

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:

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

λ — 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: ∇^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.

n	l	Обозначение подуровня
1	0	1s
2	0, 1	2s, 2p
3	0, 1, 2	3s, 3p, 3d
4	0, 1, 2, 3	4s, 4p, 4d, 4f

-
- 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):

Энергетический подуровень	m_l	Число орбиталей в подуровне
s ($l = 0$)	0	1
p ($l = 1$)	-1, 0, 1	3
d ($l = 2$)	-2, -1, 0, 1, 2	5
f ($l = 3$)	-3, -2, -1, 0, 1, 2, 3	7

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

$$1s < 2s < 2p < 3s < 3p < 4s < 3d$$