

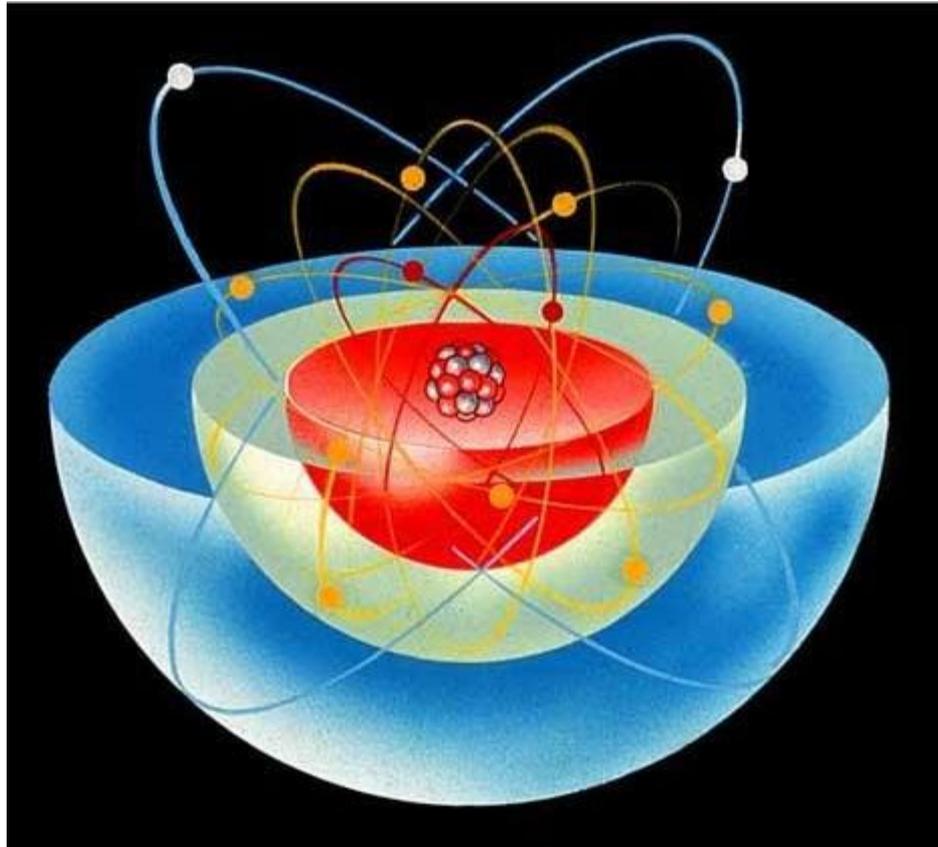
Лекция 3

Строение атома

Рассматриваемые вопросы:

1. Корпускулярно-волновой дуализм. Уравнение де Бройля.
2. Принцип неопределенности Гейзенберга.
3. Понятие об атомной орбитали.
4. Уравнение Шредингера — основное уравнение квантовой механики.
5. Квантовые числа электрона.
6. Правила заполнения электронных орбиталей.
7. Составление электронных конфигураций атомов и ионов.
8. Свойства атомов.

Квантовая механика — это область физики, которая математически описывает состояние в атоме электронов и других субмикроскопических частиц.



