

# Электронное строение атома

Лекция № 9

# Атом – химически неделимая электронейтральная частица

Атом состоит из атомного ядра и электронов

Атомное ядро образовано нуклонами – протонами и нейтронами

Частица	Символ	Масса в а.е.м.	Относительная масса	Относительный заряд
Протон	${}^1_1\text{p}$	1.0073	1	+1
Нейтрон	${}^1_0\text{n}$	1.0087	1.0014	0
Электрон	$e^-$	0.00055	0.00054	-1

\* Масса протона:  $1.673 \cdot 10^{-27}$  кг

\*\* Элементарный заряд:  $1.602 \cdot 10^{-19}$  Кл

# Основные понятия

Атомное ядро характеризуется **массовым числом**

$$A = Z + N$$

**Z** – число протонов (заряд)

**N** – число нейтронов

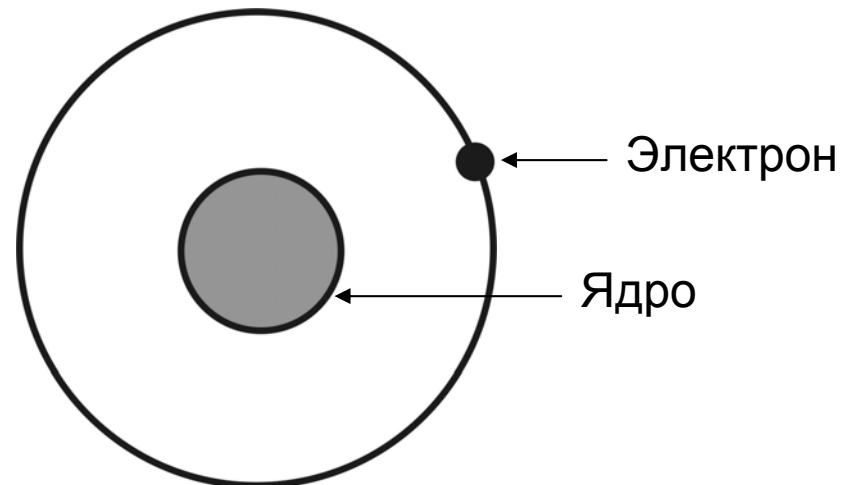
**A** – число нуклонов (массовое число)

Атомы с разными **A**, но одинаковыми **Z** называются **изотопами**

Примеры изотопов:  $^{10}\text{B}$ ,  $^{11}\text{B}$ ,  $^{12}\text{C}$ ,  $^{13}\text{C}$ ,  $^{14}\text{C}$ ,  $^{121}\text{Sb}$ ,  $^{123}\text{Sb}$ ,  $^{235}\text{U}$ ,  $^{238}\text{U}$ ,  $^{239}\text{U}$

Изотопно чистые элементы:  $^{19}\text{F}$ ,  $^{27}\text{Al}$ ,  $^{31}\text{P}$ ,  $^{55}\text{Mn}$ ,  $^{197}\text{Au}$ ,  $^{209}\text{Bi}$

*Модель атома водорода*



# Описание микромира: квантовая теория

Квантовая механика это система понятий, предназначенная для описания свойств микромира

Квантовая механика – математически корректная теория

*Предсказания квантовой теории сбываются с удивительной точностью*

Основные положения квантовой механики:

Энергия распространяется и передается не непрерывно, а порциями – **квантами**

$$E = h \cdot \nu$$

**$h = 6.63 \cdot 10^{-34}$  Дж·с (кг·м<sup>2</sup>/с):** постоянная Планка

# Описание микромира: квантовая теория

Движение микрочастиц имеет волновой характер

$$\lambda = h/(m \cdot v)$$

Частица материи является волной

Принцип неопределенности Гейзенберга:

Невозможно одновременно точно определить положение микрочастицы и ее количество движения

$$\Delta x \cdot \Delta(m \cdot v) \geq h/2\pi = 1.05 \cdot 10^{-34} \text{ Дж} \cdot \text{с}$$

Квантовая механика определяет **вероятность** нахождения микрочастицы в точке пространства

# Уравнение Шредингера

$$\frac{\hbar^2}{8\pi^2m} \nabla^2\Psi + (E-U)\Psi = 0$$

$E$  – полная энергия частицы с координатами  $x, y, z$

$U$  – потенциальная энергия частицы ( $x, y, z$ )

$\Psi$  – волновая функция: описывает волны вероятности

$\nabla$  – действующий на функцию оператор:

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\Psi}{\partial z^2}$$

# Уравнение Шредингера

Уравнение Шредингера описывает эволюцию волн вероятности (распространение волн!)

