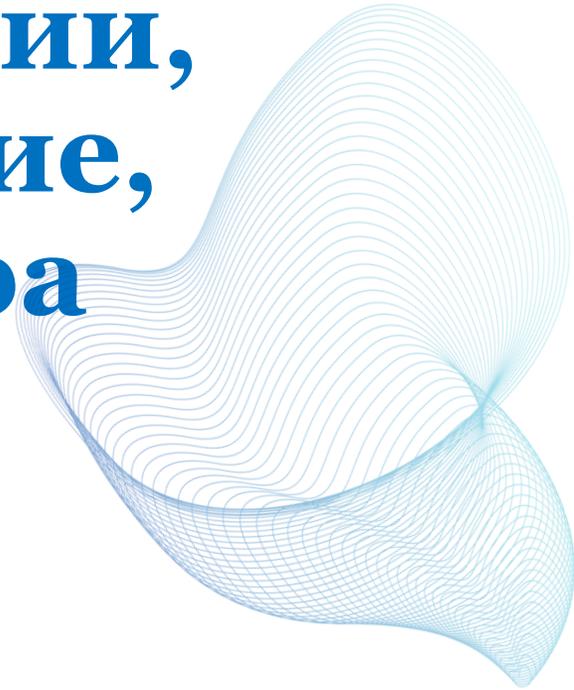


КазНУ им аль-Фараби  
Кафедра общей и неорганической химии

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

2 лекция

PhD Кеңес Қ.М.

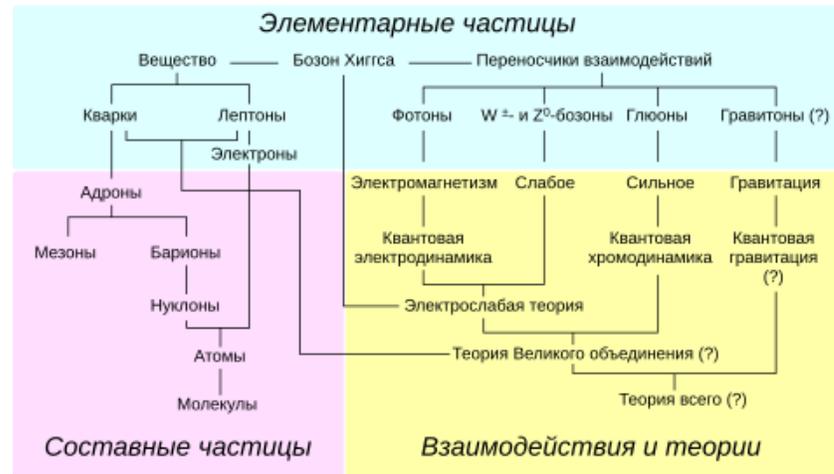
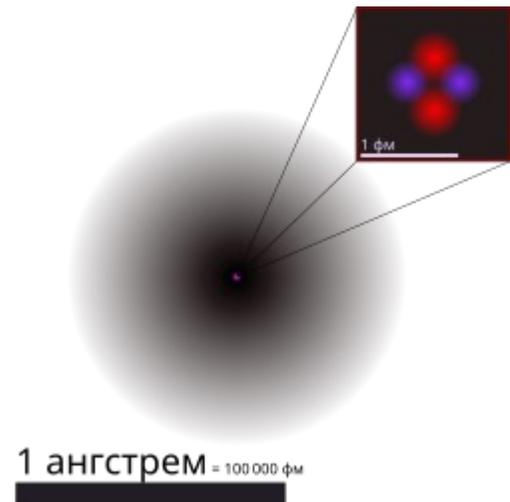


# Строение атома: история моделей

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).