Корпускулярно-волновой дуализм

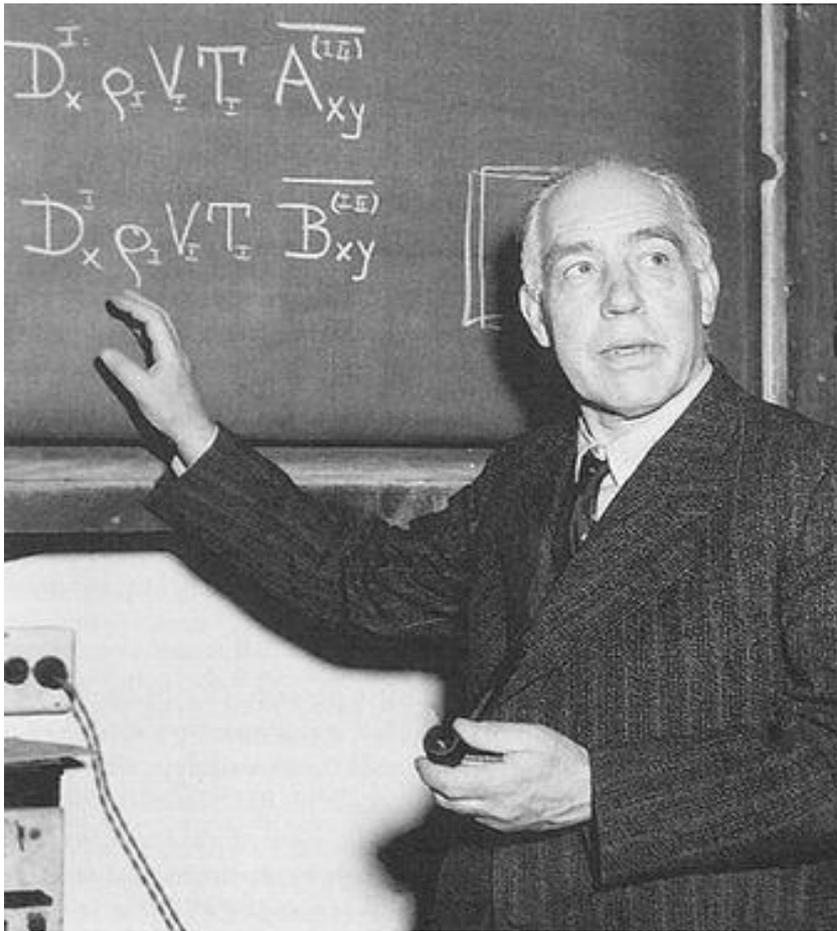


Луи де Бройль
(1892 - 1987)

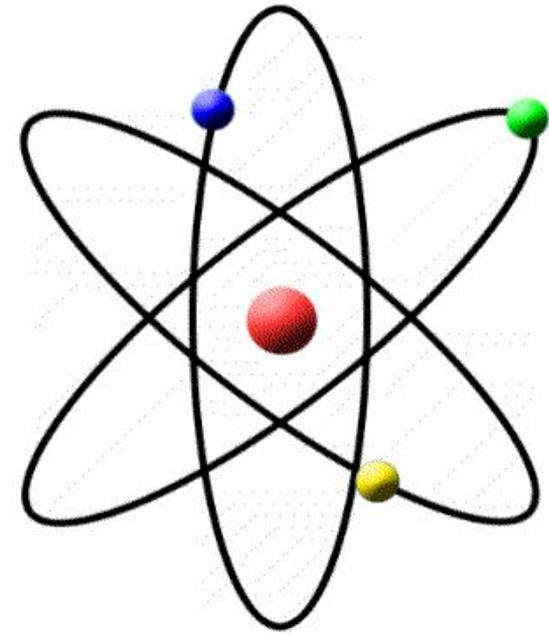
Гипотеза Л. де Бройля:
Каждой частице с определенным
импульсом соответствует волновой
процесс с длиной волны:

$$\lambda = \frac{h}{mv}$$





**Нильс Бор
(1885 - 1962)**



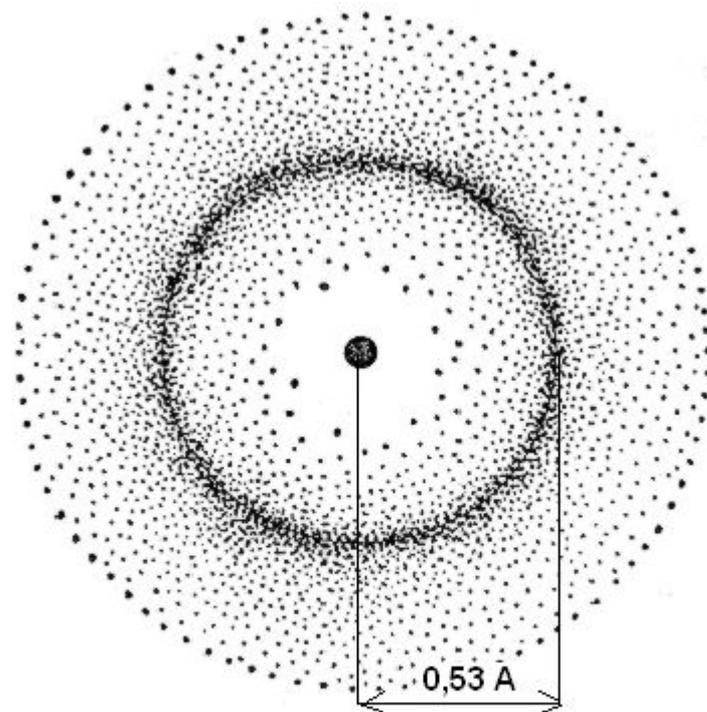
Принцип неопределенности Гейзенберга



**Вернер Гейзенберг
(1901 - 1976)**

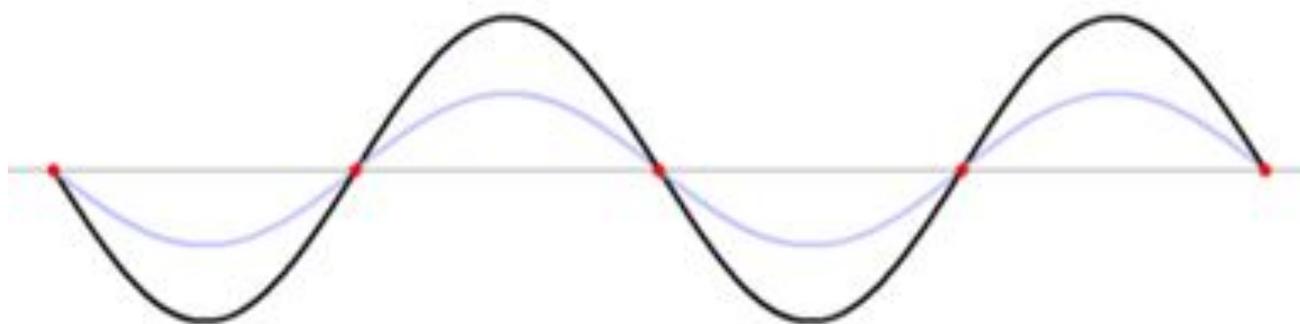
Невозможно одновременно точно определить положение микрочастицы (её координаты) и её количество движения (импульс) (1927 г).

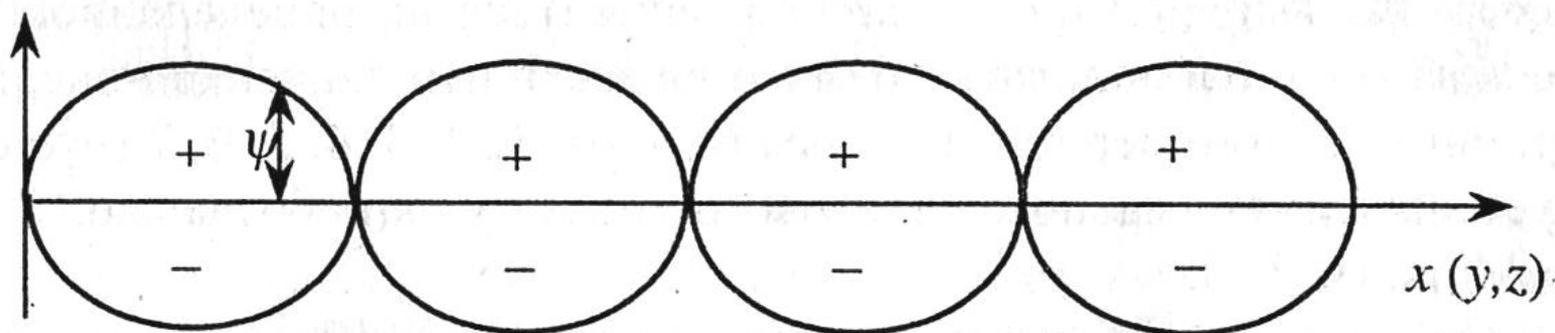
$$\Delta x \Delta V \geq \frac{\hbar}{m}$$



