

СТРОЕНИЕ АТОМА

1. Развитие теории строения атома (самостоятельно).
2. Ядро и электронная оболочка атома (самостоятельно).
3. Строение ядра атома (самостоятельно).
4. Нуклиды, изотопы, массовое число (самостоятельно).
5. Энергетические уровни.
6. Квантово-механическое объяснение строения.
 - 6.1. Орбитальная модель атома.
 - 6.2. Правила заполнения орбиталей.
 - 6.3. Орбитали с s-электронами (атомные s-орбитали).
 - 6.4. Орбитали с p-электронами (атомные p-орбитали).

1. РАЗВИТИЕ ТЕОРИИ СТРОЕНИЯ АТОМА

Достижения экспериментальной физики к концу XIX в. со всей убедительностью доказали неправомочность представлений о неделимости атома. Французский физик Беккерель в 1896 г. обнаружил самопроизвольное испускание урановыми рудами ранее неизвестного вида излучения, проникающего через вещества. Позднее (1898 г.) то же явление было обнаружено и основательно изучено французскими учеными П. Кюри и М. Склодовской-Кюри, которые объяснили наблюдаемое излучение естественной радиоактивностью. Они открыли (1898г.) в урановых рудах два новых и более мощных источника излучения, чем сам уран. Ими оказались радиоактивные элементы полоний и радий. Было найдено, что радий претерпевает многоступенчатый спонтанный распад, который заканчивается образованием стабильного свинца. Поскольку атомы свинца качественно отличаются от атомов радия, такое превращение элементов можно объяснить только тем, что атомы обоих элементов построены из одинаковых, более мелких, чем сами атомы, частиц.

Первым основополагающим достижением в области изучения внутреннего строения вещества было создание модели атома английским физиком Резерфордом (1911 г.). По Резерфорду атом состоит из ядра, окруженного электронной оболочкой. Датский физик теоретик Бор использовал представления Резерфорда и созданную немецким физиком Планком (1900 г.) квантовую теорию для разработки в 1913 г. теории водородоподобного атома и первой квантовой модели атома (*модель атома Бора*). Приняв, что электроны — это частицы, он описал атом как ядро, вокруг которого на разных расстояниях движутся по круговым орбитам электроны. В 1916 г. модель атома Бора была усовершенствована немецким физиком Зоммерфельдом, который объединил квантовую теорию Планка и теорию относительности Эйнштейна (1905 г.), создав квантовую теорию атомных орбит, которые по Зоммерфельду, могут быть не только круговыми, но и эллиптическими.

Следующий этап в становлении квантовой теории строения атома начался с теоретического обоснования французским ученым де Бройлем двойственной природы материальных частиц, в частности электрона. Он наряду с корпускулярным характером обладает и волновыми свойствами.

Исходя из учения о корпускулярно-волновой природе частиц вещества, австрийский физик Шрёдингер и ряд других ученых разработали теорию движения микрочастиц — волновую механику, которая привела к созданию современной квантово-механической модели атома.

2. ЯДРО И ЭЛЕКТРОННАЯ ОБОЛОЧКА АТОМА

Каждый атом состоит из ядра и электронной оболочки.

Электронная оболочка атома - это совокупность элементарных частиц - электронов, каждому из которых присущ корпускулярно-волновой характер.

Электрон (e) как частица обладает массой покоя $m_e = 9,1095 \cdot 10^{-31}$ кг и несет отрицательный электрический заряд, равный $1,6022 \cdot 10^{-19}$ Кл. Абсолютное (без учета знака) значение этого заряда является наименьшим и называется элементарным зарядом.

Атом в целом не заряжен (электрически нейтрален). Это обусловлено тем, что сумма отрицательных зарядов электронов компенсирована положительным зарядом ядра атома:

в каждом атоме число элементарных отрицательных зарядов в оболочке равно числу элементарных положительных зарядов в ядре.

Пример: В атоме водорода одному отрицательному заряду единственного электрона отвечает единичный ($1+$) положительный заряд ядра, носителем которого является протон (рис. 1), а в атоме бериллия положительный заряд ядра ($4+$) электрически уравновешен суммой отрицательных зарядов четырех электронов ($4e$) в оболочке.

Между положительно заряженным ядром атома и отрицательно заряженными электронами его оболочки действуют электростатические (кулоновские) силы притяжения, т. е. в атоме проявляется единство противоположностей — разных по знаку зарядов.

Геометрический размер атома, условно описываемый диаметром его электронной оболочки, имеет порядок 10^{-10} м, а диаметр атомного ядра — порядок 10^{-14} м, т. е. по размеру ядро в 10000 раз меньше, чем атом. Отсюда следует, что масса атома сосредоточена в его ядре.

В легчайшем атоме водорода ядро обладает массой $1,6726 \cdot 10^{-27}$ кг; электрон легче ядра в 1836 раз.