$|\Psi|^2$  – **вероятность** нахождения электрона в заданной точке пространства

Уравнение Шредингера имеет аналитическое решение только для атома **водорода и водородоподобных ионов**; для других атомов и ионов – приближенные решения

Решением уравнения Шредингера являются волновые функции  $\Psi_1, \Psi_2, \dots, \Psi_n$  и соответствующие им энергии  $E_1, E_2, \dots, E_n$

# Орбитали и квантовые числа

Волновая функция, являющаяся решением уравнения Шредингера, называется **орбиталью** – областью пространства, вероятность нахождения электрона в которой  $\geq 95\%$

Для описания орбитали требуются **3 квантовых числа**

**1.** Главное квантовое число **n**: определяет **энергию уровня**.

Для атома водорода:  $E = -13.6/n^2$  эВ (1 эВ =  $4.35 \cdot 10^{-18}$  Дж)

**n** принимает значения **1, 2, 3, ...,  $\infty$**  ( $E_{\infty} = 0$ )

**n** показывает затраты энергии при переходе с основного в возбужденное состояние или между возбужденными состояниями в атоме водорода:

$$E_{1-2} = (13.6/1^2 - 13.6/2^2) = 10.2 \text{ эВ}$$

$$E_{2-3} = (13.6/2^2 - 13.6/3^2) \approx 1.9 \text{ эВ}$$



# Орбитали и квантовые числа

2. Орбитальное квантовое число  $l$ :

определяет форму орбитали

$l$  соответствует

орбитальному моменту количества движения электрона:

$$M = (h/2\pi)\sqrt{l(l+1)}$$

$l$  принимает значения  $0, 1, \dots, (n-1)$

всего  $(n)$  значений

обозначение орбиталей:

$l = 0, 1, 2, 3, 4, \dots$

s, p, d, f, g, ...

# Орбитали и квантовые числа

## 3. Магнитное квантовое число $m_l$ :

определяет **пространственную ориентацию орбиталей**.

$m_l$  соответствует величине проекции орбитального момента количества движения электрона ( $M$ ) на направление  $r$  в пространстве:

$$M_r = (h/2\pi)m_l$$

$m_l$  принимает значения:  $-l, -l+1, \dots, 0, \dots, l-1, l$

всего  $(2l+1)$  значений

**!** Квантовые числа  $n$ ,  $l$  и  $m_l$  определяют **энергию, форму и пространственное расположение** орбиталей

# Орбитали и квантовые числа

$n$	$l$	$m_l$	Орбиталь	Число орбиталей
1	0	0	1s	1
2	0	0	2s	4
	1	-1, 0, 1	$2p_x, 2p_y, 2p_z$	
3	0	0	3s	9
	1	-1, 0, 1	$3p_x, 3p_y, 3p_z$	
	2	-2, -1, 0, 1, 2	$3d_{xy}, 3d_{xz}, 3d_{yz},$ $3d_{z^2}, 3d_{x^2-y^2}$	
4	0	0	4s	16
	1	-1, 0, 1	$4p_x, 4p_y, 4p_z$	
	2	-2, -1, 0, 1, 2	$4d_{xy}, 4d_{xz}, 4d_{yz},$ $4d_{z^2}, 4d_{x^2-y^2}$	
	3	-3, -2, -1, 0, 1, 2, 3	$4f_{x^3}, 4f_{y^3}, 4f_{z^3}, 4f_{x(y^2-z^2)},$ $4f_{y(z^2-x^2)}, 4f_{z(x^2-y^2)}, 4f_{xyz}$	