Электронное облако
водорода с неравномерной
плотностью

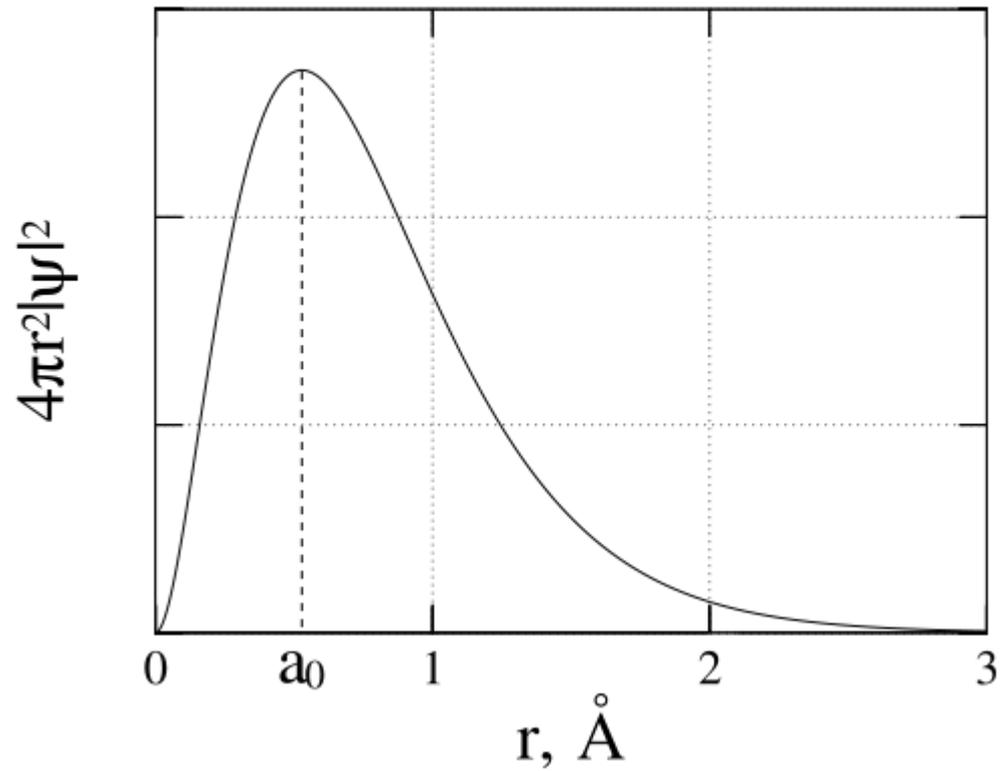
Пространство вокруг ядра, в котором наиболее вероятно нахождение электрона, называется орбиталью.





Стоячая волна:

ψ – амплитуда волны, x, y, z – пространственные координаты.



**Вероятность обнаружения электрона на
различном расстоянии от ядра.**



Эрвин Шредингер (1887 — 1961)

Австрийский физик-теоретик,
один из основателей квантовой
механики

Уравнение Шредингера:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2} (E - U) \psi = 0$$

где m — масса электрона, h — постоянная Планка, E — общая энергия электрона, U — потенциальная энергия электрона.

Квантовые числа

Главное квантовое число n

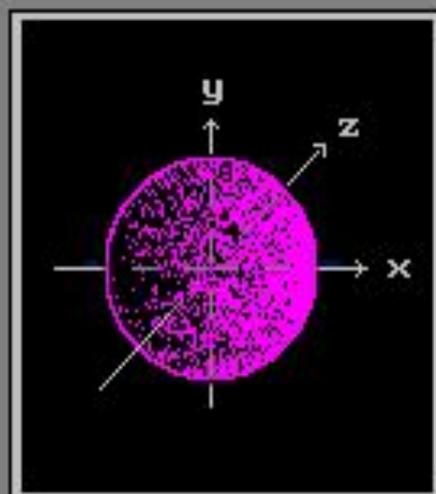
- характеризует общий запас энергии электрона: чем больше n , тем дальше электрон от ядра, тем больше его энергия;
- показывает число энергетических уровней в атоме;
- принимает значения от 1 до ∞

Квантовые числа

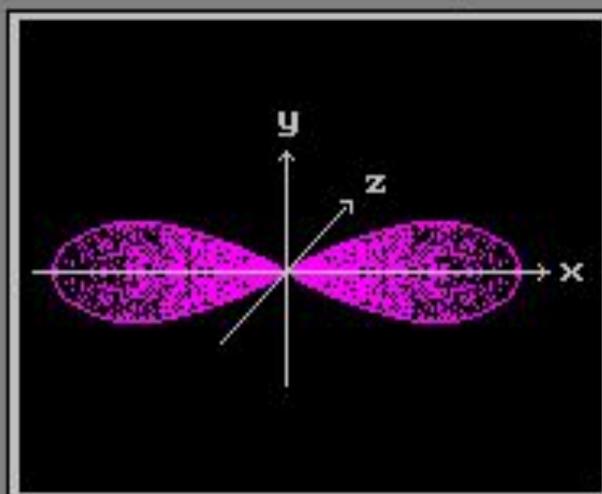
Орбитальное квантовое число l

- определяет момент количества движения электрона;
- характеризует пространственную форму орбиталей;
- показывает число подуровней на энергетическом уровне в атоме;
- принимает значения от 0 до $(n-1)$