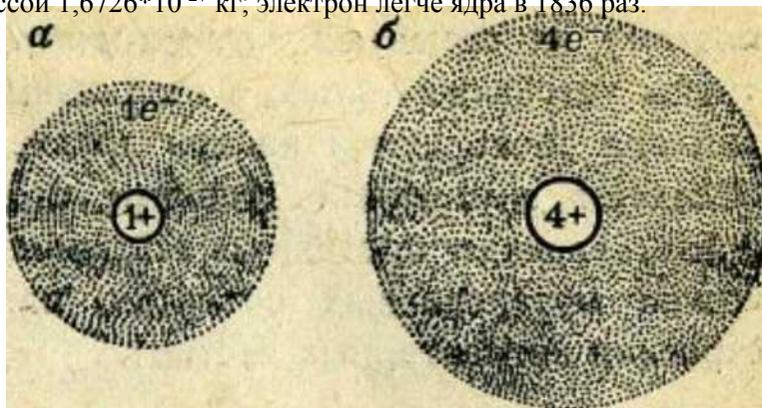


Рис. 1. Ядро и электронная оболочка атомов водорода (а) и бериллия (б)

3. СТРОЕНИЕ ЯДРА АТОМА

Радиоактивный распад атомов тяжелых элементов, в результате которого образуются атомы более легких элементов, свидетельствует о том, что ядра атомов имеют сложное строение и состоят из еще более мелких частиц - нуклонов. Существует два вида нуклонов: протон (обозначение p⁺), который несет положительный электрический заряд $1,6022 \cdot 10^{-19}$ Кл и обладает массой покоя $m_p = 1,6726 \cdot 10^{-27}$ кг; нейтрон (обозначение n⁰), который не имеет электрического заряда (электрически нейтрален) и обладает массой покоя $m_n = 1,6750 \cdot 10^{-27}$ кг. Масса атомных ядер элементов определяется числом протонов и нейтронов, а их заряд - только числом протонов.

Поскольку положительный заряд протона и отрицательный заряд электрона совпадают по абсолютному значению и равны элементарному заряду, в нейтральном атоме число электронов в оболочке всегда равно числу протонов в ядре. Таким образом, известный заряд ядра определяет число электронов в оболочке нейтрального атома. Химические свойства элементов в основном зависят от числа электронов, содержащихся в наиболее удаленной от ядра оболочке, следовательно, общий заряд ядра атома является важнейшим признаком индивидуальности химических элементов.

Все атомы одного и того же элемента имеют одинаковый заряд ядра (число протонов в ядре), а атомы разных элементов имеют разный заряд их ядер. К настоящему времени известно 109 химических элементов, т. е. 109 различных по значению заряда атомных ядер. Все известные элементы могут быть расположены в один непрерывный ряд в порядке возрастания заряда ядра их атомов. Число, соответствующее заряду ядра, называется порядковым (или атомным) номером элемента.

Атомные частицы - протоны, нейтроны и электроны при современном научно-техническом уровне не удается расщепить на более мелкие частицы; поэтому их называют элементарными частицами. Однако известно, что нейтроны устойчивы только в стабильных атомных ядрах, а в свободном состоянии они распадаются на три другие частицы значит, нейтроны и протоны обладают внутренним (тонким) строением. По современным теоретическим представлениям протоны и нейтроны состоят из трех более мелких гипотетических материальных объектов, названных кварками.

При переходе от элемента к элементу число протонов, а следовательно, и заряд ядра атома увеличивается на единицу, а число нейтронов и тем самым общее число нуклонов в ядрах атомов элементов растет неравномерно:

Водород	1 протон		=1 нуклон
Гелий	2 протона	+ 2 нейтрона	= 4 нуклона
Литий	3 протона	+ 4 нейтрона	= 7 нуклонов
Бериллий	4 протона	+ 5 нейтронов	= 9 нуклонов
Бор	5 протонов	+ 6 нейтронов	= 11 нуклонов
Углерод	6 протонов	+ 6 нейтронов	=12 нуклонов
Азот	7 протонов	+ 7 нейтронов	= 14 нуклонов
Кислород	8 протонов	+ 8 нейтронов	=16 нуклонов
Фтор	9 протонов	+ 10 нейтронов	= 19 нуклонов
Неон	10 протонов	+ 10 нейтронов	= 20 нуклонов

Число нуклонов в ядре атома элемента равно относительной атомной массе элемента, округленной до целого числа.

4. НУКЛИДЫ. ИЗОТОПЫ. МАССОВОЕ ЧИСЛО

Большинство элементов, содержащихся в природе, состоит из нескольких видов атомов, отличающихся значениями относительной атомной массы. Пример. Хлор в природе встречается как смесь двух видов атомов, один из которых содержит 18, а другой - 20 нейтронов в ядре.

Каждый вид атомов независимо от принадлежности к конкретному элементу однозначно описывается числом нуклонов (суммой протонов и нейтронов). Поэтому число видов атомов превышает число элементов.

Каждый вид атомов (вид ядер) называется

нуклидом - это вид атомов и ядер, отвечающий определенным числам протонов и

нейтронов. Нуклиды, принадлежащие одному элементу и однозначно определяемые

числом протонов, но различающиеся по числу нейтронов, называются изотопными нуклидами, или просто изотопами.