# Форма орбиталей

Сферическая форма:  
s-орбиталь

Форма p-орбиталей

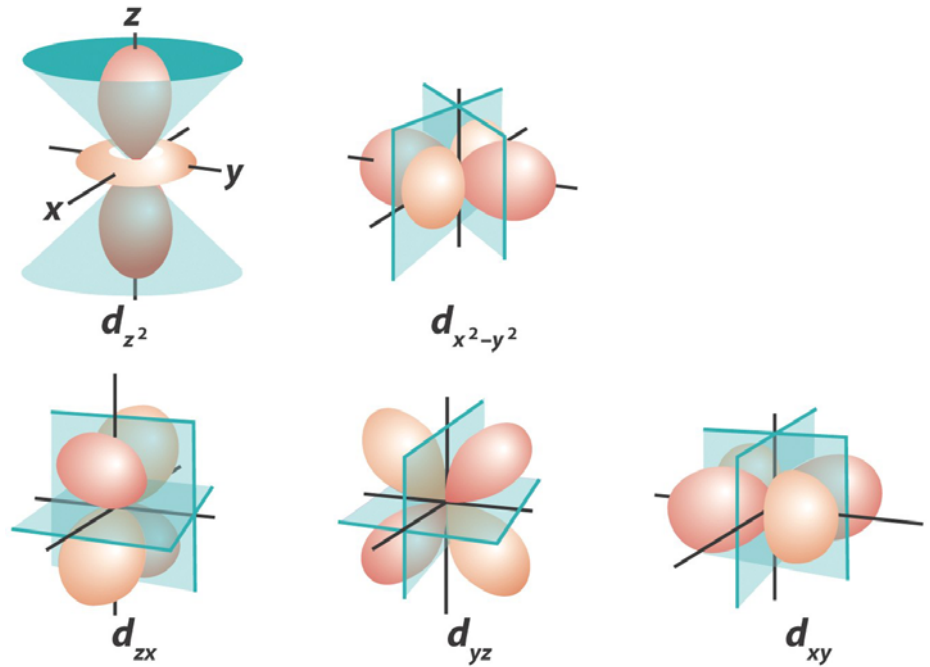
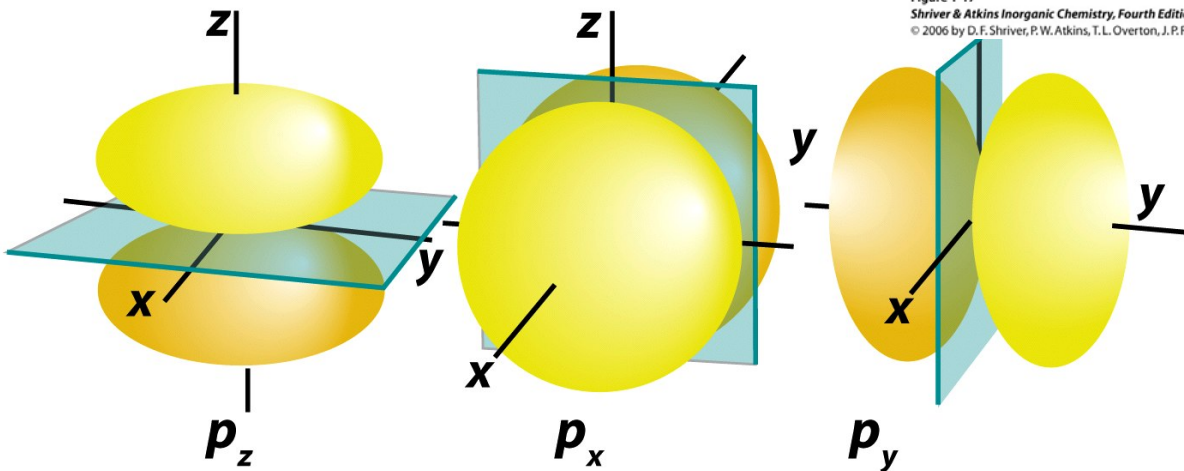


Figure 1-17  
Shriver & Atkins Inorganic Chemistry, Fourth Edition  
© 2006 by D. F. Shriver, P. W. Atkins, T. L. Overton, J. P. Rourke, M. T. Weller, and F. A. Armstrong

