқындық функциясы  $\psi$** , ол негізгі  $n$ , орбитальдық  $l$  және магниттік  $m$  кванттық сандарымен сипатталады.

Бірдей негізгі кванттық сан  $n$  мәні бар атомдық орбитальдардың жиынтығы бір **электрондық қабықшаны** құрайды. Әрбір химиялық элементтің атомында барлық орбитальдардың толық жиынтығы болады. Орбитальдар, электрондар оларда немесе болмауына қарамастан, тәуелсіз түрде бар, және олардың электрондармен толтырылуы атомның реттік нөмірінің өсуімен, яғни ядроның заряды мен сәйкесінше электрондардың санының артуымен жүзеге асады.



# Электрондық орбитальдар



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

# Кванттық механика: микроәлем

**Классикалық механикада** бөлшектің қозғалысы оның траекториясының әрбір нүктесіндегі координаттар мен импульсті (жылдамдықты) көрсету арқылы сипатталады. Кез келген күрделі жүйенің қозғалыс параметрлерін есептеу үшін жүйеге кіретін барлық бөлшектердің бастапқы сәттегі координаттары мен импульстерін (жылдамдықтарын), сондай-ақ қозғалыс жүретін жағдайларды (әсер етуші күштер, өрістер) беру жеткілікті. Осыдан кейін қозғалыс теңдеулерін (Ньютонның екінші заңы) пайдаланып, кез келген уақыт мезетіндегі координаттар мен импульстерді (жылдамдықтарды) табуға болады, яғни бөлшектің белгілі бір сәтте қай жерде болатынын анықтауға болады. Микродүниеге өткенде бұл тәсілдің жарамсыз екені анықталады. Микродүние құбылыстарын сипаттау үшін **кванттық механика** жасалды.

Эксперимент нәтижелері микродүние объектілері бір мезгілде **корпускулярлық** және **толқындық** қасиеттерге ие екенін көрсетеді. Мысалы, электрон белгілі бір масса мен зарядқа ие бөлшек болып табылады, бірақ оның ядро айналасындағы қозғалысында толқындық қасиеттерін ескеру қажет, өйткені оның қозғалысының нақты траекториясы мен кеңістіктегі нақты орналасуы жоқ. Микрообъектілердің қосарлы табиғатын түсіндіру үшін бұрынғы көзқарастарды түбегейлі қайта қарау қажет болды.

# Гейзенбергінің белгісіздік принципі

Бөлшектің белгілі бір күйінде не және қалай өлшенетініне байланысты, оның корпускулярлық немесе толқындық қасиеттері басым болады. Толқындық функцияны қолдану микробөлшектердің корпускулярлық та, толқындық та қасиеттерін сипаттауға мүмкіндік береді.

Кванттық механиканың ең маңызды физикалық ұстанымдарының бірі – **Гейзенбергінің атақты белгісіздік принципі**. Бұл принципке сәйкес, өлшеу дәлдігін қанша арттырсақ та, бөлшектің координатасы мен импульсін өлшеудегі белгісіздіктердің көбейтіндісін Планк тұрақтысынан кіші ету мүмкін емес.

$$\Delta x = m \cdot \Delta v > h / 2\pi,$$

мұндағы  $\Delta x$  – электронның (немесе кез келген микробөлшектің) орнын анықтаудағы белгісіздік (өлшеу қателігі),  $\Delta v$  – оның жылдамдығын (немесе импульсін,  $\Delta p = m \cdot \Delta v$ ) өлшеудегі белгісіздік.

$\Delta x$  мәні неғұрлым аз болса, яғни микрообъектінің (әсіресе электронның) орнын соғұрлым дәл анықтасақ, оның жылдамдығын немесе импульсін анықтаудағы белгісіздік (қате) соғұрлым артады, және керісінше.



# Гейзенбергінің белгісіздік принципі

Электронның атом ядролары өрісіндегі қозғалысын (күйін) де Бройль толқындары арқылы сипаттайды, олар үшөлшемді кеңістіктік координаттар жүйесінде  $\Psi(x,y,z)$  толқындық функциясымен математикалық түрде өрнектеледі.  $\Psi(x,y,z)$  толқындық функциялары немесе «пси-функциялар» – электронның кеңістіктік координаттары функциялары, олар электрондардың рұқсат етілген кванттық күйлерін, атомдағы энергетикалық деңгейлерін және электрондардың атом ядросы айналасындағы үшөлшемді кеңістікте ең ықтимал орналасу аймақтарын анықтайды. Толқындық функцияны анықтауда стационарлы жағдайдағы Шредингер теңдеуі қолданылады.

$$\Delta \psi + \frac{2m_0}{\hbar^2} (E - U)\psi = 0.$$

**Электронның ең ықтимал кванттық күйі** – ядро айналасындағы кеңістікте электронның әртүрлі сәттерде ең жоғары ықтималдықпен (98%-ға дейін) болуы мүмкін аймағы **атомдық орбиталь** (АО) немесе «электрондық бұлт» деп аталады. Бұл аймақ тез қозғалып жүрген электронның түрлі орындарының жиынтығын білдіреді.