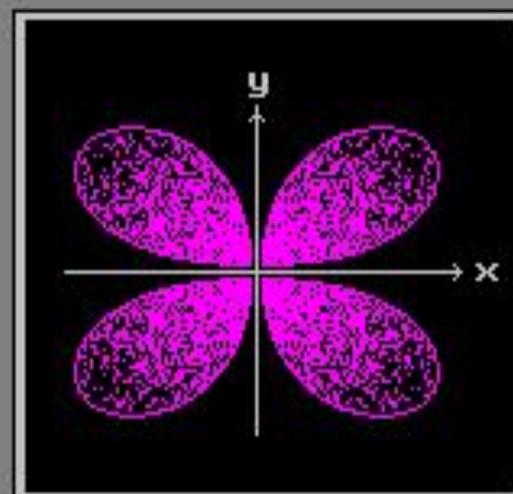
Типы атомных орбиталей



s -орбиталь



p_x -орбиталь

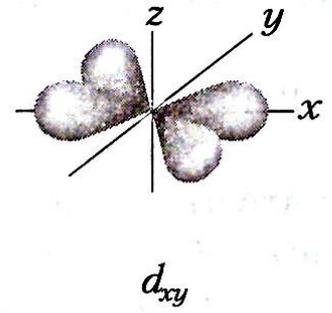
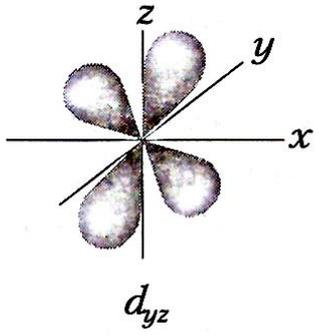
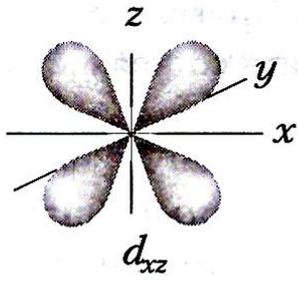
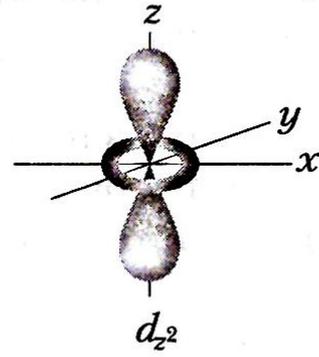
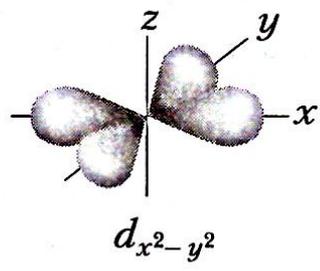
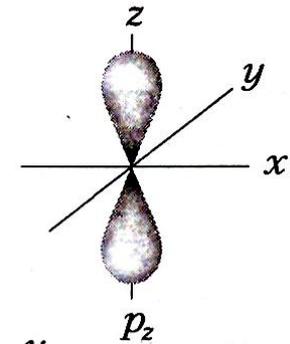
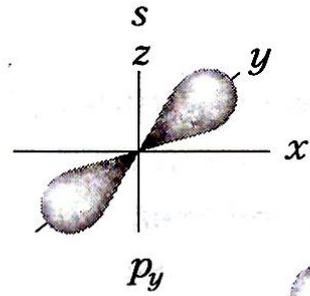
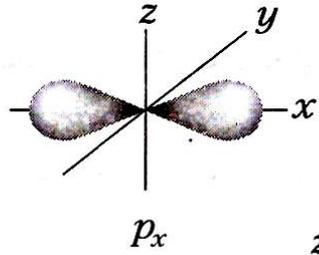
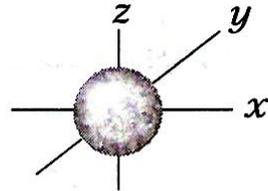


