

**СТРОЕНИЕ АТОМА.
ЭЛЕКТРОННЫЕ ОБОЛОЧКИ.
КВАНТОВЫЕ ЧИСЛА**

ПРИЛОЖЕНИЕ №4

Преподаватель химии: Плешакова Е.В

ГЛАВНОЕ КВАНТОВОЕ ЧИСЛО (n)

Число (n) характеризует общую энергию электрона в атоме. Оно может принимать значения целых чисел:

1, 2, 3 ... n

Каждому значению квантового числа n соответствует свой энергетический уровень.

Число энергетических уровней в атоме заселенных электронами, равно номеру периода, в котором находится элемент в таблице Менделеева.

ГЛАВНОЕ КВАНТОВОЕ ЧИСЛО (n)

(продолжение)

Например – электроны в атоме любого элемента, принадлежащего третьему периоду, располагаются на трех энергетических уровнях.

Электроны, находящиеся на ближайшем к ядру энергетическом уровне ($n=1$) обладают наименьшей энергией. При поглощении квантовой энергии ($E=h\nu$) электрон переходит на более высокий энергетический уровень. При переходе на более низкий уровень – электрон испускает квант энергии.

ОРБИТАЛЬНОЕ КВАНТОВОЕ ЧИСЛО (l)

Число l определяет форму орбитали, а следовательно и электронного облака. Оно может принимать значение от нуля до $n-1$:

$$l = 0, 1, 2, 3 \dots n-1$$

Например, если главное квантовое число равно четырем ($n=4$), то l принимает значения 0, 1, 2, 3.

ОРБИТАЛЬНОЕ КВАНТОВОЕ ЧИСЛО (l)

(продолжение)

Электроны с одинаковыми значениями числа n , но разными (l), несколько отличаются по энергии. Поэтому говорят, что электроны данного энергетического уровня группируются в энергетические подуровни.

Этим подуровням присвоены следующие буквенные обозначения:

<i>Орбитальное квантовое число (l)</i>	0	1	2	3
<i>Обозначение энергетического подуровня</i>	s	p	d	f

ОРБИТАЛЬНОЕ КВАНТОВОЕ ЧИСЛО (l)

(продолжение)

Число подуровней в каждом энергетическом уровне равно его квантовому числу, т.е. номеру этого уровня.

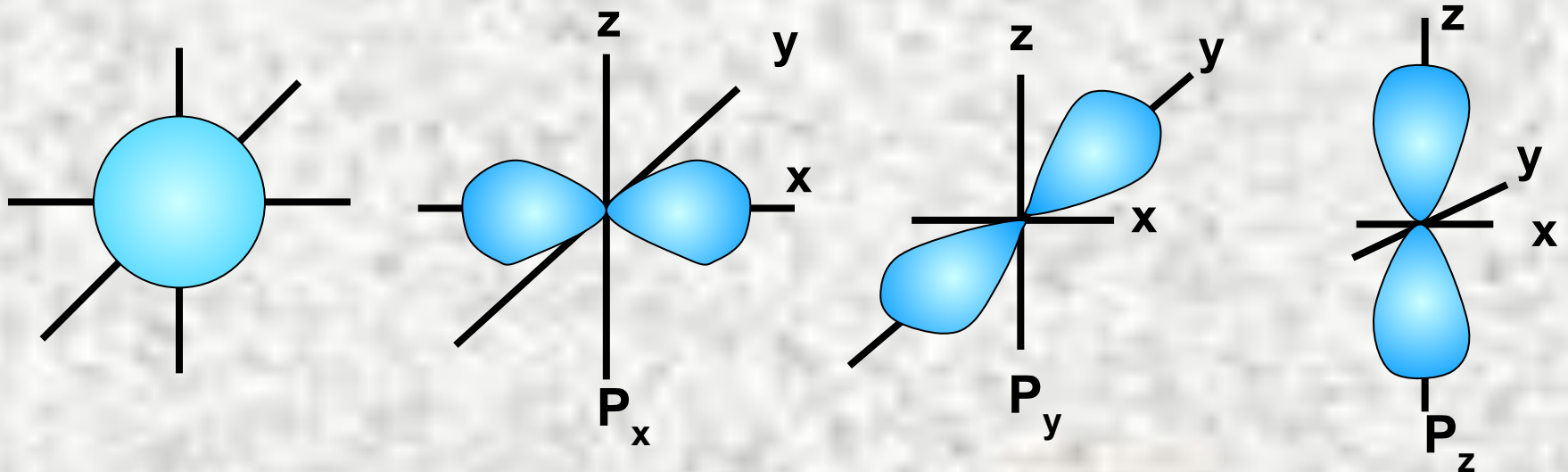
Первый энергетический уровень ($n=1$) состоит из одного s – подуровня; второй ($n=2$) – из двух (s ; p) подуровней; третий ($n=3$) – из трех (s ; p ; d) подуровней; четвертый ($n=4$) – из четырех (s ; p ; d ; f) подуровней:

Главное квантовое число (n) (номер уровня)	Типы подуровней
1	s
2	s, p
3	s, p, d
4	s, p, d, f

ОРБИТАЛЬНОЕ КВАНТОВОЕ ЧИСЛО (l) И ФОРМЫ ОРБИТАЛЕЙ

Орбитали (электроны), для которых (l) = 0, 1, 2, 3 соответственно называются s-, p-, d-, f- орбиталями (или s-, p-, d-, f- электронами). Наименьшей энергией обладают s- электроны, далее p-, d-, f- электроны.