↑  
Форма d-орбиталей

## Части волновой функции

$$\Psi = R(r) \cdot Y(\theta, \varphi)$$

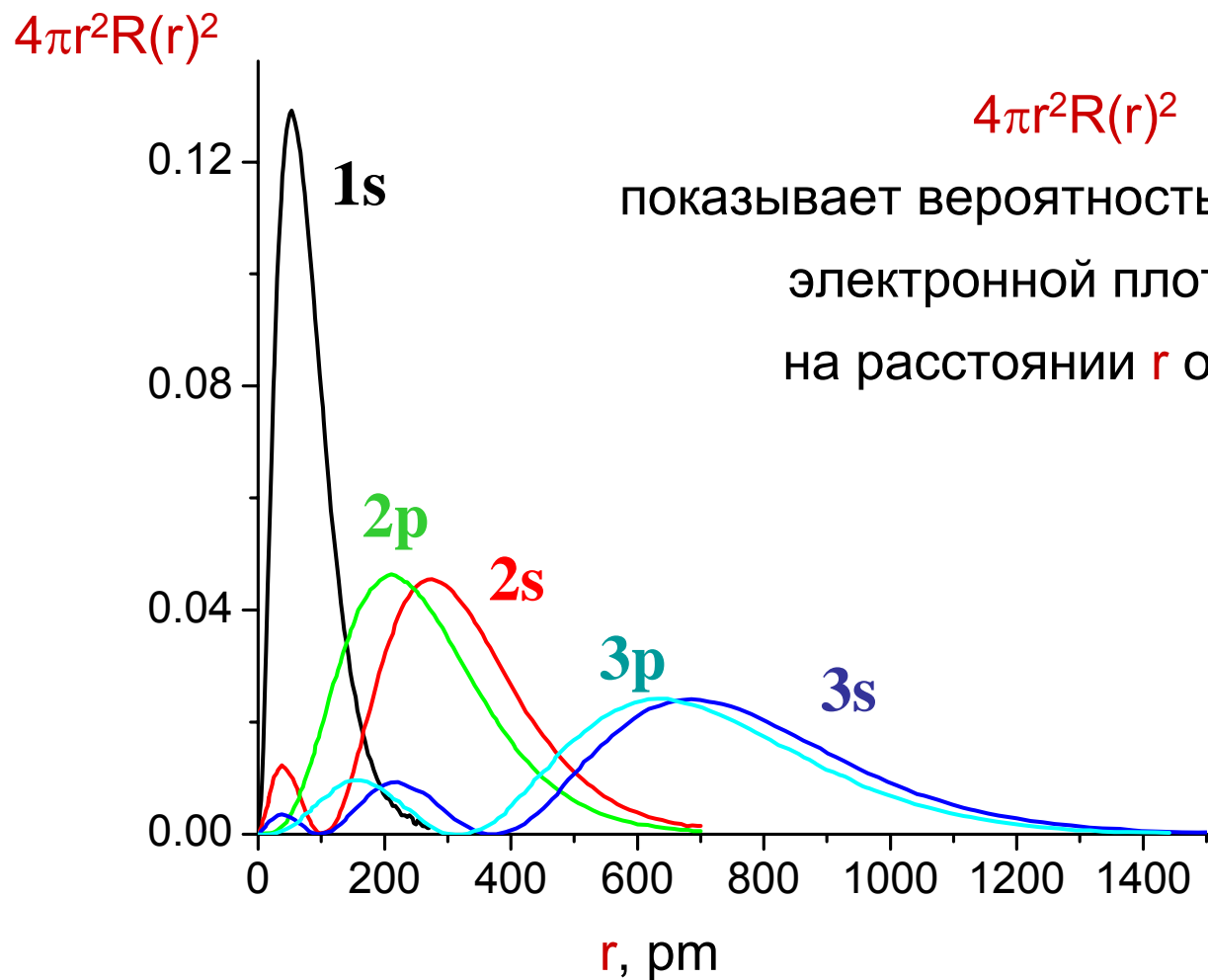
$R(r)$  – радиальная часть волновой функции

Изменение электронной плотности как функция расстояния от центра ядра, определяет размер орбитали

$Y(\theta, \varphi)$  – угловая часть волновой функции

Форма и ориентация электронного облака в пространстве, определяет знак волновой функции