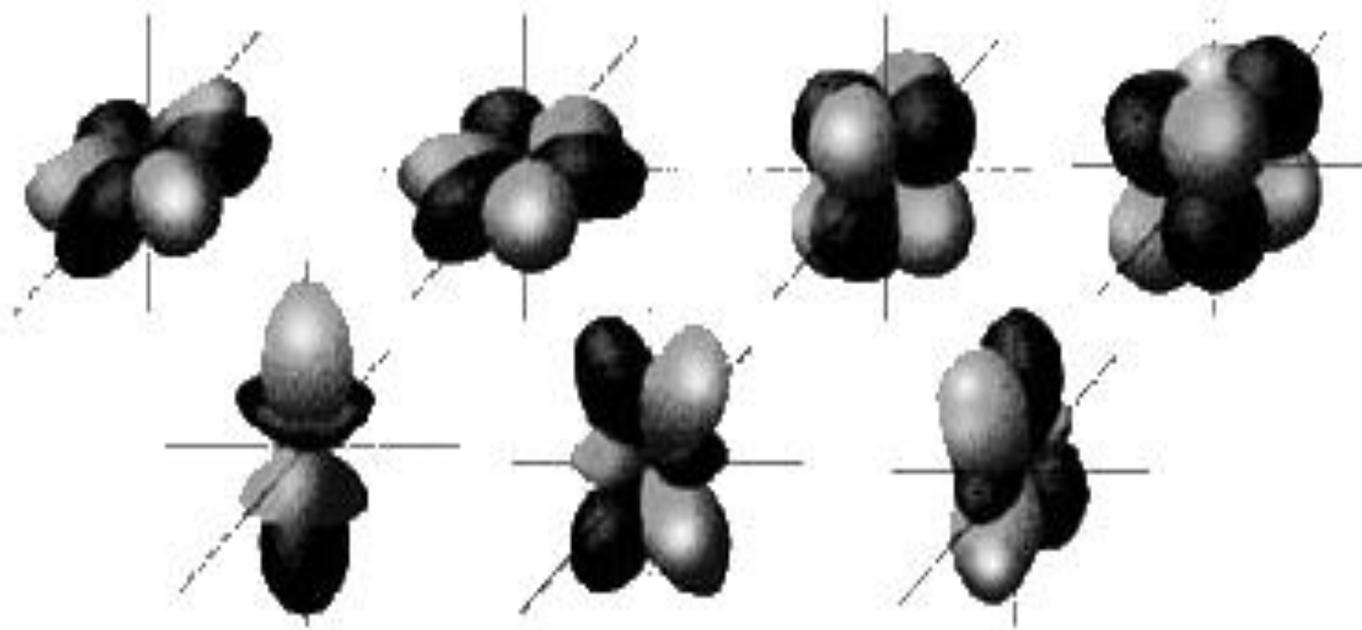
d_{xy} -орбиталь

Квантовые числа

Магнитное квантовое число m_l

- определяет пространственное расположение атомных орбиталей в пространстве;
- показывает число орбиталей на подуровне;
- принимает значения $\{-l \dots +l\}$, то есть $(2l+1)$ значений





Т а б л и ц а 3.1. Квантовые числа, атомные орбитали и число электронов на подуровнях (для $n \leq 4$)

n	l	Обозначение орбитали	m_l	Число орбиталей	Число электронов на подуровне
1	0	1s	0	1	2
2	0	2s	0	1	2
	1	2p	-1, 0, +1	3	6
3	0	3s	0	1	2
	1	3p	-1, 0, +1	3	6
	2	3d	-2, -1, 0, +1, +2	5	10
4	0	4s	0	1	2
	1	4p	-1, 0, +1	3	6
	2	4d	-2, -1, 0, +1, +2	5	10
	3	4f	-3, -2, -1, 0, +1, +2, +3	7	14

Максимальное число электронов на подуровне: $2(2l+1)$

Максимальное число электронов на уровне: $2n^2$

Квантовые числа

Спиновое квантовое число m_s

- квантово-механическое свойство электрона — проекция спина на ось z;
- принимает только два значения: $-1/2$ и $+1/2$