Изотопы элемента - это нуклиды, обладающие равным зарядом ядра (числом

протонов). Изотопы элемента различаются только числом нейтронов и, следовательно, общим числом

нуклонов. Например: Ядра двух природных изотопов хлора содержат по 17 протонов, но 18 и 20 нейтронов, т. е. 35 и 37 нуклонов соответственно.

Вследствие того, что именно числом протонов в ядре определяется число электронов в оболочке атома и химические свойства элемента, следует, что атомы всех изотопов одного и того же элемента имеют одинаковое электронное строение, а сами изотопы - близкие химические свойства, из-за чего их не удается разделить химическими методами.

В природе встречаются элементы, имеющие только один изотоп. Такие элементы называются изотопно-чистыми. В современной Периодической системе насчитывается 21 изотопно-чистый элемент (ниже они перечислены по возрастанию порядкового номера): Be, F, Na, Al, P, Sc, Mn, Co, As, Y, Nb, Rh, I, Cs, Pr, Tb, Ho, Tm, Au, Bi, Th.

Остальные природные элементы представляют собой смесь двух или более изотопов, атомы которых различаются по числу нуклонов. Такие элементы называются изотопно-смешанными, их в Периодической системе большинство. Значения относительных атомных масс таких элементов отвечают природной смеси изотопов и являются усредненными по содержанию изотопов, поэтому значения A_r многих элементов сильно отклоняются от целочисленных значений. Даже углерод, который принят за точку отсчета относительных атомных масс других элементов, является изотопно-смешанным, элементом (два изотопа с $A_r = 12$ и $A_r = 13$), и мерой определения относительной атомной массы служит один из природных изотопов углерода, а именно углерод-12. Наибольшее число изотопов (десять) имеет элемент олово.

Для нуклидов точные значения относительных атомных масс всегда близки к целочисленным значениям, поэтому массы нуклидов можно сравнивать по этим значениям A_r , называемым массовыми числами.

Массовое число нуклида равно числу содержащихся в нем нуклонов (сумме протонов и нейтронов).

Для обозначения конкретного нуклида применяется специальная символика. Слева от символа химического элемента верхним индексом указывается массовое число, а нижним индексом - заряд ядра. Например: ${}^6_{12}\text{C}$, ${}^{17}_{35}\text{Cl}$ и т.д.

Указание на порядковый номер в химии не является обязательным, особенно для изотопов.

Обобщая сказанное выше, можно

записать: Массовое число = Число нуклонов в

ядре. Порядковый номер = Число протонов в ядре или число электронов в оболочке

атома. Разность между массовым числом и порядковым номером = Число нейтронов в ядре.

3. ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ УРОВНИ

Строение электронной оболочки атома определяется различным запасом энергии отдельных электронов в атоме. В соответствии с моделью атома Бора электроны могут занимать в атоме положения, которым отвечают точно определенные (квантованные) энергетические состояния. Эти состояния называются энергетическими уровнями.

Число электронов, которые могут находиться на отдельном энергетическом уровне, определяется формулой $2n^2$, где n - номер уровня, который обозначается арабскими цифрами 1 - 7. Максимальное заполнение первых четырех энергетических уровней в соответствии с формулой $2n^2$ составляет: для первого уровня - 2 электрона, для второго - 8, для третьего - 18 и для четвертого уровня - 32 электрона. Максимальное заполнение электронами более высоких энергетических уровней в атомах известных элементов не достигнуто.

Рис. 2 показывает заполнение электронами энергетических уровней первых двадцати элементов (от водорода Н до кальция Са, черные кружки). Заполняя в указанном порядке энергетические уровни, получают простейшие модели атомов элементов, при этом соблюдают порядок заполнения (снизу вверх и слева направо по рисунку) таким образом, пока последний электрон не укажет на символ соответствующего элемента. На третьем энергетическом уровне M (максимальная емкость равна $18 e^-$) для элементов № - Аг содержится только 8 электронов, затем начинает застраиваться четвертый энергетический уровень N - на нем появляются два электрона для элементов К и Са. Следующие 10 электронов снова занимают уровень M (элементы Sc - Zn (не показаны), а потом продолжается заполнение уровня N еще шестью электронами (элементы Са—Кг, белые кружки).

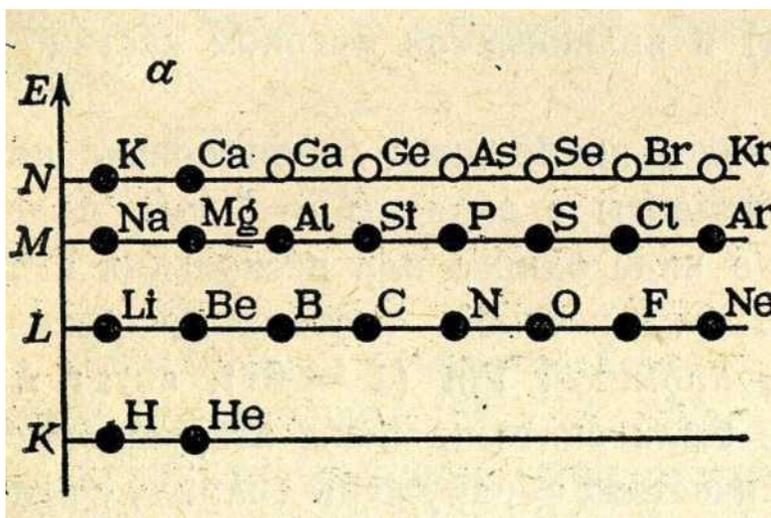


Рис. 2

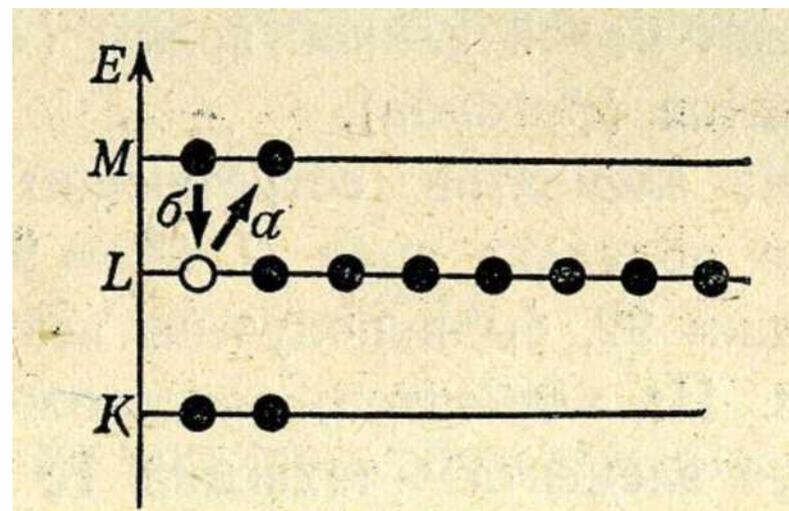


Рис. 3

Если атом находится в основном состоянии, то его электроны занимают уровни с минимальной энергией, т. е. каждый последующий электрон занимает энергетически самое выгодное положение, такое, как на рис. 1. При внешнем воздействии на атом, связанном с передачей

ему энергии, например путем нагревания, электроны переводятся на более высокие энергетические уровни (*рис. 3*). Такое состояние атома называется возбужденным. Освободившееся на нижнем энергетическом уровне место заполняется (как выгодное положение) электроном с более высокого энергетического уровня. При переходе электрон отдает некоторое количество энергии, которое соответствует энергетической разности между уровнями. В результате электронных переходов возникает характерное излучение. По спектральным линиям поглощаемого (излучаемого) света можно сделать количественное заключение об энергетических уровнях атома.

В соответствии с квантовой моделью атома Бора электрон, имеющий определенное энергетическое состояние, движется в атоме по круговой орбите. Электроны с одинаковым запасом энергии находятся на равных расстояниях от ядра, каждому энергетическому уровню отвечает свой набор электронов, названный Бором электронным слоем. Таким образом, по Бору электроны одного слоя двигаются по шаровой поверхности, электроны следующего слоя по другой шаровой поверхности. Все сферы вписаны одна в другую с центром, отвечающим атомному ядру.

6. КВАНТОВО-МЕХАНИЧЕСКОЕ ОБЪЯСНЕНИЕ СТРОЕНИЯ АТОМА

6.1. Орбитальная модель атома

Современные квантово-механические представления о строении электронной оболочки атома исходят из того, что движение электрона в атоме нельзя описать определенной траекторией. Можно рассматривать лишь некоторый объем пространства, в котором находится электрон. Поскольку электрон обладает одновременно свойствами частицы и волны, то подходом к объяснению строения электронной оболочки может быть как корпускулярная теория, так и волновая теория, обе они приводят к одинаковому наглядному представлению, сформулированному как орбитальная модель атома. В учении о строении атома используются оба подхода, которые взаимно дополняют друг друга, в трактовке строения электронной оболочки атома и в объяснении механизма образования химической связи всегда нужно иметь в виду двойственный характер электрона, называемый корпускулярно-волновым дуализмом. Обоснование орбитальной модели атома, исходящее из корпускулярного характера электрона, состоит в следующем. Вероятность определенного положения электрона внутри объема пространства, окружающего атомное ядро, весьма велика, так как рассматривается устойчивое (реально существующее) состояние атома. Если статистически описать меняющееся место пребывания единственного электрона атома водорода в зависимости от расстояния электрона от атомного ядра, то получается что вероятность пребывания электрона в атомном ядре равна нулю, она незначительна вблизи ядра, но быстро возрастает при удалении от ядра. На некотором расстоянии вероятность достигает максимума, а затем медленно уменьшается, приближаясь к нулю на расстоянии, стремящемся к бесконечности (*рис. 4*). Таким образом, невозможно ограничить то пространство, в котором может находиться электрон, т. е. нельзя (без дополнительных условий) указать размеры атома.