# Функция радиального распределения

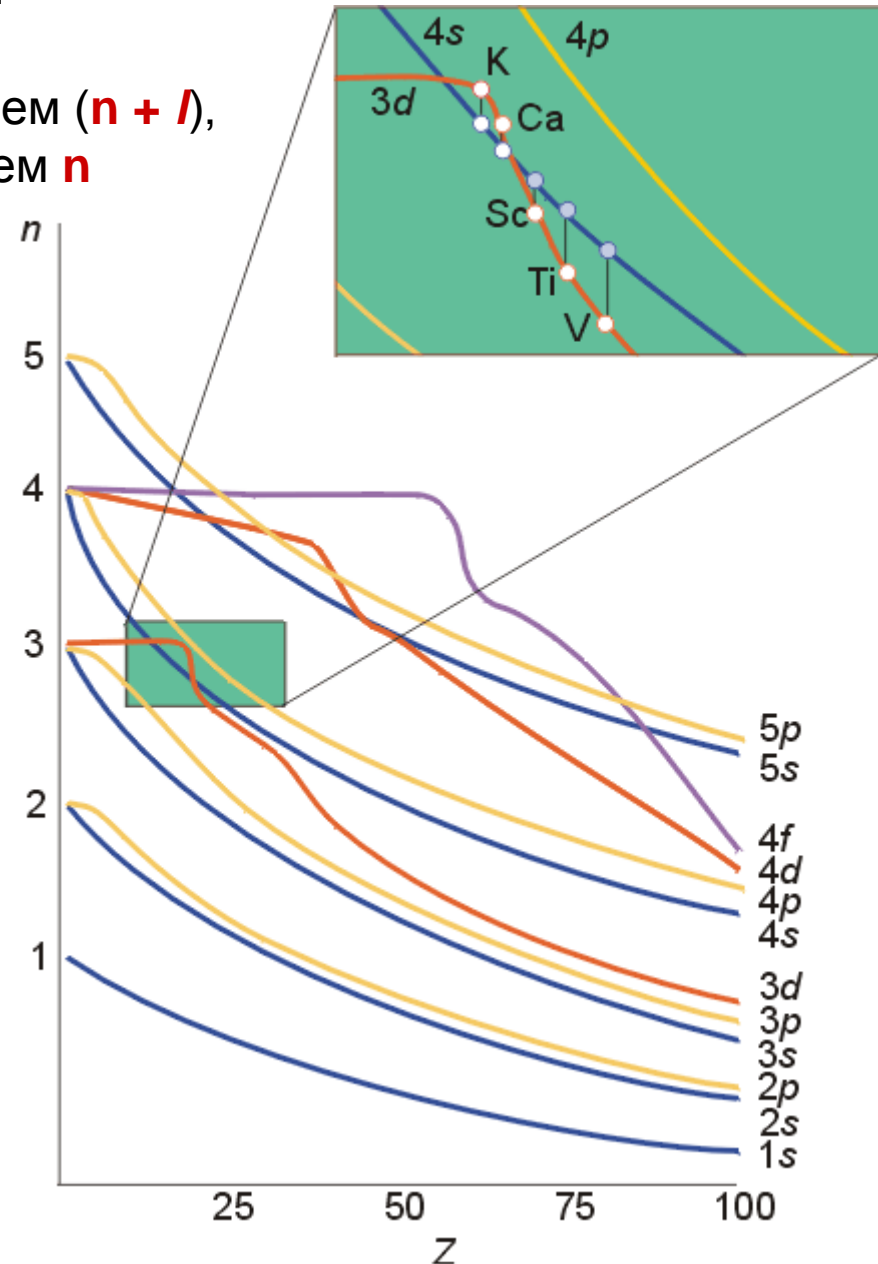
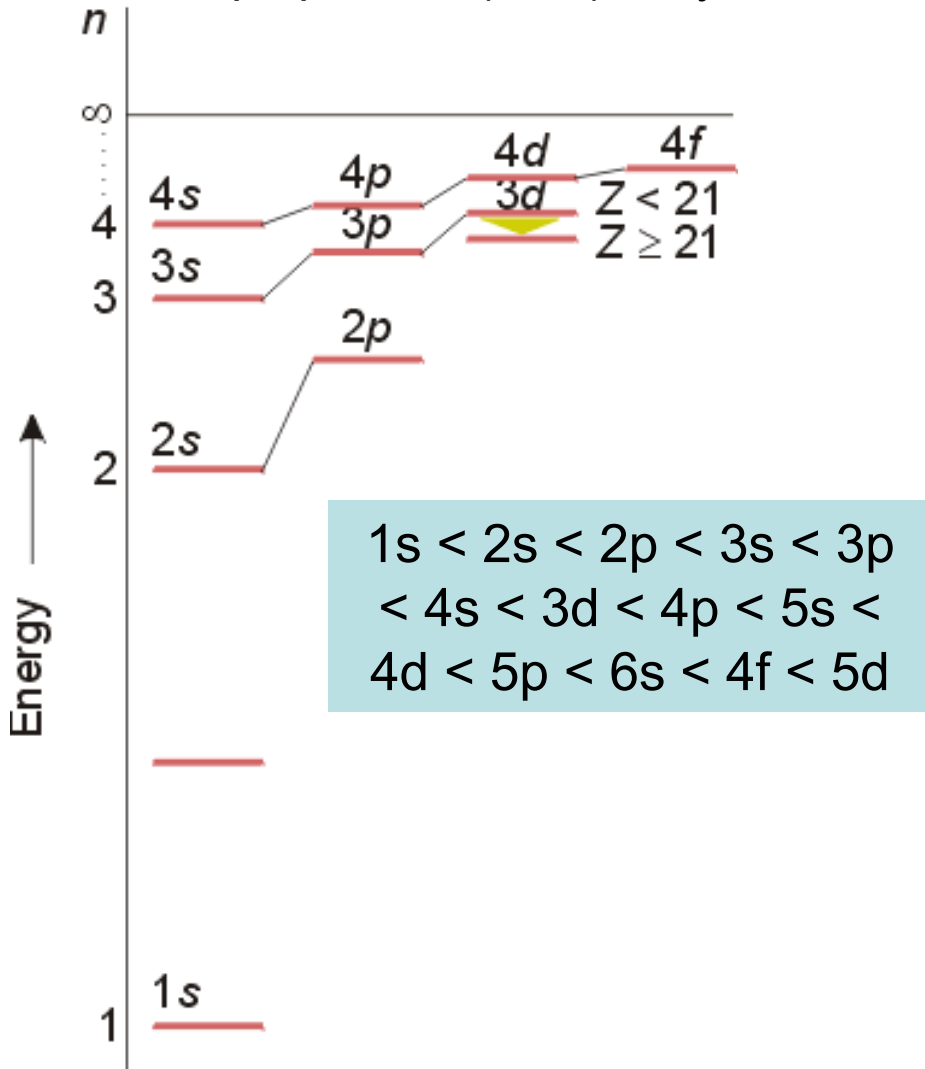