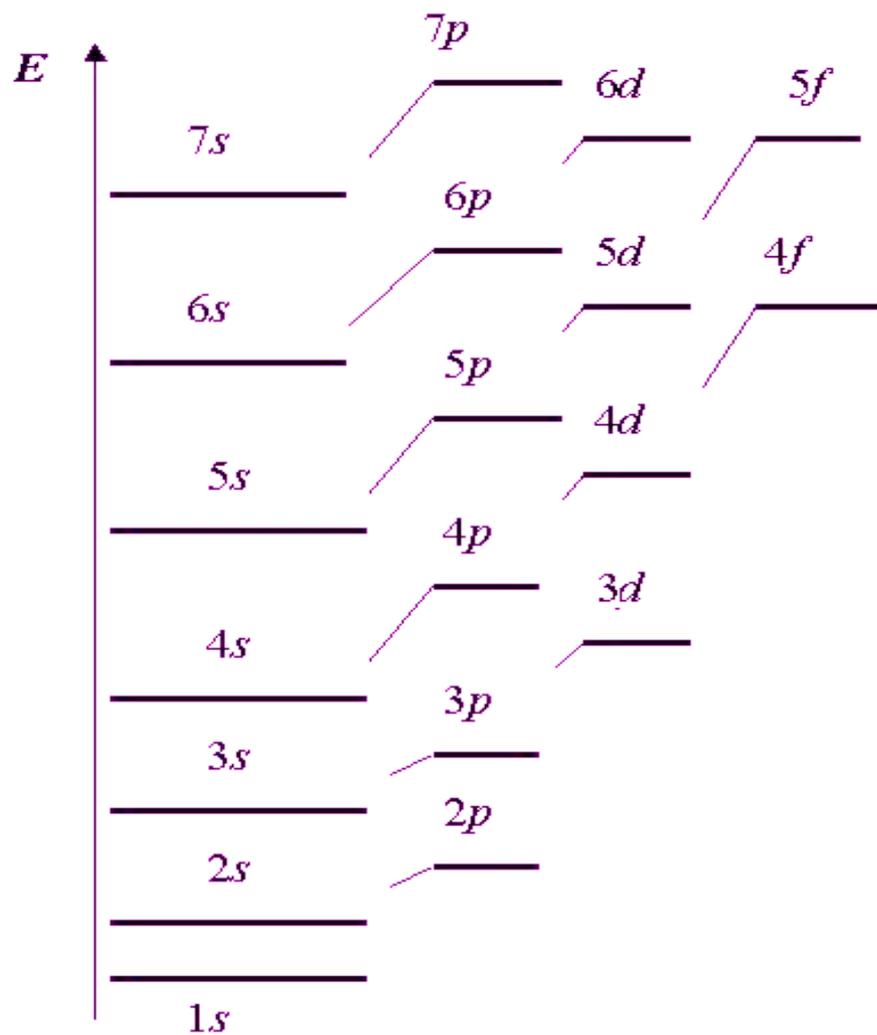
**Четыре квантовых числа описывают состояние
электрона в атоме и характеризуют:**

- энергию электрона;**
- спин;**
- форму электронного облака;**
- ориентацию облака в пространстве.**

Правила заполнения электронных орбиталей.

Принцип наименьшей энергии: в первую очередь электроны заполняют орбитали, подуровни и уровни с самой низкой энергией.

Энергетическая последовательность заполнения подуровней:



$1s < 2s < 2p < 3s < 3p < 4s < 3d <$
 $< 4p < 5s < 4d < 5p < 6s <$
 $< 5d \approx 4f < 6p < 7s < 6d \approx 5f < 7p$

Правила заполнения электронных орбиталей.

Правило Гунда: в пределах подуровня электроны располагаются на орбиталях так, чтобы их суммарный спин был максимальным.

Наиболее стабильное состояние подуровней:

- полностью заполнены: s^2 , p^6 , d^{10} , f^{14}
- наполовину заполнены: p^3 , d^5 , f^7
- полностью пусты: s^0 , p^0 , d^0 , f^0

Правила заполнения электронных орбиталей.

Принцип Паули (или запрет Паули): в атоме не может быть двух электронов с одинаковым набором всех четырех квантовых чисел.

Следовательно:

- на орбитали может быть не более двух электронов;
- спины этих электронов должны быть разнонаправлены.

Правило Клечковского: вначале заселяется подуровень с меньшей суммой главного и орбитального квантовых чисел $(n+l)$.

В случае равенства сумм заселяется подуровень с меньшим n .

**Спасибо
за внимание!**