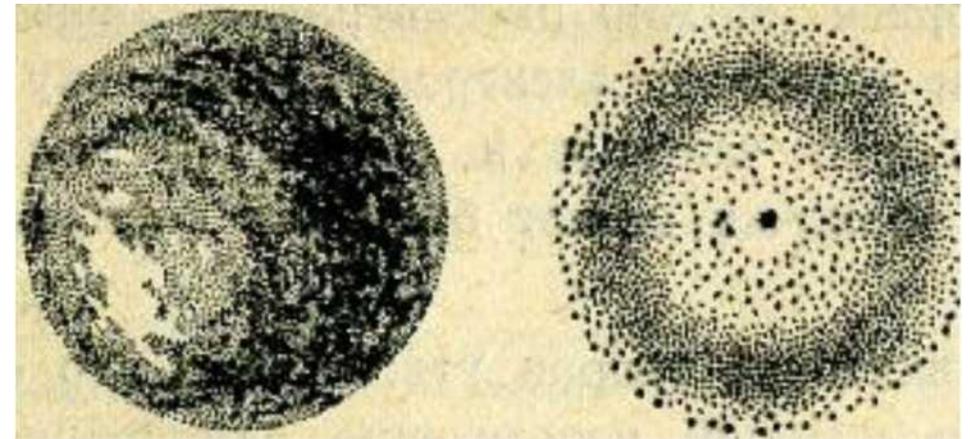
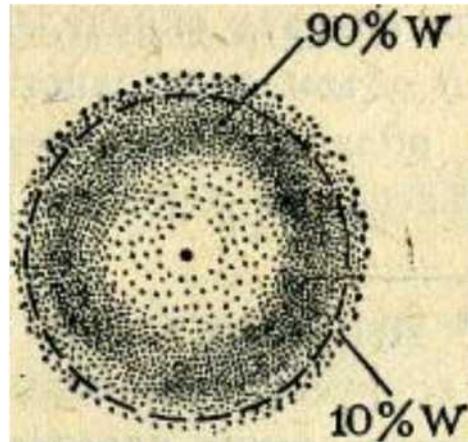


Рис. 4.

Квантово-механическое моделирование пространства, занимаемого одним атомом, основано на допущении, что достаточно ограничить вероятность пребывания электрона объемом, который составляет 90 % (или еще точнее, 95%) от полного объема пространства вокруг атома, занимаемого электроном. Такой объем пространства называется атомной орбиталью.

Из-за корпускулярно-волновой природы электрона всегда существует некоторая неопределенность в установлении его места пребывания в атоме. Поэтому понятие «орбиталь» не следует трактовать только как путь движения частицы (такое понятие принято для орбиты в теории Бора), но и как траекторию распространения волны. Нельзя утверждать, что электрон находится в некоторый момент времени в данной точке пространства, но можно говорить о 90 % -ой вероятности его пребывания в ограниченном объеме пространства, которое и есть атомная орбиталь.

6.2. Правила заполнения орбиталей.

Орбитальная модель атома водорода пригодна и для описания атома следующего элемента периодической системы элементов Д.И. Менделеева — атома гелия. При этом следует учитывать, что в соответствии с принципом Паули на каждой атомной орбитали может находиться не более двух электронов. Электрон заполняет пространство вокруг атомного ядра в форме сферически симметричного облака, представляющего собой атомную орбиталь. Если в атомной орбитали находится только один электрон (как в атоме водорода), то его обозначают как атомную орбиталь с одним электроном. Если же в атомной орбитали находится два электрона (как в атоме гелия), то ее обозначают как атомную орбиталь, полностью заселенную атомной орбитали. Полузаселенные АО играют важнейшую роль в формировании химической связи между атомами. Орбитальное представление о строении атома позволяет объяснить многие свойства веществ, которые не могут быть объяснены в рамках классической модели атома. Орбитальное представление о строении атома является основой для построения квантовой теории атома. Орбитальное представление о строении атома является основой для построения квантовой теории атома. Орбитальное представление о строении атома является основой для построения квантовой теории атома.

связей.

В соответствии с квантово-механическим описанием состояния электрона в атоме, каждый электрон является индивидуальной частицей. Такие его свойства, как масса и заряд не выявляют различий между электронами, особенно между теми электронами, которые находятся на одной атомной орбитали (как в атоме гелия). Собственной характеристикой каждого электрона в атоме является спин.

Два электрона, находящиеся в одной атомной орбитали, различаются по

Спи́ну - квантово-механическое свойство электрона, которое невозможно точно объяснить с помощью традиционных представлений. Без учета волновых свойств электрона спин можно интерпретировать путем сравнения электрона с шаром, вращающимся вокруг выбранной оси. Спин характеризует направление вращения и, следовательно, при двух возможных направлениях механического вращения должно существовать два разных спина электрона.

Спин - неотъемлемая характеристика электрона в атоме; два электрона на одной атомной орбитали обладают антипараллельными спинами.