$4\pi r^2 R(r)^2$   
показывает вероятность нахождения  
электронной плотности  
на расстоянии  $r$  от ядра

# Энергия орбиталей

Правило Клечковского:

$E(\text{орб})$  увеличивается с увеличением  $(n + l)$ ,  
а при равных  $(n + l)$  – с увеличением  $n$



# Эффективный заряд ядра

Учет электрон–электронного взаимодействия:

$$Z^* = Z - S$$

$Z^*$  – эффективный заряд ядра

$Z$  – заряд ядра (число протонов)

$S$  – константа экранирования,

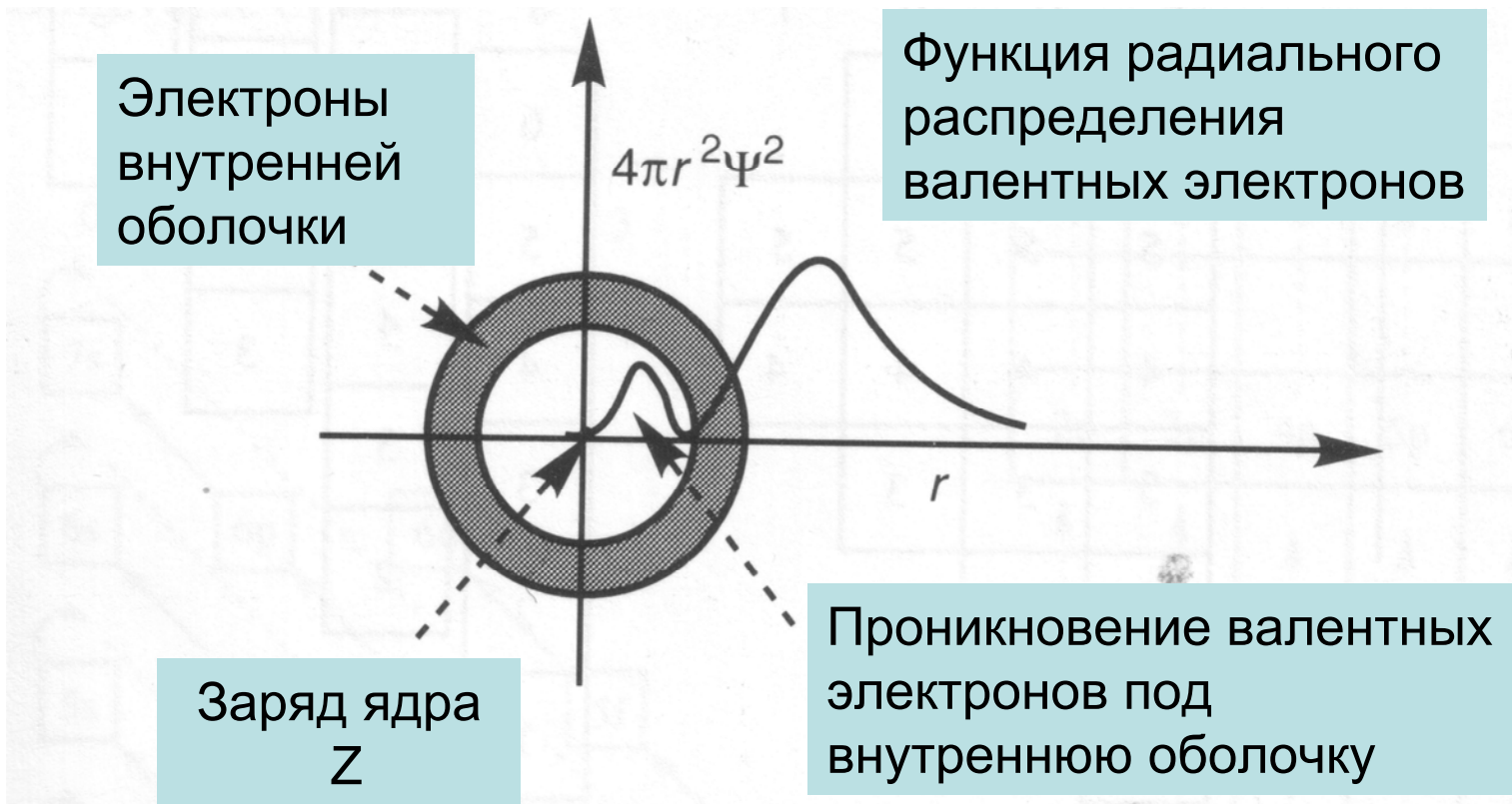
$S$  зависит от квантовых чисел  $n$  и  $l$