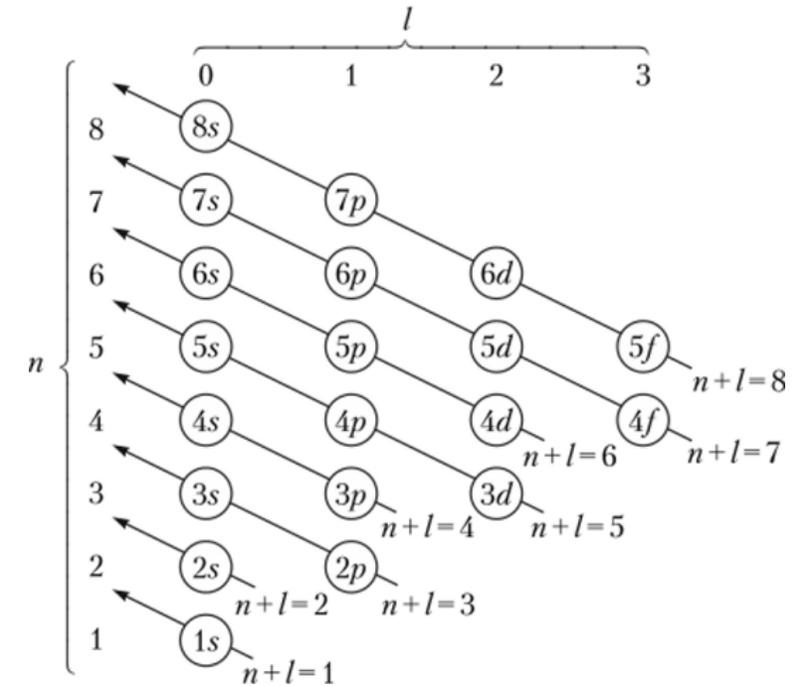
<p><b>МОДЕЛЬ «СЛИВОВЫЙ ПУДИНГ»</b> Дж. Дж. Томсон (1903г.)</p>	<p><b>ЯДЕРНАЯ МОДЕЛЬ</b> Э. Резерфорд (1911г.)</p>
<p><b>ПЛАНЕТАРНАЯ МОДЕЛЬ</b> Э. Резерфорд – Н. Бор (1913г.)</p>	<p><b>ВОЛНОВАЯ МОДЕЛЬ</b> Эл. де Бройль (1924г.)</p>
<p><b>КВАНТОВО–МЕХАНИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ</b> Э. Шредингер (1926г.)</p>	<p><b>ОРБИТАЛЬНАЯ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

# 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.

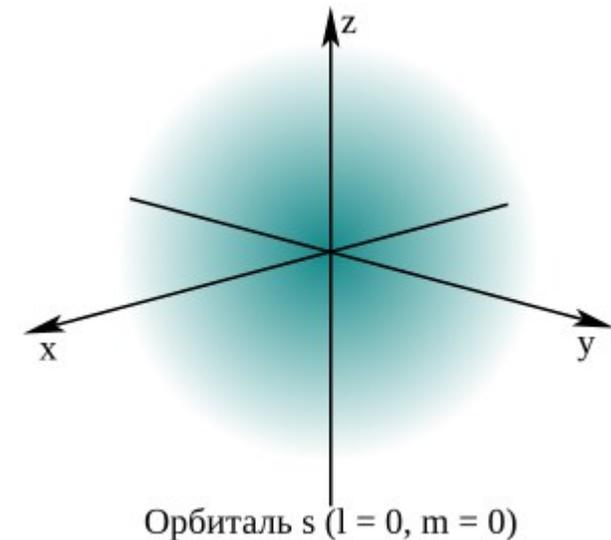


# Атомная орбиталь

**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.

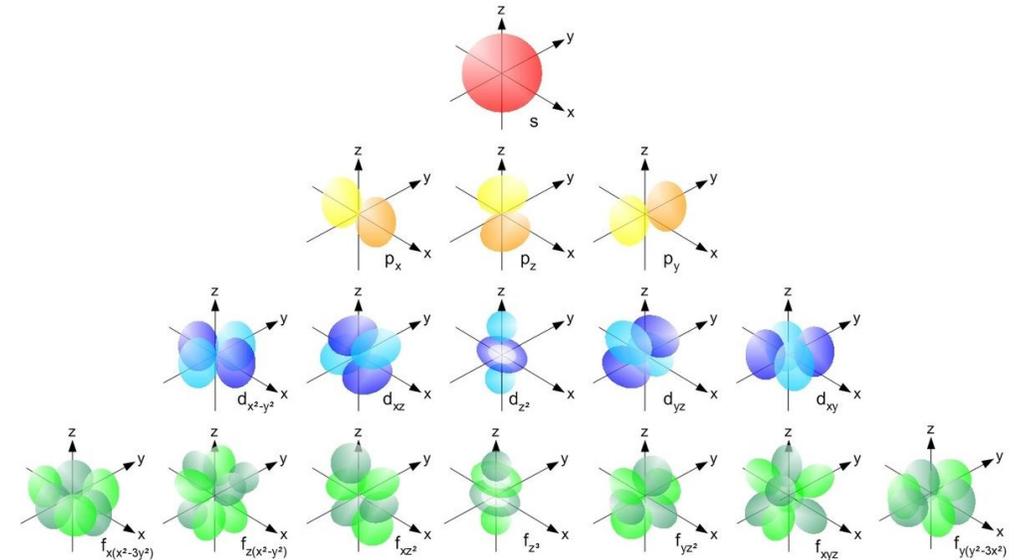
## Квантовые числа:

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

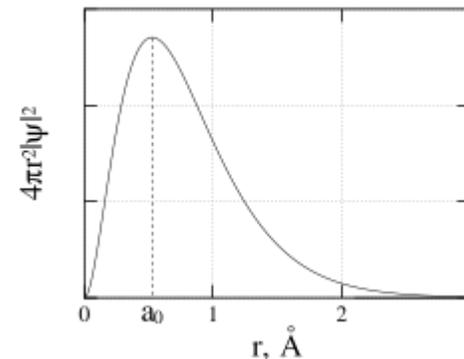
Орбитальное квантовое число ( $l$ ): Определяет форму орбитали ( $s$ ,  $p$ ,  $d$ ,  $f$ ).

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  $\psi$ , а  $4\pi r^2 |\psi(r)|^2$ ). В этом простом случае зависимости от углов  $\theta$  и  $\varphi$  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

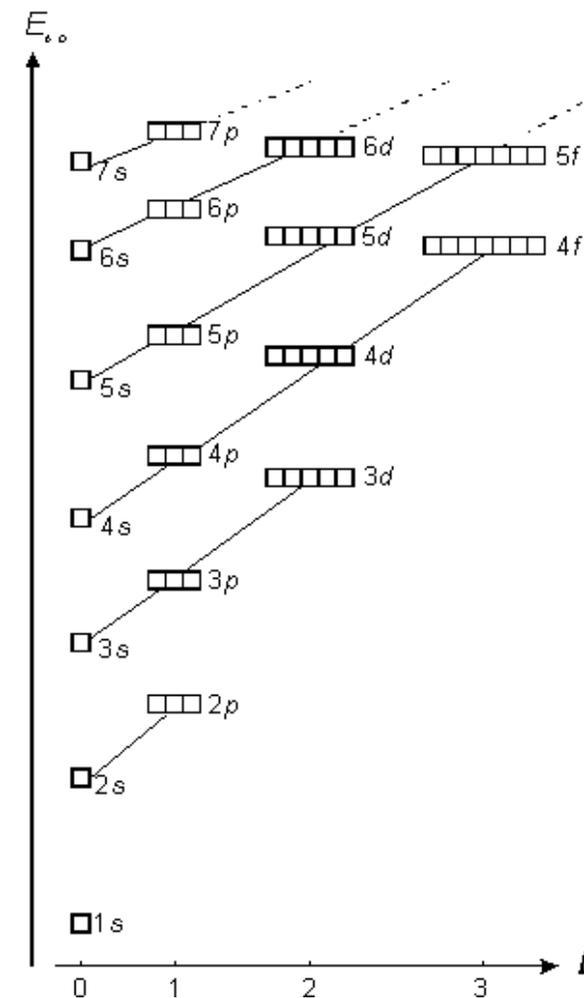
**Энергия АО** – энергия электрона, находящегося на этой орбитали (то есть в этом состоянии).

**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.

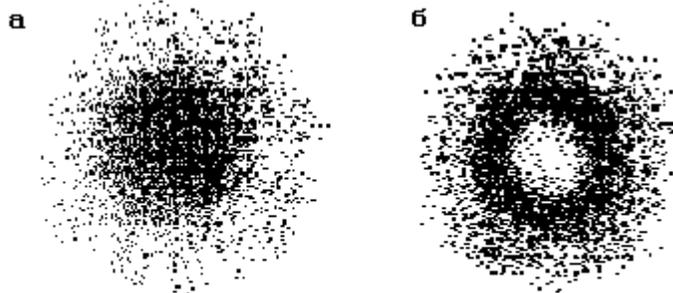


Рис 6.6. Электронное облако как набор моментальных "фотографий" электрона:  
а - вид со стороны; б - вид в сечении

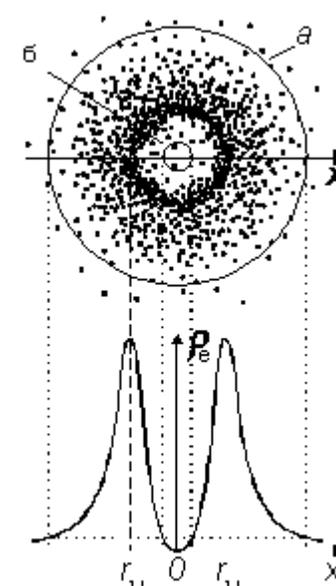


Рис 6.7. Строение 1s - ЭО

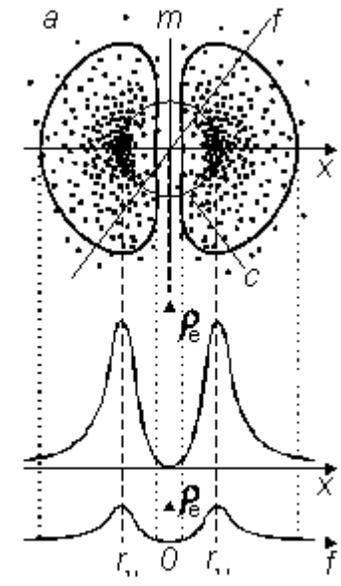


Рис 6.8. Строение 2p - ЭО

# Формы облака

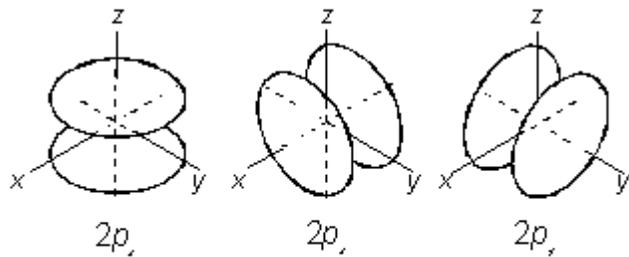


Рис 6.9. Граничные поверхности 2p-электронных облаков

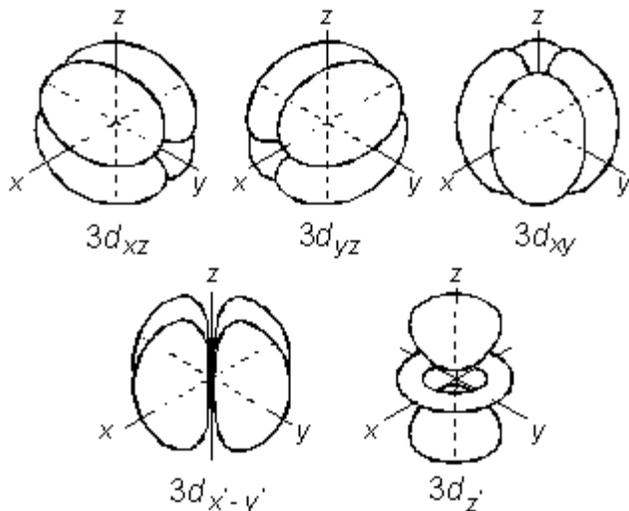


Рис 6.11. Граничные поверхности 3d-электронных облаков

**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).