Формы s-, p-, d-, f- орбиталей (электронов) представлены на рисунке.



МАГНИТНОЕ КВАНТОВОЕ ЧИСЛО (m)

Число m характеризует пространственное расположение орбиталей (облаков). Оно может принимать все целочисленные значения от $-l$ до $+l$, включая ноль:

$$m = -l \dots 0 \dots +l$$

Например: при $l = 2$ имеем

$$m = -2, -1, 0, +1, +2$$

Число значений числа m зависит от орбитального квантового числа и указывает на число энергетических состояний (орбиталей), в которых может находиться электрон данного подуровня (с данным значением l). Число орбиталей с данным значением (l) равно $2l + 1$

СВЯЗЬ МАГНИТНОГО И ОРБИТАЛЬНОГО КВАНТОВЫХ ЧИСЕЛ

Орбитальное квантовое число (l)	Магнитное квантовое число (m)	Число орбиталей (облаков)
0	0	1
1	- 1, 0, + 1	3
2	- 2, - 1, 0, + 1, + 2	5
3	- 3, - 2, - 1, 0, + 1, + 2, + 3	7

КВАНТОВЫЕ ЯЧЕЙКИ (ОРБИТАЛИ)

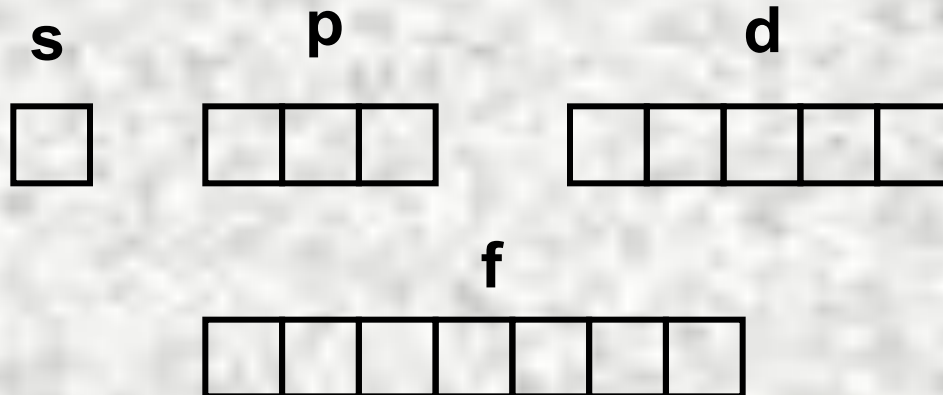
Каждую орбиталь принято изображать прямоугольником, который также называют квантовой ячейкой.

s – подуровень состоит из 1 ячейки

p – подуровень состоит из 3 ячеек

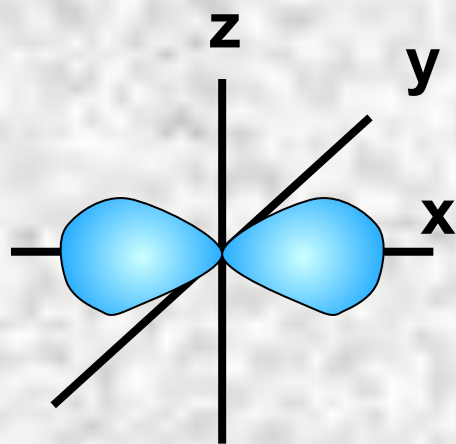
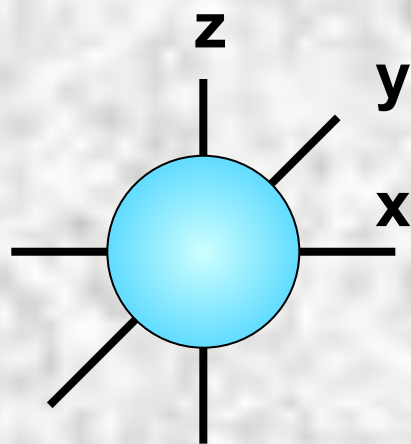
d – подуровень состоит из 5 ячеек

f – подуровень состоит из 7 ячеек

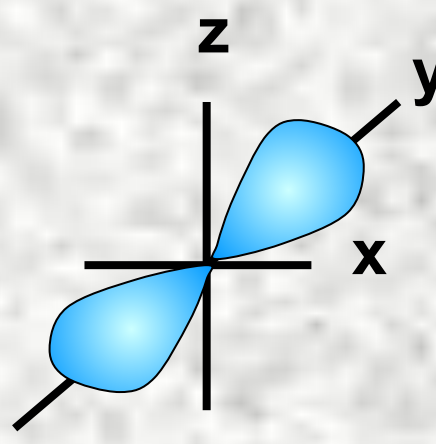


ФОРМЫ s -, p -ОРБИТАЛЕЙ (ЭЛЕКТРОННЫХ ОБЛАКОВ)

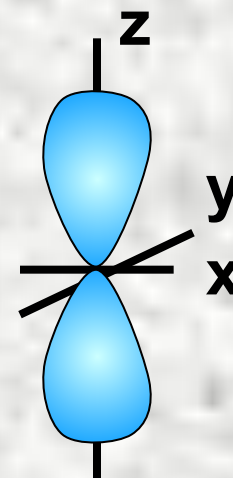
Орбитали с заданным значением (l), т.е. или s -, или p -, или d -, или f - орбитали к каждому бы уровню ни относились, имеют одинаковую форму и симметрию. Так все $1s$, $2s$, $3s$ и т.д. орбитали имеют вид шарового слоя. p - орбитали – вид гантелей.



P_x

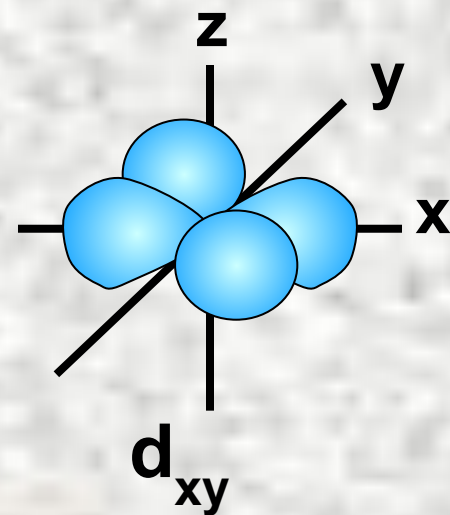
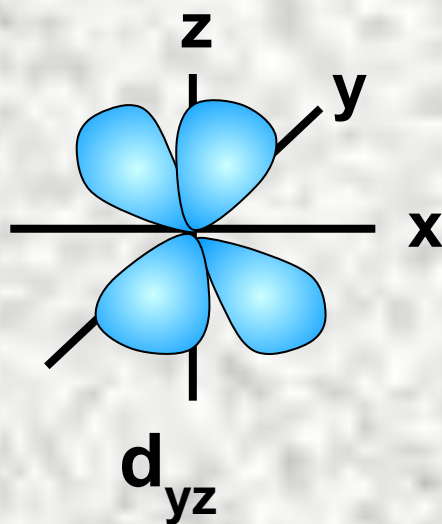
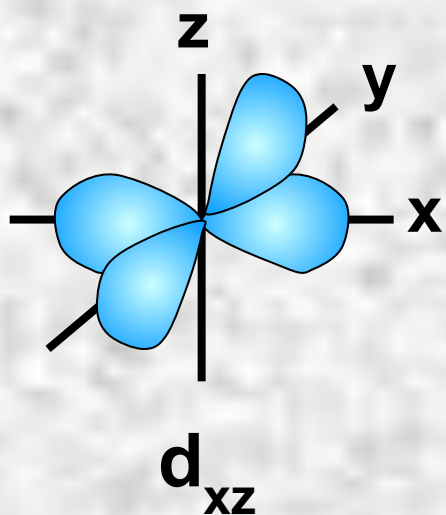
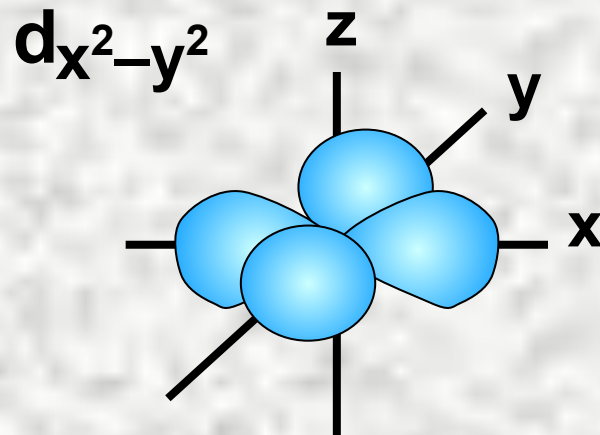
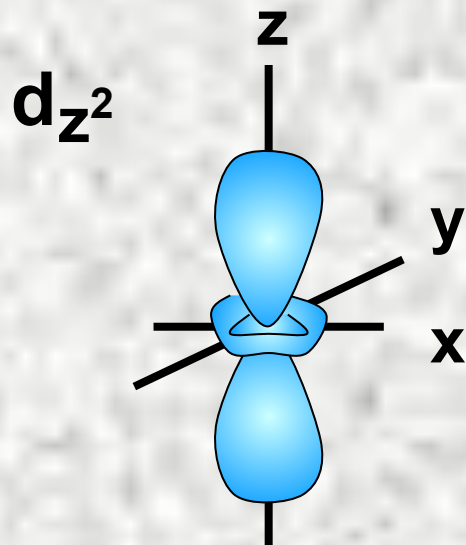


P_y



P_z

ФОРМЫ d -ОРБИТАЛЕЙ (ЭЛЕКТРОННЫХ ОБЛАКОВ)



СПИНОВОЕ КВАНТОВОЕ ЧИСЛО (S)

При данном значении m , число s может иметь всего два значения:

$$+ \frac{1}{2} \quad \text{и} \quad - \frac{1}{2}$$

Гипотеза о наличии у электрона так называемого *спина* была выдвинута в 1925 г. (сначала - для наглядности - считалось, что это явление аналогично вращению земли вокруг своей оси при движении ее по орбите вокруг Солнца).

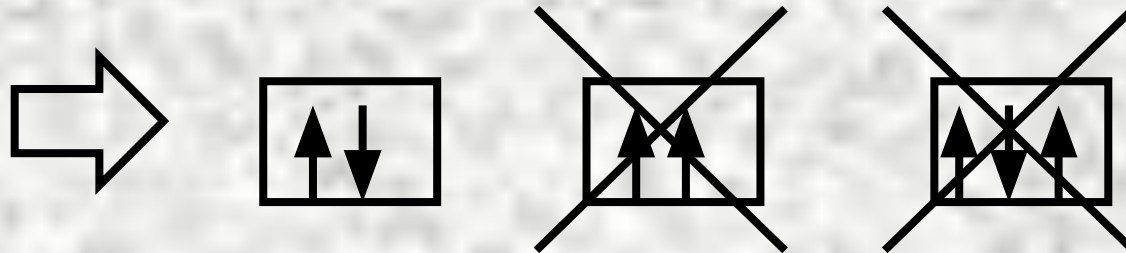
На самом деле, *спин* - это чисто квантовое свойство электрона, не имеющее классических аналогов. Строго говоря, *спин - это собственный момент импульса электрона, не связанный с движением в пространстве.*

Для всех электронов абсолютное значение спина всегда равно $s = 1/2$. Проекция спина на ось Z (магнитное спиновое число) может иметь лишь два значения: $m_S = +1/2$ или $m_S = -1/2$.

ПРИНЦИП ПАУЛИ

«В атоме не может быть двух электронов с одинаковыми значениями всех четырех квантовых чисел».

Так как АО характеризуется тремя квантовыми числами n , l , m , то в ней могут находиться не более двух электронов с противоположными спинами:



Максимальное число электронов равно:

На подуровне: $X_e = 2(2l + 1)$; s–2; p–6; d – 10; f – 14

На уровне: $N = 2n^2$

ПРИНЦИП НАИМЕНЬШЕЙ ЭНЕРГИИ

«При заполнении электронами уровней и подуровней, последовательность размещения электронов в атоме должна отвечать наибольшей связи их с ядром, т.е. электрон должен обладать наименьшей энергией».

Этот принцип выражает общие термодинамические требования к устойчивости систем: максимум устойчивости соответствует минимум энергии.

На практике «принцип наименьшей энергии» применяется в виде правил Клечковского:

ПРИНЦИП НАИМЕНЬШЕЙ ЭНЕРГИИ

Правила Клечковского

«В первую очередь заполняются те подуровни, для которых сумма значений главного и побочного квантовых чисел $(n + l)$ является наименьшей; при одинаковой сумме $(n + l)$ сначала заполняется подуровень с меньшим значением главного квантового числа n ».

Пример 1

Сравним запас энергии на подуровнях:

$$4s < 3d$$

$$[(n + l) = 4 + 0 = 4] \quad [(n + l) = 3 + 2 = 5]$$

$$5p < 4f$$

$$[(n + l) = 5 + 1 = 6] \quad [(n + l) = 4 + 3 = 7]$$

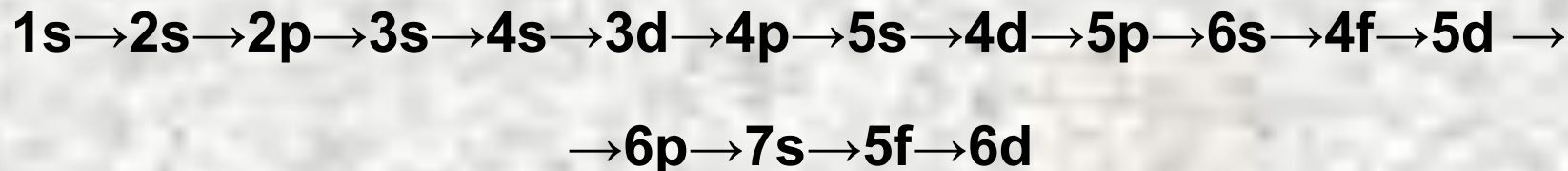
Правила Клечковского. Пример 2:

На подуровнях 3d, 4p и 5s сумма (n+l) равна 5:

ПОДУРОВЕНЬ	(n + l)
3d	3+2=5
4p	4+1=5
5s	5+0=5

В этом случае сначала заполняется подуровень с меньшим значением главного квантового числа n, т.е. в такой последовательности: **3d → 3p → 5s**

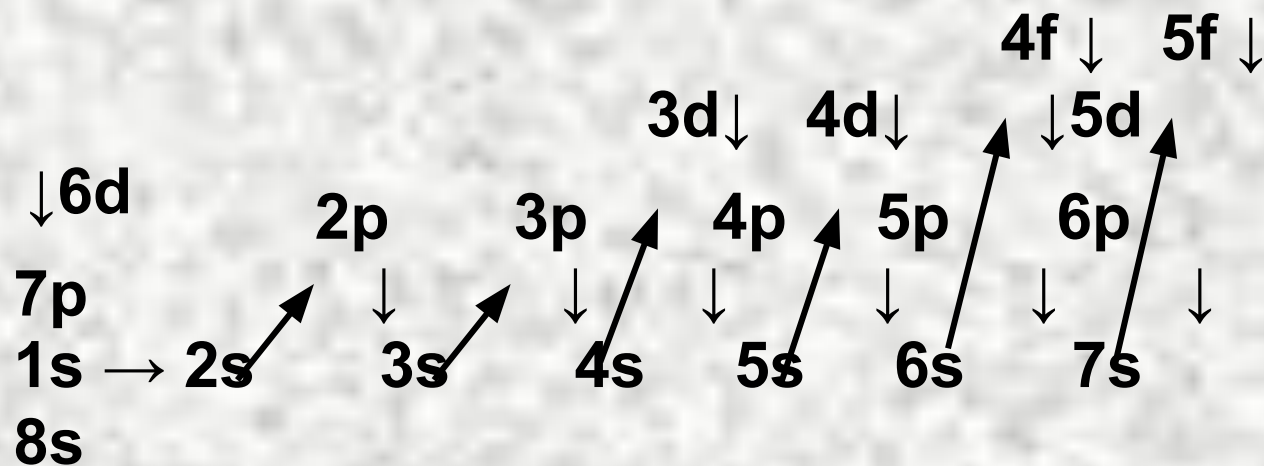
В целом заполнение уровней и подуровней идет в последовательности:



ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОСТЬ ЗАПОЛНЕНИЯ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ УРОВНЕЙ И ПОДУРОВНЕЙ

1s → 2s → 2p → 3s → 4s → 3d → 4p → 5s → 4d → 5p →

→ 6s → /5d¹/ → 4f → 5d → 6p → 7s → /6d¹⁻²/ → 5f → 6d



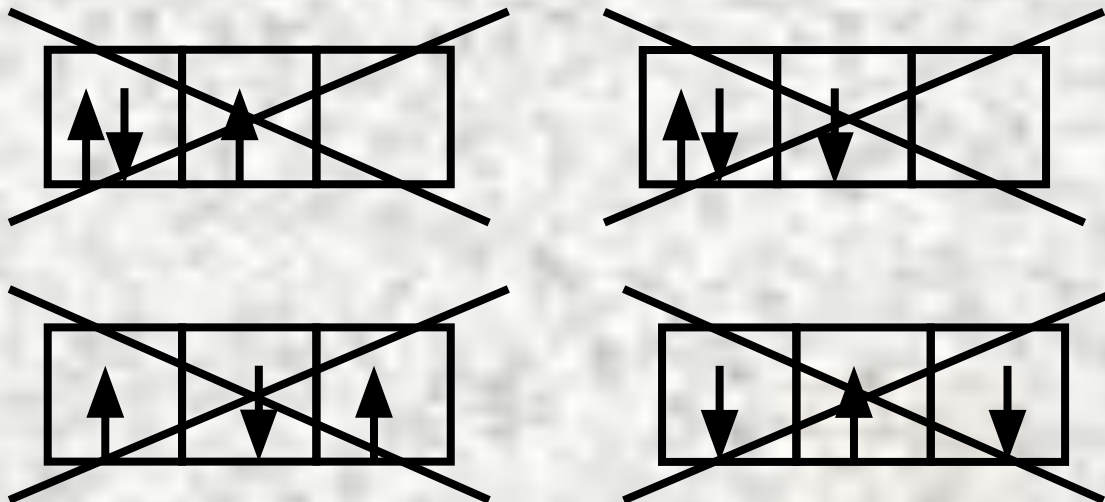
ПРАВИЛО ХУНДА

«В пределах данного энергетического подуровня электроны располагаются так, что суммарное спиновое число их $|\Sigma S|$ максимально»:



$$\Sigma S = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} + \frac{1}{2} = +\frac{3}{2}; \quad \Sigma S = -\frac{1}{2} - \frac{1}{2} - \frac{1}{2} = -\frac{3}{2}$$

Всякое другое распределение неверно:



ЭЛЕКТРОННЫЕ ФОРМУЛЫ АТОМОВ

В электронных формулах буквами s, p, d, f обозначаются энергетические электроны.

Цифры впереди букв означают энергетический уровень, в котором находится данный электрон, а индекс вверху справа – число электронов на данном подуровне

Запись $5p^3$ означает, что на p- подуровне пятого энергетического уровня располагаются три электрона.

ЭЛЕКТРОННЫЕ ФОРМУЛЫ АТОМОВ

При составлении электронной формулы атома любого элемента нужно руководствоваться следующей последовательностью:

1. Определить порядковый номер элемента (а, следовательно, число электронов в атоме);
2. Определить число энергетических уровней, на которых будут располагаться электроны /по номеру периода/;
3. Распределить электроны по подуровням и уровням, руководствуясь требованиями основных положений.

ЭЛЕКТРОННЫЕ ФОРМУЛЫ АТОМОВ

4. Распределить электроны по энергетическим уровням и подуровням, руководствуясь требованиями правила Паули, правил Клечковского и правила Хунда, а также следующей таблицей:

Номер уровня	Число подуровней	Типы подуровней	Число орбиталей	Максим. число электронов на подуровне
1	1	1s	1	2
2	2	2s 2p	1 3	2 } 6 } 8
3	3	3s 3p 3d	1 3 5	2 } 6 } 18 10 }
4	4	4s 4p 4d 4f	1 3 5 7	2 } 6 } 32 10 } 14 }

СОСТАВЛЕНИЕ ЭЛЕКТРОННЫХ ФОРМУЛ АТОМОВ

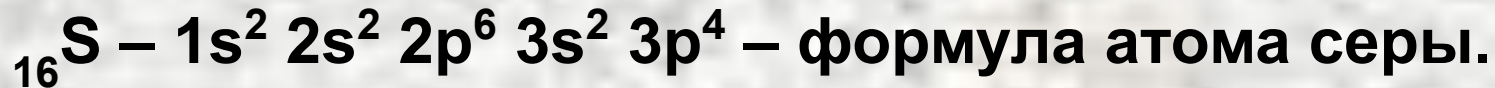
1. Составить электронную формулу атома серы:

1. Сера имеет порядковый номер 16: в атоме всего 16 электронов

2. Сера находится в третьем периоде: 16 электронов располагаются на трех энергетических уровнях:



3. Распределим 16 электронов по энергетическим подуровням в соответствии с принципом наименьшей энергии и принципом Паули:



СОСТАВЛЕНИЕ ЭЛЕКТРОННЫХ ФОРМУЛ АТОМОВ

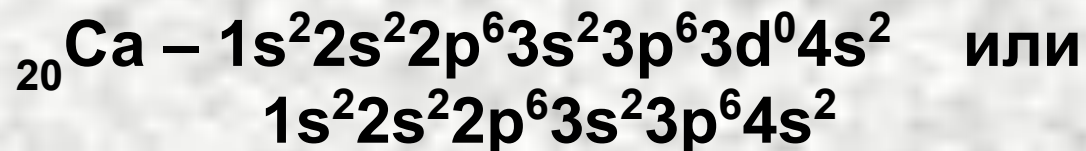
2. Составить формулу атома (Ca) кальция:

1. Порядковый номер Ca = 20: в атоме 20 электронов

2. Ca стоит в четвертом периоде: 20 электронов располагаются на четырех уровнях:



3. Распределим 20 электронов:



СОСТАВЛЕНИЕ ЭЛЕКТРОННЫХ ФОРМУЛ АТОМОВ

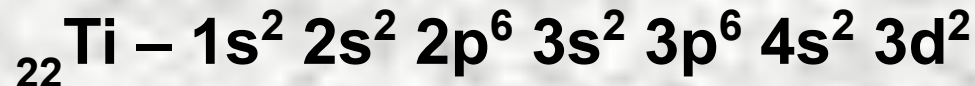
3. Составить формулу атома титана / Ti /:

1. Порядковый номер Ti = 22: в атоме 22 электрона

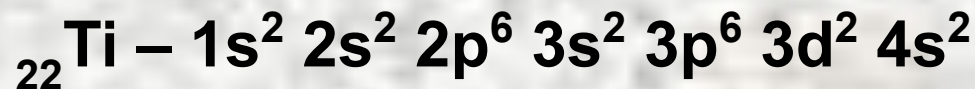
2. Ti стоит в 4-ом периоде: электроны располагаются на 4-х уровнях:



3. Распределим 22 электрона по подуровням, выполнив требования принципа Паули и принципа наименьшей энергии:



или



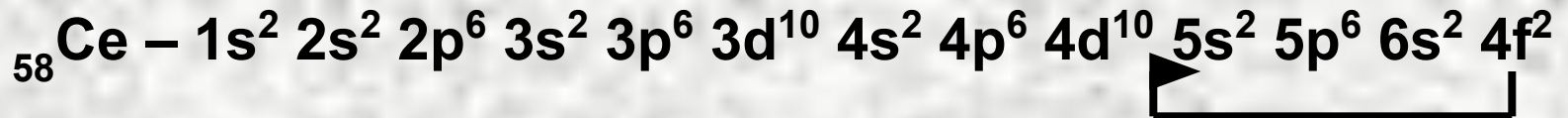
СОСТАВЛЕНИЕ ЭЛЕКТРОННЫХ ФОРМУЛ АТОМОВ

4. Составить формулу атома церия (Ce):

1. Порядковый номер Ce = 58: в атоме 58 электронов
2. Ce стоит в шестом периоде: 58 электронов расположены на шести уровнях:

1s 2s 2p 3s 3p 3d 4s 4p 4d 4f 5s 5p 5d 5f 6s 6p ...

3. Распределим 58 электронов по подуровням

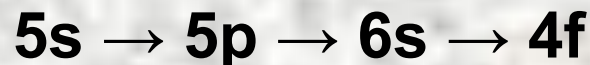


$$4f \quad (n + l = 4 + 3 = 7)$$

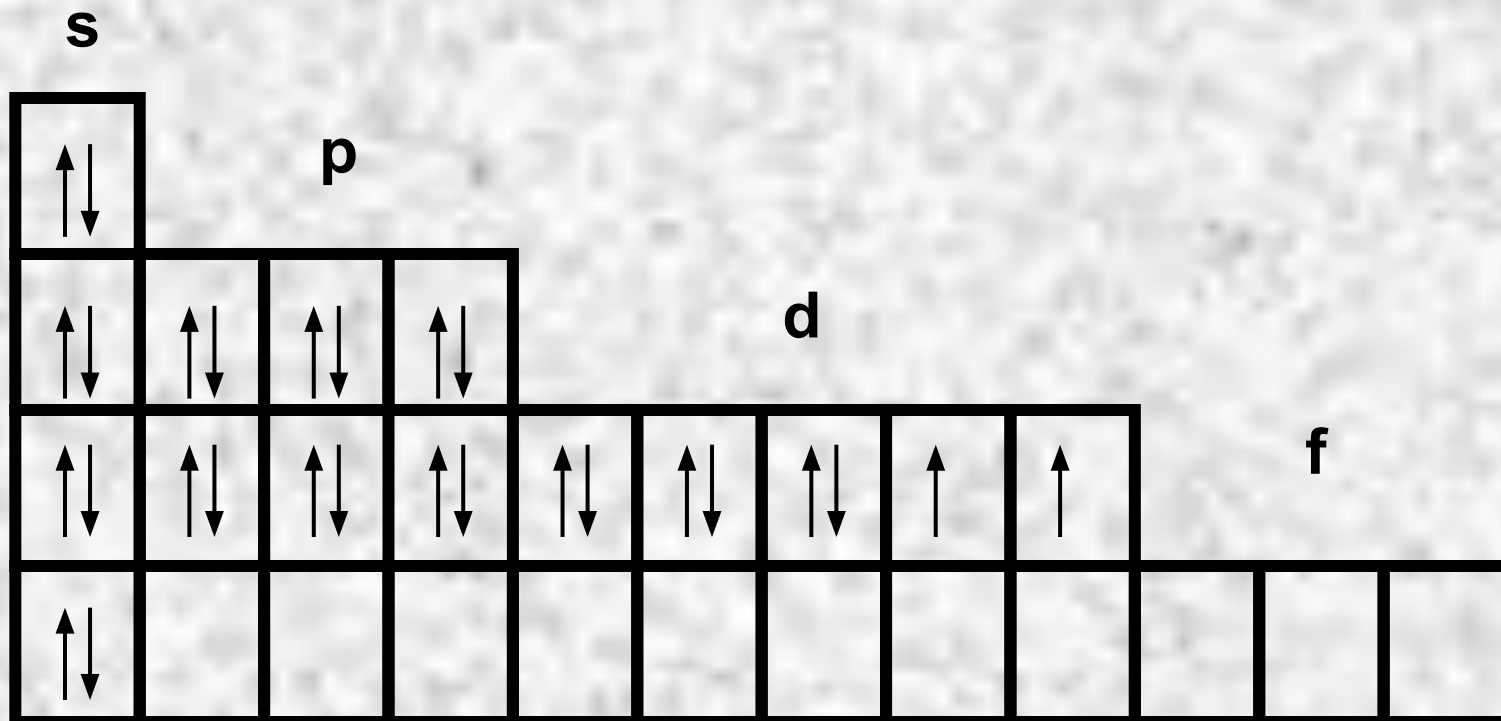
$$5p \quad (n + l = 5 + 1 = 6)$$

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

$$6s \quad (n + l = 6 + 0 = 6)$$

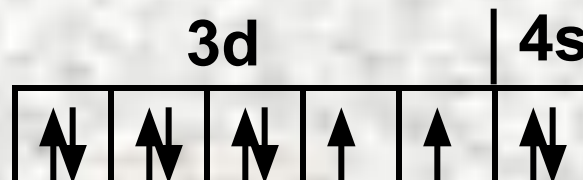


Распределение электронов атома Ni по квантовым ячейкам



Ni – d – элемент ... $3d^8 4s^2$

Сокращенная эл. формула:



ЧЕТЫРЕ ТИПА ЭЛЕМЕНТОВ

В зависимости от того, какой подуровень заполняется электронами, все элементы делятся на четыре типа (семейства):

1) S – элементы: заполняется S- подуровень внешнего уровня. Их общая формула:
... nS^2 n – номер периода

К s–элементам относятся первые два элемента каждого периода.

2) P – элементы: заполняется P- подуровень внешнего уровня. Их общая формула:
... $nS^2 n P^{1-6}$

К p – элементам относятся последние шесть элементов каждого периода /кроме 1-ого и 7-ого/.

ЧЕТЫРЕ ТИПА ЭЛЕМЕНТОВ

3) **d – элементы:** у них заполняется d- подуровень второго снаружи уровня. Их общая формула:

$$\dots (n-1) d^{1-10} nS^2$$

На наружном уровне у них 2 иногда 1 электрон (s^{1-2}).
К d-элементам относятся 10 элементов больших периодов, расположенных между s- и p-элементами.

4) **f – элементы:** у них заполняется d- подуровень второго снаружи уровня. Их общая формула:

$$\dots(n-2) f^{1-14} nS^2 \quad \text{или} \quad (n-2) f^{1-14} (n-1) d^1 nS^2$$

К f-элементам относятся лантаноиды и актиноиды

Составление электронных конфигураций атомов **без помощи таблицы Менделеева**

Для этого нужно знать:

1. Сколько элементов содержится в периоде:

№ периода	Число элементов в периоде	
1	2	
2	8	$\sum^3 = 18$
3	8	
4	18	$\sum^4 = 36$
5	18	$\sum^5 = 54$
6	32	$\sum^6 = 86$
7	не закончен	

Составление электронных конфигураций атомов без помощи таблицы Менделеева

2. Что первые два элемента в периоде- это **S-элементы**.
3. Последние шесть элементов каждого периода (кроме 1-го и 7-го) - это **p-элементы**.
4. **10 элементов** (начиная с 3-го) больших периодов – это **d-элементы**.
5. После лантана (${}_{57}\text{La}$) следуют **4f-элементы**.
6. После актиния (${}_{89}\text{Ac}$) следуют **5f-элементы**

Составление электронных конфигураций атомов без помощи таблицы Менделеева

Пример: Составить электронную конфигурацию $_{27}\text{Э}$.

Решение: 1) Определим в каком периоде находится элемент: $18 < 27 < 36$, значит это элемент 4-го периода;

2) Определим какой по счету он в периоде: $27-18=9$, значит это 9-й элемент 4-го периода;

3) Учитывая, что первые два элемента в периоде относятся к **s**-элементам, делаем вывод, что это 7-ой **d**-элемент 4-го периода;

4) Общая формула **d**-элементов: $\dots(n-1)d^{1-10}ns^2$

5) Значит формула элемент $_{27}\text{Э}$: $(n-1)d^{1-10}ns^2 = 3d^74s^2$

ПРИМЕРЫ и ЗАДАЧИ

Пример 3. Имеется ли d-подуровень на втором энергетическом уровне?

Пример 4. Почему число АО на L-уровне равно четырем?

ПРИМЕРЫ и ЗАДАЧИ

Решение 3. Нет, так как для d-подуровня $l = 2$, что возможно только для значений $n > 3$.

Решение 4. Каждая АО характеризуется тремя значениями квантовых чисел: n, l, m_l . Уровень L ($n = 2$) имеет два подуровня: $l = 0$ и $l = 1$. При $l = 0$ имеется единственное значение $m_l = 0$ (одна АО), а при $l = 1$ имеется три значения $m_l = -1, 0, +1$ (всего три АО), следовательно, общее число АО на L -уровне равно четырем.