Атомную орбиталь удобно изображать в виде квадрата, называемого квантовой ячейкой, а каждый электрон - вертикальной стрелкой, обозначающей один из двух возможных спинов электрона. Квантовая ячейка с одной стрелкой означает полузаселенную орбиталь, с двумя стрелками - полностью заселенную орбиталь, без стрелок - вакантную орбиталь.

6.3. Орбитали с s-электронами (атомные s-орбитали)

Атомную орбиталь, имеющую шаровую симметрию, принято обозначать как s-орбиталь а находящиеся в ней электроны - как s-электроны.

На каждом энергетическом уровне в атоме имеется только одна s-орбиталь, которая включает (при максимальном ее заселении) два s-электрона.

Радиус атомной s-орбитали возрастает при увеличении номера энергетического уровня; 1s расположена внутри 2s, последняя внутри 3 s и т. д. с центром, отвечающим атомному ядру (рис. 5). В целом строение электронной оболочки атома в орбитальной модели представляется слоистым, Каждый энергетический уровень, содержащий электроны, геометрически рассматривается как электронный слой, хотя это понятие обычно более применимо в рамках модели Бора.

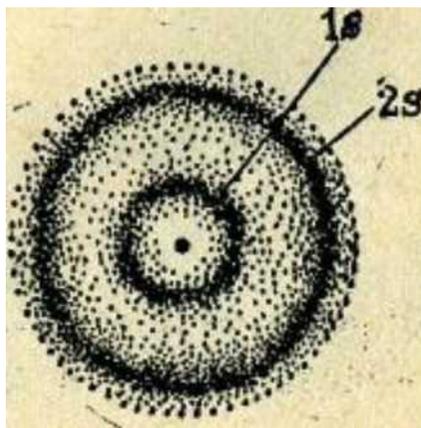


Рис. 5.

Для сокращенного обозначения электрона, занимающего атомную s-орбиталь, используется обозначение самой s-АО (приведенное выше) с верхним цифровым индексом, указывающим число электронов. Например, $1s^1$ - обо значение единственного электрона атома водорода. Номер энергетического уровня отвечает главному квантовому числу, а вид орбитали - орбитальному квантовому числу.

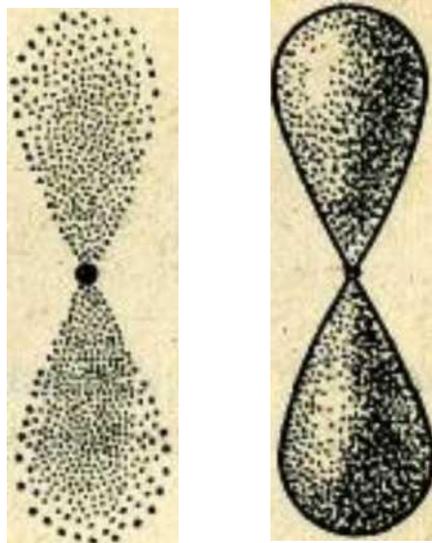
Электронное строение атома водорода изображается следующим образом: $1s^1$, гелия - $1s^2$, лития - $1s^2 2s^1$, бериллия - $1s^2 2s^2$.

Представленная запись строения электронной оболочки атома называется электронной формулой атома. Электронная формула в сочетании с энергетической диаграммой электронной оболочки атома отражают его электронную конфигурацию.

6.4. Орбитали с p-электронами (атомные p-орбитали)

На втором энергетическом уровне атомов, наряду с s-АО, появляются другие атомные орбитали, геометрическая форма которых показана на *рис.*

6



a

б.

Рис. 6.

Объем пространства с 90%-ой вероятностью пребывания в орбитали этого вида состоит из двух половин, расположенных симметрично относительно выбранной оси вращения. Ось расположена в вертикальной плоскости, отделяющей половины объема друг от друга и называемой узловой плоскостью (на рис. 5 ось изображена в виде точки).

Атомную орбиталь, имеющую вращательную (осевую) симметрию принято обозначать как p- орбиталь, а находящиеся в ней электроны это p- электроны.

Каждая атомная p- орбиталь может принять (при максимальном заполнении) два электрона, подобно любой другой АО. Эти электроны сообща

занимают обе половины p- орбитали (представление о том, что каждая половина p-АО содержит 1e, является ложным). На каждом атомном энергетическом уровне (кроме первого) имеется три атомных орбитали, которым отвечает максимальное заселение шестью электронами.

Все три p-АО одного энергетического уровня отличаются друг от друга пространственным расположением; их собственные оси, проходящие через обе половины орбитали и перпендикулярные ее узловой плоскости, образуют систему декартовых координат (обозначения собственных осей x, y, z). По этому на каждом энергетическом уровне имеется набор трех атомных p- орбиталей: p_x-, p_y- и p_z-АО. Буквы x, y и z соответствуют магнитному квантовому числу, позволяющему судить о влиянии внешнего магнитного поля на электронную оболочку атома.

В геометрическом представлении три атомные p-орбитали одного энергетического уровня (одного электронного слоя) пронизывают друг друга. В первом приближении граничную поверхность p-АО изображают в виде двух симметрично расположенных лепестков (гантелеобразная форма, рис. 5). С учетом такого приближения взаимное расположение трех p-АО одного энергетического уровня атома показано на рис. 7.

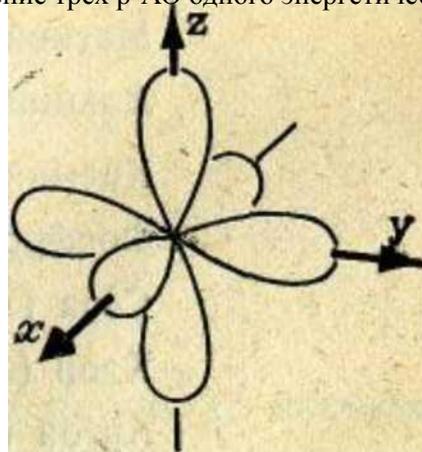


Рис. 7.

В атомной модели Бора - Зоммерфельда p-электроны совершают движение по эллиптическим орбитам; оси трех атомных p-орбит в этой модели соответствуют большим осям эллипсов.

В ряду элементов, составленном по возрастанию порядкового номера, p-электрон впервые появляется у элемента бора. Заполнение трех pАО второго энергетического уровня у атомов элементов от бора до неона протекает в соответствии с записью: Бор - $1s^2 2s^2 2p^1$, углерод- $1s^2 2s^2 2p^2$, азот - $1s^2 2s^2 2p^3$, ..., неон - $1s^2 2s^2 2p^6$. СЛ 6(1).

Заполнение 3 s- и 3p- АО протекает идентично заселению второго энергетического уровня (рис. 7 СЛ. 7).

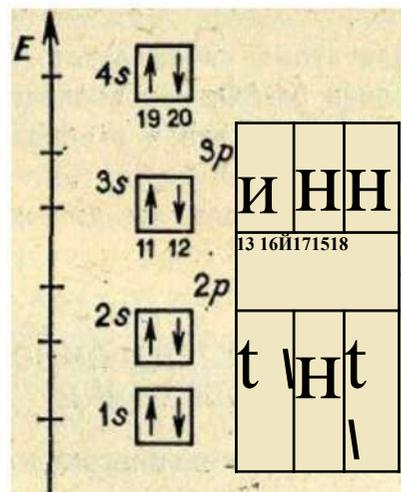


рис. 8

6.5. Орбитали с d- f-электронами

Атомные s-орбитали имеются на всех энергетических уровнях, атомные p-орбитали - на всех уровнях, кроме первого. На третьем и последующих энергетических уровнях к одной s-АО и трем p-АО присоединяется пять атомных орбиталей, получивших название d-орбиталей, а на четвертом и последующих уровнях — еще семь атомных орбиталей, называемых f-орбиталями.

Граничные поверхности d- и f- АО отличаются большим разнообразием и очень сложны для наглядного изображения; пример одной из форм d-АО, так называемой четырехлепестковой розетки, показан на *рис. 9*.

Пять d-АО и семь f-АО одного энергетического уровня отличаются друг от друга не т

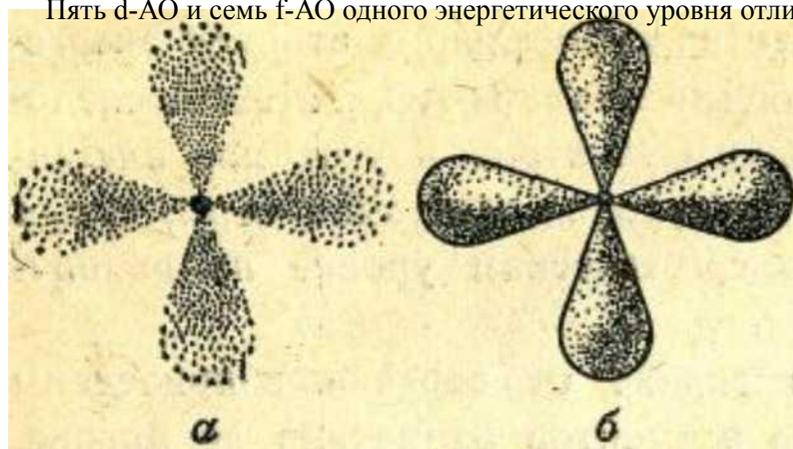


Рис. 9.

олько по форме, но и по геометрическому расположению в пространстве, что передается различными значениями магнитного квантового числа, как и для трех p-АО. Каждая d-АО и f-АО может принять два электрона, следовательно, все d-АО одного энергетического уровня будут заполнены десятью, а все f-АО - четырнадцатью электронами.

Первый элемент, в атоме которого появляется d-электрон, - скандий, в атомах следующих элементов продолжается заполнение пяти 3d-АО электронами, которое заканчивается у цинка.

7. ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ ПОДУРОВНИ МНОГОЭЛЕКТРОННОГО АТОМА, КВАНТОВЫЕ ЧИСЛА

Квантово-механические расчеты показывают, что в многоэлектронных атомах энергия электронов одного уровня неодинакова, электроны заполняют атомные орбитали разных видов и имеют разную энергию. Каждый энергетический уровень, кроме первого, расщепляется на такое число энергетических подуровней, сколько видов орбиталей включает этот уровень. Второй энергетический уровень расщепляется на два подуровня (2s и 2p-подуровни), третий энергетический уровень - на три подуровня (3s, 3p- и 3d-подуровни) и т. д. Расщепление второго, третьего и четвертого энергетических уровней показано на *рис. 10*.

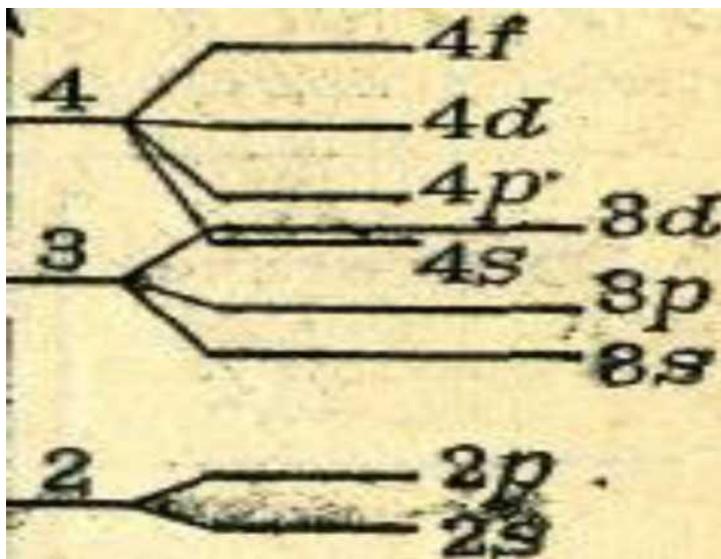


Рис. 10.

Каждый s-подуровень содержит одну s-АО, каждый p-подуровень - три p-АО, каждый d-подуровень - пять d-АО и каждый f-подуровень - семь f-АО.

Энергетический уровень характеризуется главным квантовым числом n . Для всех известных элементов значения n изменяются от 1 до 7. Электроны в многоэлектронном атоме, находящемся в основном (невозбужденном) состоянии, занимают энергетические уровни от первого до седьмого.

Энергетический подуровень характеризуется орбитальным квантовым числом l . Для каждого уровня ($n = \text{CONST}$) квантовое число l принимает все целочисленные значения от 0 до $(n - 1)$, например, при $n = 3$ значениями l будут 0, 1 и 2. Орбитальное квантовое число определяет геометрическую форму орбиталей.

Закономерность заполнения электронных оболочек атомов определяется принципом запрета, установленным в 1925 г. швейцарским физиком Паули (принцип запрета Паули): в атоме не могут одновременно находиться два электрона в тождественных состояниях.

Два электрона, занимающие в атоме разные энергетические уровни и подуровни, находятся в различных квантово-механических состояниях. Различие электронов, занимающих разные атомные орбитали одного подуровня ($n = \text{CONST}$), кроме s-подуровня, характеризуется магнитным квантовым числом m_l . Это число называется магнитным, поскольку оно характеризует поведение электронов во внешнем магнитном поле. Если значение l определяет геометрическую форму атомных орбиталей подуровня, то значение квантового числа устанавливает взаимное пространственное расположение этих орбиталей.

Магнитное квантовое число m_l в пределах данного подуровня принимает все целочисленные значения от +1 до -1, включая нуль. Для s-подуровня $m_l = 0$.

Для p-подуровня m_l может принимать три значения +1, 0, -1.

Таким образом, каждая атомная орбиталь однозначно определяется тремя квантовыми числами.

Сочетание трех квантовых чисел, характеризующих конкретную атомную орбиталь, выбирается из ансамбля всех возможных значений квантовых чисел.

В виду того, что каждая орбиталь может максимально заполняться двумя электронами, число электронов, которое может разместиться на каждом энергетическом уровне и подуровне, вдвое больше числа орбиталей на данном уровне или подуровне. Поскольку электроны, находящиеся в одной атомной орбитали, имеют одинаковые значения квантовых чисел n , l и m_l , то для отличия двух электронов--на одной орбитали используется четвертое, спиновое квантовое число m_s , которое определяется спином электрона. В соответствии с принципом Паули можно утверждать, что каждый электрон в атоме однозначно характеризуется своим набором четырех квантовых чисел.

Заселение электронами энергетических уровней, подуровней и атомных орбиталей подчиняется следующему правилу: в невозбужденном атоме все электроны обладают наименьшей энергией.

Заполнение атомных орбиталей внутри одного энергетического подуровня происходит в соответствии с правилом, сформулированным немецким физиком Ф. Хундом (1927 г.) (правило Хунда): атомные орбитали, принадлежащие к одному подуровню, заполняются каждая вначале одним электроном, а затем происходит их заполнение вторыми электронами.