

# **СТРОЕНИЕ АТОМА**

# КВАНТОВАЯ ТЕОРИЯ СТРОЕНИЯ АТОМА

---

□ В основе лежат положения:

1. Электрон имеет двойственную (корпускулярно-волновую) природу, т.е. может вести себя и как частица (имеет массу и заряд), и как волна (способность к дифракции).

- 
- Длина волны электрона определяется соотношением Де Бройля:

$$\lambda = h / (m u)$$

$\lambda$  – длина волны в см (м);

$h$  – постоянная Планка ( $6,63 \cdot 10^{-34}$  Дж · с)

$m$  – масса частицы в г (кг);

$u$  – скорость частицы в см/с (м/с).

- Гипотеза де Бройля получила экспериментальное подтверждение для малых частиц (электронов, нейтронов).

---

2. Для электрона невозможно одновременно точно измерить координату и скорость.

3. Электрон в атоме не движется по определенным траекториям, а может находиться в любой части около ядерного пространства. Пространство вокруг ядра, в котором вероятность нахождения электрона велика, называется орбиталью.

---

4. Ядра атомов состоят из протонов и нейтронов (нуклоны).

Заряд протона равен по величине и противоположен по знаку заряду электрона; масса его равна приблизительно одной а.е.м.

Нейтрон – незаряженная частица с массой, приблизительно равной массе протона.

- 
- Различные виды атомов имеют общее название – нуклиды. Их можно характеризовать любыми двумя числами из трех фундаментальных параметров:

A – массовое число

Z – заряд ядра, равный числу протонов

N – число нейтронов в ядре

---

□ Связь между ними:

$$Z = A - N$$

$$N = A - Z$$

$$A = Z + N$$

Нуклиды с одинаковым  $Z$ , но разными  $A$  и  $N$  называются изотопами.

- 
- Появление гипотезы де Бройля открыло принципиальную возможность описывать электрон в атоме уже не как частицу, а как волну. Это в 1926 году сделал австрийский физик Э. Шредингер.
  - Он применил к электрону в атоме математический аппарат, описывающий движение волны в трехмерном пространстве.

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2} \left( E + \frac{e^2}{r} \right) \psi = 0$$

- где:  $\delta^2$ - дифференциальный оператор, представляющий собой сумму вторых частных производных по соответствующим координатам,  $m$  - масса покоя электрона,  $E$  - полная энергия электрона,  $U = e^2/r$  - потенциальная энергия электрона.

- 
- Решение уравнения Шредингера приводит к необходимости ввести постоянные величины, называемые квантовыми числами.

---

$n$  – главное квантовое число;

$l$  - орбитальное квантовое число;

$m$  – магнитное квантовое число;

$s$  – спиновое квантовое число.

# ГЛАВНОЕ КВАНТОВОЕ ЧИСЛО

---

- Характеризует общий запас энергии и возможные энергетические состояния электрона в атоме. Принимает целые значения от 1 до бесконечности.
- Наименьшей энергией обладает электрон с  $n = 1$ . С увеличением значения главного квантового числа  $n$  энергия электрона возрастает.
- Электроны в атоме образуют электронные слои или энергетические уровни, которым соответствует определенное значение  $n$ .

- Электроны внешнего энергетического уровня обладают максимальным запасом энергии и наименьшей связью с ядром.
- Максимальное число электронов, которое может находиться на том или ином уровне, определяется по формуле:

$$N = 2n^2$$

где  $N$  - максимальное число электронов на уровне;  $n$  – номер энергетического уровня.

- На внешнем энергетическом уровне может находиться не более восьми электронов, а на первом - не более двух.

# Орбитальное квантовое число - l

---

- Электроны одного и того же уровня могут различаться значениями энергии, образуя энергетические подуровни.
- Орбитальное квантовое число (его также называют побочным или азимутальным) характеризует запас энергии электрона на энергетическом подуровне и форму электронного облака, которая, как и энергия, не может быть произвольной.

Электроны, находящиеся на соответствующих подуровнях, называют *s*-, *p*-, *d*-, *f*- электронами.