$Z^*$  для некоторых атомов:

Li	B	N	F	Na	Al	Si	Ga	Ge
1.28	2.42	3.83	5.10	2.51	4.07	4.29	6.22	6.78



# Эффективный заряд ядра



# Электроны на орбиталях

1. Спиновое квантовое число  $m_s$  отражает ориентацию собственного магнитного момента  $e^-$

$m_s$ принимает значения	$-1/2$	$+1/2$
обозначается	↓	↑

$m_s$  не связано с уравнением Шредингера

2. Электрон на орбитали определяется набором квантовых чисел  $n, l, m_l, m_s$

# Электроны на орбиталях

3. **Принцип Паули:**  
в атоме не существует двух электронов с одинаковым набором квантовых чисел.

Следствие:

на каждой орбитали может находиться не более 2-х электронов ( $\downarrow\uparrow$ ).

4. **Первое правило Хунда:**  
для данного квантового числа  $l$  электроны распределяются по орбиталям так, что суммарный спин  $S = \sum m_s$  максимален

# Электронные конфигурации атомов

1) He	Z = 2	$1s^2$	$\uparrow\downarrow$
2) Be	Z = 4	$1s^2 2s^2 \equiv [\text{He}] 2s^2$	$\uparrow\downarrow$
3) Si	Z = 14	$[\text{Ne}] 3s^2 3p^2$	$\uparrow \uparrow$
4) S	Z = 16	$[\text{Ne}] 3s^2 3p^4$	$\uparrow\downarrow \uparrow \uparrow$
5) Ti	Z = 22	$[\text{Ar}] 3d^2 4s^2$	$\uparrow \uparrow$
		Ar: $18e^-$	
		$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^2 4s^2$	
6) Cr	Z = 24	$[\text{Ar}] 3d^5 4s^1$	$\uparrow \uparrow \uparrow \uparrow \uparrow \uparrow$
7) As	Z = 33	$[\text{Ar}] 3d^{10} 4s^2 4p^3$	$\uparrow \uparrow \uparrow$
		$E(4s) \approx E(3d)$	
		$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^3$	
8) Cs	Z = 55	$[\text{Xe}] 6s^1$	$\uparrow$
9) Nd	Z = 60	$[\text{Xe}] 4f^4 6s^2$	$\uparrow \uparrow \uparrow \uparrow$

# Характеристические свойства атомов

1. Орбитальный радиус атома  $r_a$

Размер электронного облака атома с учетом взаимодействий электронов между собой и с ядром