<b>n</b>	<b>l</b>	<b>Обозначение подуровня</b>
<b>1</b>	<b>0</b>	<b>1s</b>
<b>2</b>	<b>0, 1</b>	<b>2s, 2p</b>
<b>3</b>	<b>0, 1, 2</b>	<b>3s, 3p, 3d</b>
<b>4</b>	<b>0, 1, 2, 3</b>	<b>4s, 4p, 4d, 4f</b>

- 
- Таким образом, энергетический подуровень – это совокупность электронных состояний, характеризующихся определенным набором квантовых чисел  $n$  и  $l$ .
  - Такое состояние электрона, соответствующее определенным значениям  $n$  и  $l$ , записывается в виде цифрового и буквенного обозначения, например,  $4p$  ( $n = 4, l = 1$ );  $5d$  ( $n = 5, l = 2$ ).

---

## Магнитное квантовое число - $m$

- Положение (ориентация) электронного облака в пространстве определяется значением магнитного квантового числа. Оно зависит от орбитального квантового числа и может принимать целочисленные значения от  $-l$  до  $+l$ , включая 0.
- Число орбиталей с данным значением  $l$  равно  $(2l + 1)$ . Эти орбитали различаются только значением магнитного квантового числа ( $m_l$ ):

---

<b>Энергетический подуровень</b>	<b><math>m_l</math></b>	<b>Число орбиталей в подуровне</b>
<b>s (<math>l = 0</math>)</b>	<b>0</b>	<b>1</b>
<b>p (<math>l = 1</math>)</b>	<b>-1, 0, 1</b>	<b>3</b>
<b>d (<math>l = 2</math>)</b>	<b>-2, -1, 0, 1, 2</b>	<b>5</b>
<b>f (<math>l = 3</math>)</b>	<b>-3, -2, -1, 0, 1, 2, 3</b>	<b>7</b>

# СПИНОВОЕ КВАНТОВОЕ ЧИСЛО - $s$

---

Спиновое квантовое число может принимать, следовательно, только два значения и в квантовой механике они приняты такими:  $s = +1/2$  и  $s = -1/2$ .

# ЗАПОЛНЕНИЕ АТОМНЫХ ОРБИТАЛЕЙ ЭЛЕКТРОНАМИ

---

- Распределение электронов в атомах элементов определяется тремя основными положениями: принципом Паули, принципом наименьшей энергии (правила Клечковского) и правилом Хунда.

Принцип Паули → В атоме не может быть электронов с одинаковым набором всех четырех квантовых чисел. Из принципа Паули следует, что на одной орбитали не может находиться более двух электронов, причем они должны иметь разные спины.

Максимальная емкость энергетического подуровня -  $2(2l+1)$  электронов, а уровня -  $2n^2$ .

- 
- Правило Хунда → на каждом подуровне сумма спинов электронов должна быть максимальной по абсолютному значению (модулю).
  - Иными словами, электроны сначала заполняют вакантные орбитали по одному (суммарный спин электронов на одинаковых АО стремится к max).

# Принцип наименьшей энергии

---

- *Электрон всегда занимает орбиталь с наименьшей энергией.*
- *Последовательность заполнения атомных электронных орбиталей в зависимости от значений главного и орбитального квантовых чисел, была исследована В.М. Клечковским, который установил, что энергия электрона возрастает по мере увеличения суммы этих двух квантовых чисел ( $n+l$ ). В соответствии с этим было сформулировано два правила Клечковского.*

- 
- **Первое правило Клечковского:** при увеличении заряда ядра атома последовательное заполнение электронных орбиталей происходит от орбиталей с меньшим значением суммы главного и орбитального квантовых чисел ( $n + l$ ) к орбиталям с большим значением этой суммы.
  - Например, запас энергии на подуровне  $4s$  меньше, чем на  $3d$ .

□ **Второе правило Клечковского:** при одинаковых значениях суммы главного и орбитального квантовых чисел ( $n+l$ ) заполняется подуровень с меньшим значением главного квантового числа.

□ Подуровни 3d, 4p, 5s.

$$3d \quad n+l = 3+2 = 5$$

$$4p \quad n+l = 4 + 1 = 5$$

$$5s \quad n+l = 5 + 0 = 5$$

Вначале заполняется 3d подуровень, затем 4p, после 5s подуровни.

# ЭНЕРГИЯ ОРБИТАЛЕЙ

---