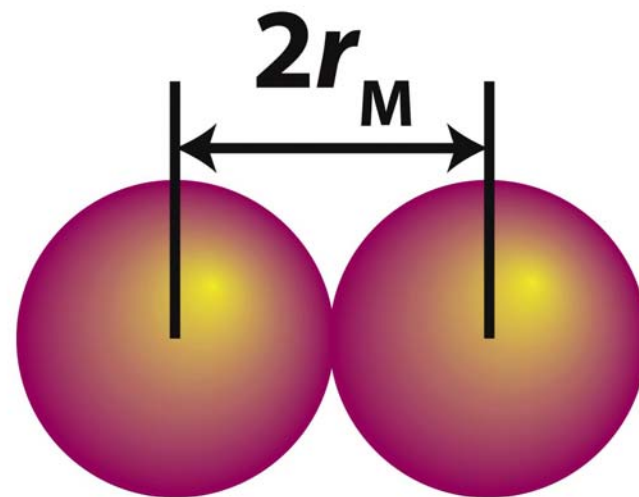
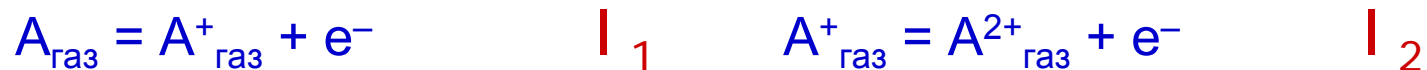


Figure 1-23a  
Shriver & Atkins Inorganic Chemistry, Fourth Edition  
© 2006 by D. F. Shriver, P. W. Atkins, T. L. Overton, J. P. Rourke, M. T. Weller, and F. A. Armstrong

2. Потенциал ионизации  $I_i$



$$I_1 < I_2 < I_3 < \dots < I_n$$

# Характеристические свойства атомов

3. Сродство к электрону  $A_e$



4. Магнитный момент  $\mu_{\text{эфф}}$

$$\mu_{\text{эфф}} = 2\sqrt{S(S+1)} = \sqrt{n(n+2)}$$

5. Электроотрицательность  $\chi$

Мера смещения электронной плотности при взаимодействии с другим атомом.

Шкалы: Полинга  $\chi_P$ , Олреда-Рохова  $\chi_{AR}$ , Малликена  $\chi_M$

$$\chi_M = \frac{1}{2}(I_1 + A_e)$$

# Строение атомного ядра

## Фундаментальные частицы

Семейство 1		Семейство 2		Семейство 3	
Частица	Масса*	Частица	Масса*	Частица	Масса*
Электрон	0.00054	Мюон	0.11	Тау	1.9
Нейтрино	$10^{-8}$	Мюонное нейтрино	0.0003	Тау-нейтрино	0.033
u-кварк	0.0047	c-кварк	1.6	t-кварк	189.0
d-кварк	0.0074	s-кварк	0.16	b-кварк	5.2

\* Масса протона:  $1.673 \cdot 10^{-27}$  кг

Протон: 2 u-кварка + 1 d-кварк  
Нейтрон: 1 u-кварк + 2 d-кварка

### Дефект массы

$$M(2p, 2n) - M(\text{He}) \approx 0.03 \text{ а.е.м.}$$

Энергия взаимодействия:

$$\Delta E = \Delta mc^2 = 28.2 \cdot 10^6 \text{ эВ}$$

или  $7.05 \cdot 10^6$  эВ/нуклон

# Радиоактивный распад

$\alpha$ -распад:

испускание  ${}^4_2\text{He}$

$\beta$ -распад:

испускание электрона

$\gamma$ -распад:

испускание электромагнитного излучения

Период  
полураспада

${}_{84}^{212}\text{Po}$	$\tau_{1/2} = 3 \cdot 10^{-7} \text{ с}$
${}_{83}^{214}\text{Bi}$	$\tau_{1/2} = 19.7 \text{ мин}$
${}_{88}^{224}\text{Ra}$	$\tau_{1/2} = 3.64 \text{ суток}$
${}_{82}^{210}\text{Pb}$	$\tau_{1/2} = 19.7 \text{ лет}$
${}_6^{14}\text{C}$	$\tau_{1/2} = 5.7 \cdot 10^3 \text{ лет}$
${}_{92}^{238}\text{U}$	$\tau_{1/2} = 4.5 \cdot 10^9 \text{ лет}$
${}_{90}^{232}\text{Th}$	$\tau_{1/2} = 1.4 \cdot 10^{10} \text{ лет}$



# Ядерные реакции и синтез новых элементов

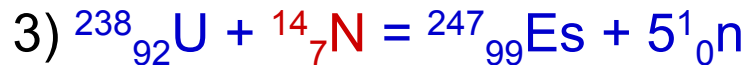
Ядерные реакции:



под действием  $\alpha$ -частиц



под действием протонов



под действием тяжелых ядер



под действием тепловых нейтронов

Синтез сверхтяжелых элементов:

