

## Лекція № 7.

**Тема: Рух електронів у атомі. Поняття про орбіталь, форми орбіталей. Будова електронної оболонки атома. Взаємодія електронів із ядром. Енергетичні рівні й підрівні, послідовність їх заповнення електронами. Принцип мінімальної енергії. Правило Клечковського, принцип Паулі, правило Хунда.**

Атом складається з ядра та електронної оболонки.

**Електронна оболонка атома - це сукупність всіх електронів у даному атомі.**

Хімічні властивості елементів визначаються будовою електронних оболонок їх атомів.

У 20-х роках ХХ в. вчені встановили, що електрон має двоїсту природу: він є одночасно часткою і хвилею (має властивості частинки і властивості хвилі).

Подання про подвійну природу електрона призвело до створення **квантово-механічної теорії будови атома.**

Відповідно до цієї теорії електрон (як і інші мікрочастинки) не має певної траєкторії руху. Можна говорити тільки про ймовірність знаходження електрона в різних частинах атомного простору.

**Частина атомного простору, в якій ймовірність знаходження даного електрона найбільша (дорівнює  $\approx 90\%$ ), називається атомної орбіталю.**

Кожен електрон в атомі займає певну орбіталь і утворює електронне хмара, яке є сукупністю різних положень швидко рухомого електрона.

Атомна орбіталь і хмара електрона, який займає цю орбіталь, мають однаковий розмір, однакову форму і однаковий напрямок у просторі.

Для характеристики орбіталей і електронів використовуються **квантові числа.**

Енергія і розмір орбіталі і електронної хмари характеризуються головним квантовим числом  $n$ .

Головне квантове число приймає значення цілих чисел від 1 до  $\infty$  (нескінченності):

$$n = 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, \dots \infty$$

Орбіталі, які мають однакове значення  $n$ , близькі між собою по енергії і за розміром.

**Сукупність орбіталей, які мають однакове значення головного квантового числа, - це енергетичний рівень.**

Енергетичні рівні позначаються великими літерами латинського алфавіту.

Значення $n$	1	2	3	4	5	6	7
Позначення рівня	K	L	M	N	O	P	Q

→

Енергія і розмір орбіталей збільшуються.

**Сукупність електронів, які знаходяться на одному енергетичному рівні, - це електронний шар.**

На одному енергетичному рівні можуть знаходитися орбіталі (електронні хмари), які мають різні геометричні форми.

**Форма орбіталей і хмар характеризується побічним (орбітальним) квантовим числом  $l$ .**

Для орбіталей даного енергетичного рівня побічна (орбітальний) квантове число  $l$  приймає значення цілих чисел від 0 до  $n-1$  (табл.3).

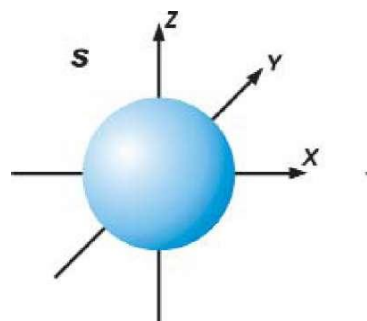
Таблиця 3.

**Зв'язок між головними і побічними квантовими числами**

Рівень	Головне квантове число $n$	Значення побічного квантового числа $l$
K	1	0
L	2	0, 1
M	3	0, 1, 2
N	4	0, 1, 2, 3

Орбіталі, для яких  $l = 0$ , мають форму кулі (сфери) і називаються *s*-орбіталями (умовно зображуються у вигляді кола).

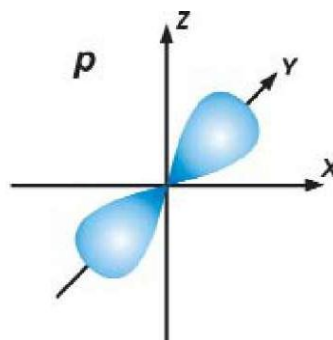
*s*-орбіталь ( $l=0$ )



*s*-орбіталь, як видно з табл.1, є на всіх енергетичних рівнях. На К-рівні (на першому енергетичному рівні) є тільки *s*-орбіталь.

Орбіталі, для яких  $l = 1$ , мають форму гантелі (об'ємної вісімки) і називаються *p*-орбіталями:

*p*-орбіталь ( $l=1$ )



*p*-орбіталі є на всіх енергетичних рівнях, крім першого (К) рівня. Орбіталі з великими значеннями  $l$  мають складнішу форму і позначаються так:

$l=2$	<i>d</i> -орбіталі
$l=3$	<i>f</i> -орбіталі

*d*-орбіталі є на всіх енергетичних рівнях, крім першого (К) і другого (L) рівнів. *f*-орбіталі є на всіх енергетичних рівнях, крім першого (К), другого (L) і третього рівнів.

Енергія орбіталей (E), які знаходяться на одному енергетичному рівні, але мають різну форму, неоднаково:

$$E_s < E_p < E_d < E_f$$

Тому енергетичні рівні складаються з енергетичних підрівнів.

**Енергетичний підрівень - це сукупність орбіталей, які знаходяться на одному енергетичному рівні і мають однакову форму.**

Значить, **орбіталі одного підрівня мають однакові значення головного квантового числа ( $n$ ) і однакові значення побічного квантового числа ( $l$ ).**

Енергетичний підрівень позначається так: головне квантове число записують арабською цифрою, побічне квантове число записують відповідною латинською літерою (*s*, *p*, *d*, *f* і т.д.).

Наприклад, *1s* - *s*-підрівень першого енергетичного рівня ( $n = 1, l = 0$ ); *4d* - *d*-підрівень четвертого енергетичного рівня ( $n = 4, l = 2$ ).

Кількість значень  $l$  для кожного рівня одно головному квантовому числу (див. табл.1).

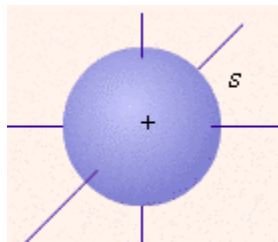
Тому число підрівнів на рівні теж одно головному квантовому числу.

Скільки орбіталей на різних підрівнях і чим відрізняються орбіталі одного підрівня? Орбіталі одного підрівня відрізняються напрямком (орієнтацією) у просторі.

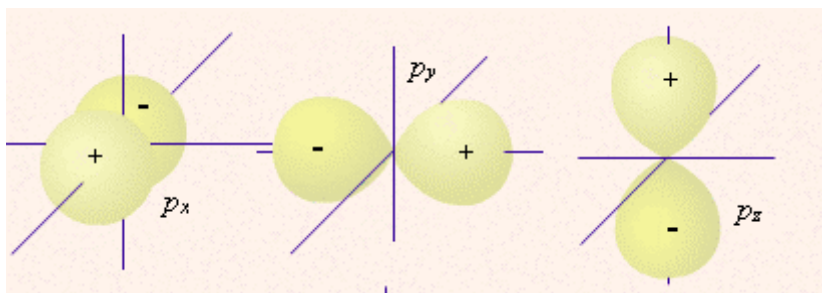
**Магнітне квантове число  $m$ , характеризує напрям орбіталей (електронних хмар) в просторі.**

Магнітне квантове число приймає значення цілих чисел від  $-l$  через 0 до  $+1$ .

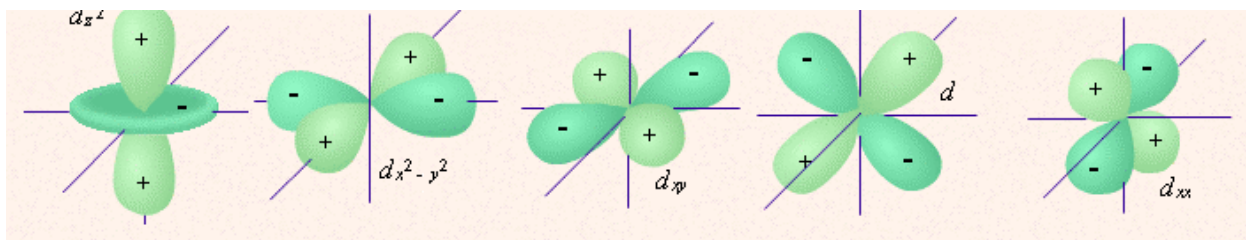
Кількість значень  $m$ , визначає число орбіталей на підрівні, наприклад **s-підрівень**:  $l=0 \rightarrow m_l=0 \rightarrow 1$  орбіталь.



**p-підрівень**:  $l=1 \rightarrow m_l=0 \rightarrow 1$  орбіталь.



**d-підрівень**:  $l=2 \rightarrow m_l=-2, -1, 0, +1, +2 \rightarrow 5$  орбіталей.



Число орбіталей на підрівні равно:  $2l+1$  (табл. )

Графічно будь-яка орбіталь зображується у вигляді клітки (квантової комірки):

s-підрівень

p-підрівень

d-підрівень

f-підрівень

Таблиця 4

Енергетичний рівень	Головне квантове число $n$	Значення $l$	Позначення підрівнів	Значення $m_l$	Число орбіталей на підрівні	Число орбіталей на рівні
K (перший)	1	0	1s	0	1	1
L (другий)	2	0	2s	0	1	4
		1	2p	-1, 0, +1	3	
M (третій)	3	0	3s	0	1	9
		1	3p	-1, 0, +1	3	
		2	3d	-2, -1, 0, +1, +2	5	

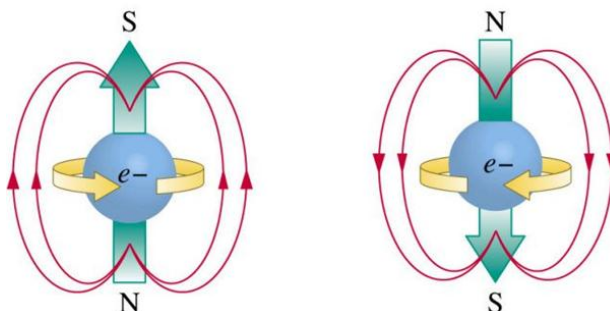
Загальне число орбіталей на енергетичному рівні:  $N_{\text{орб.}} = n^2$

Отже, кожна орбіталь і електрон, який знаходиться на цій орбіталі, характеризуються трьома квантовими числами: головним  $n$ , побічним  $l$  і магнітним  $m$ .

Електрон характеризується ще одним - квантовим числом (від англ. to spin – кружляти обертати).

Спінове квантове число (спін електрона)  $m_s$ , характеризує обертання електрона навколо своєї осі і приймає тільки два значення:  $+\frac{1}{2}$  та  $-\frac{1}{2}$

Схематично це можна показати так:



Електрон зі спіном  $+\frac{1}{2}$  умовно зображують так:  $\uparrow$ ; зі спіном  $-\frac{1}{2}$ :  $\downarrow$

**Принцип Паулі: говорить:**

**В атомі не може бути двох електронів з однаковим набором всіх чотирьох квантових чисел.**

Тому на одній орбіталі не може бути більше двох електронів; ці два електрони мають однаковий набір трьох квантових чисел ( $n, l, m$ ), і повинні відрізнятися спінами (квантовим числом  $m_s$ ):  $\uparrow\downarrow$

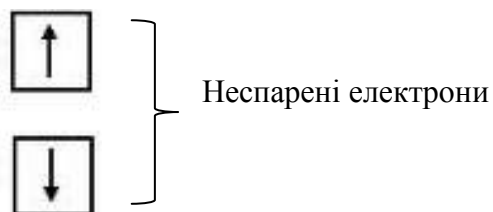
Таблиця 5

#### Максимальне число електронів на енергетичних рівнях

Рівень	Підрівень	Максимальне число електронів на підрівні	Максимальне число електронів на рівні
К (перший)	1s	2	2
L (другий)	2s	2	8
	2p	6	
M (третій)	3s	2	18
	3p	6	
	3d	10	

**Два електрона, які знаходяться на одній орбіталі, називаються спареними (або неподіленою електронною парою).**

Спарені електрони є електрони з протилежними (антипаралельними) спінами.



Загальне число електронів на енергетичному рівні:  $N_{\text{ел.}} = 2n^2$

*Що ще потрібно знати для встановлення будови електронної оболонки атома будь-якого елемента?*

Для цього потрібно знати порядок заповнення орбіталей електронами.

Порядок заповнення електронами атомних орбіталей визначає **принцип найменшої енергії** (принцип мінімуму енергії).

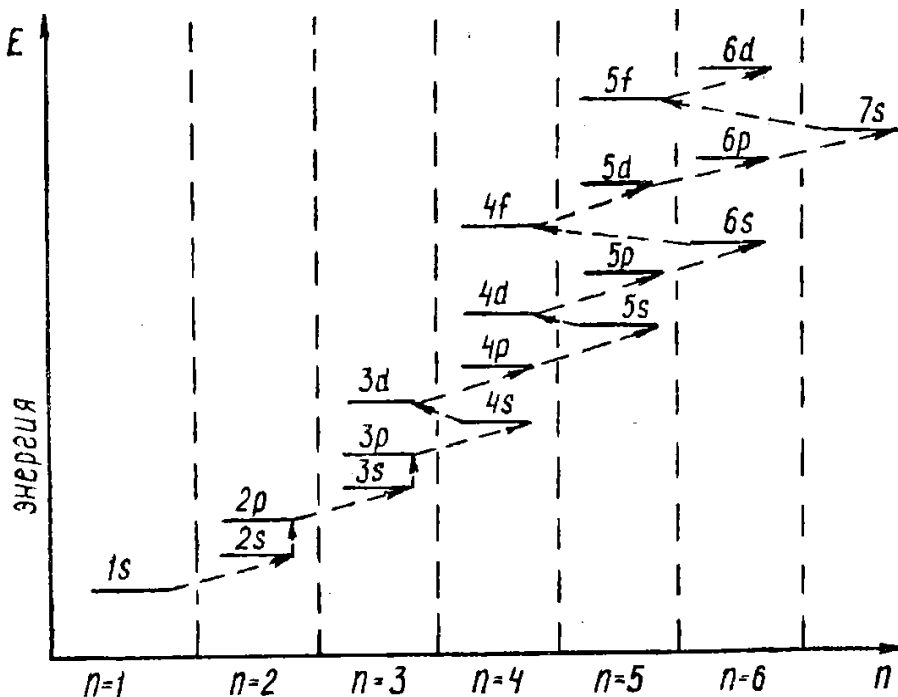
**Основне (сталій) стан атома** - це такий стан, який характеризується мінімальною енергією. Тому електрони заповнюють орбіталі в порядку збільшення їх енергії.

Орбіталі одного підрівня мають однакову енергію.

Наприклад, три орбіталі даного  $p$ -підрівня мають однакову енергію.

Тому принцип найменшої енергії визначає порядок заповнення енергетичних підрівнів: **електрони заповнюють енергетичні підрівні в порядку збільшення їх енергії.**

Як показує мал.1., найменшу енергію має  $1s$ -підрівень, який першим заповнюється електронами.



Мал.1 Розташування підрівнів по енергії та порядок їх заповнення електронами (показаний стрілками)

Потім послідовно заповнюються електронами наступні підрівні:  $2s$ ,  $2p$ ,  $3s$ ,  $3p$ . Після  $3p$ -підрівня електрони заповнюють  $4s$ -підрівень, так як він має меншу енергію, ніж  $3d$ -підрівень.

Це пояснюється тим, що енергія підрівня визначається сумою головного і побічного квантових чисел, тобто сумою  $(n + l)$ . Чим менше ця сума, тим менше енергія, підрівня. (Наприклад, для  $4s$ -підрівня  $n + l = 4 + 0 = 4$ , а для  $3d$ -підрівня  $n + l = 3 + 2 = 5$ , тому  $E_{4s} < E_{3d}$ ).

Якщо суми  $n + l$  однакові для різних підрівнів, то їх енергія тим менше, чим менше головне квантове число  $n$ .

(Наприклад, для  $3d$ -підрівня  $n + l = 3 + 2 = 5$  і для  $4p$ -підрівня  $n + l = 4 + 1 = 5$ , але  $E_{3d} < E_{4p}$ , так як головне квантове число  $3d$ -підрівня дорівнює 3, а  $4s$ -підрівня - 4).

Викладені правила були сформульовані в 1951 р радянським ученим В.М. Клечковського (**правило Клечковського**).

Подальший порядок заповнення підрівнів зображений на рис. 1.

На підрівнях, які показані на рис.1, може розміститися 112 електронів. В атомах відомих елементів знаходиться від 1 до 110 електронів. Тому інші підрівні в основних станах атомів не заповнюються електронами. Нарешті, залишилося з'ясувати питання, в якому порядку електрони заповнюють орбіталі одного підрівня. Для цього потрібно познайомитися з **правилом Хунда**.

На одному підрівні електрони розташовуються так, щоб абсолютне значення суми спінових квантових чисел (сумарного спина) було максимальним. Це відповідає **стійкому стану атома**.

Розглянемо, наприклад, яке розташування трьох електронів на  $p$ -підрівні відповідає стійкому стану атома:



Розрахуємо абсолютне значення сумарного спина для кожного стану:

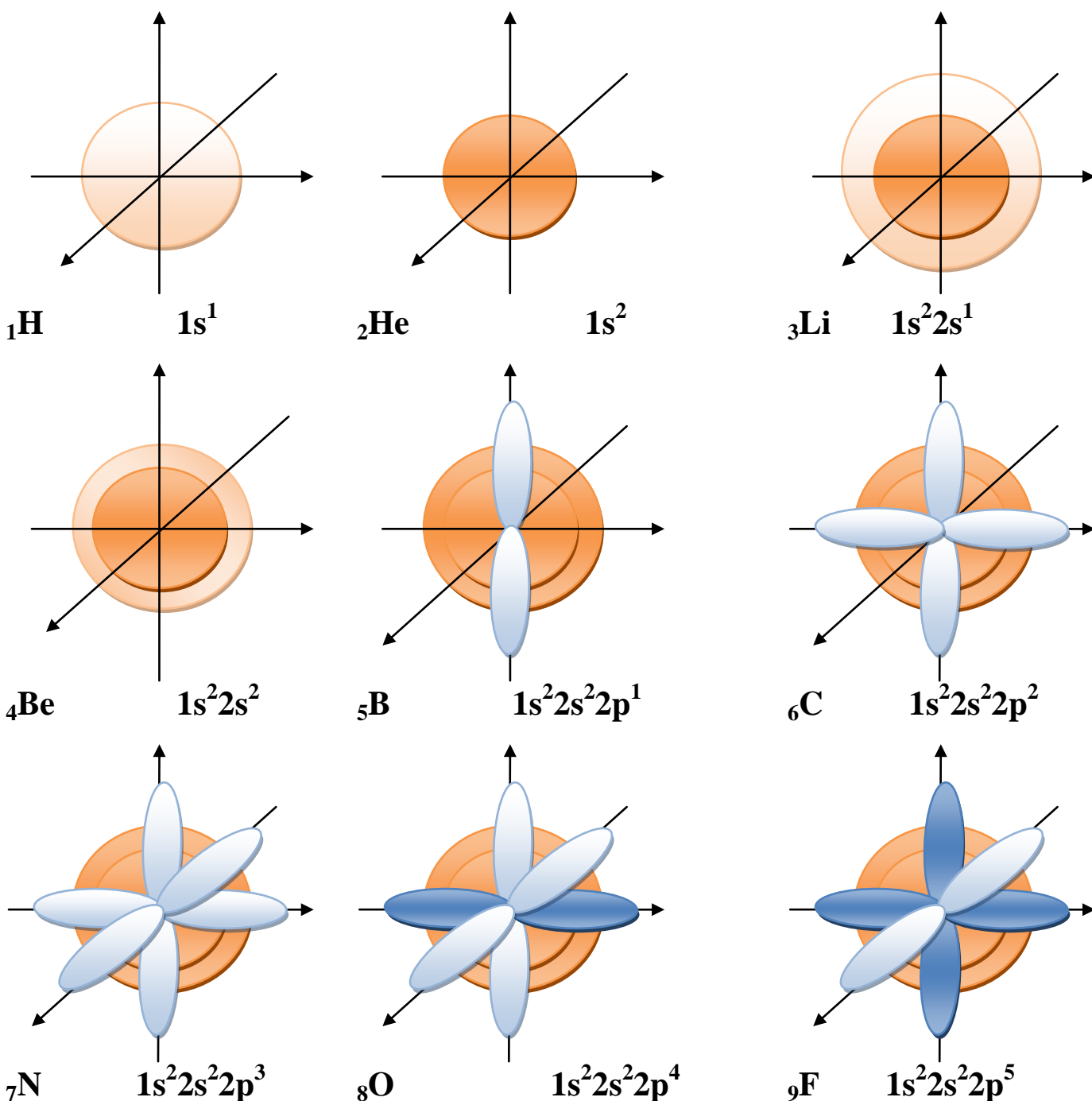
1)  $|\frac{1}{2} - \frac{1}{2} + \frac{1}{2}| = \frac{1}{2}$  ;   2)  $|\frac{1}{2} + \frac{1}{2} + \frac{1}{2}| = \frac{3}{2}$

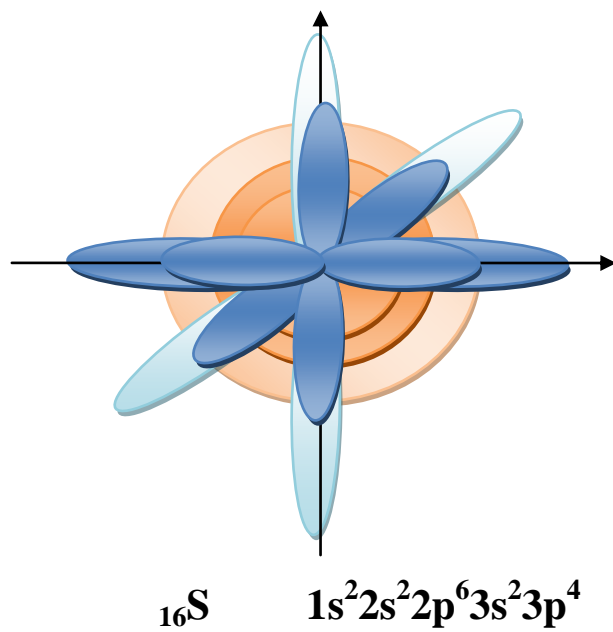
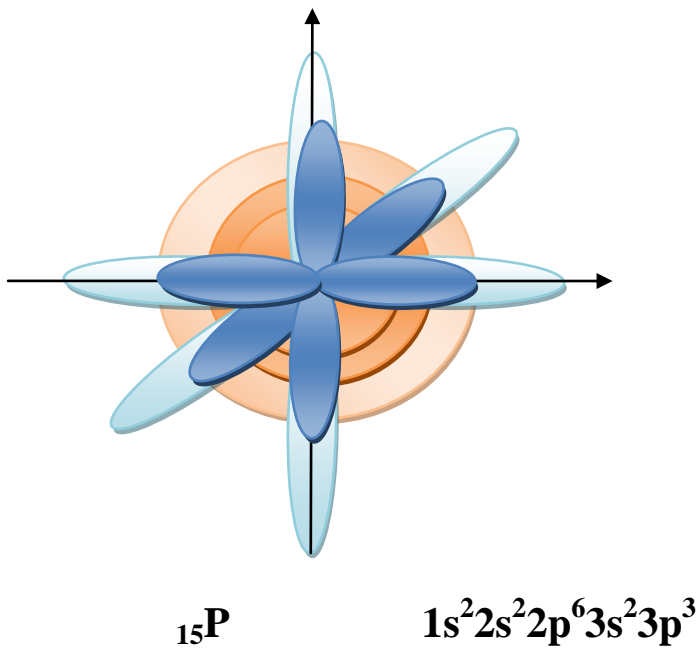
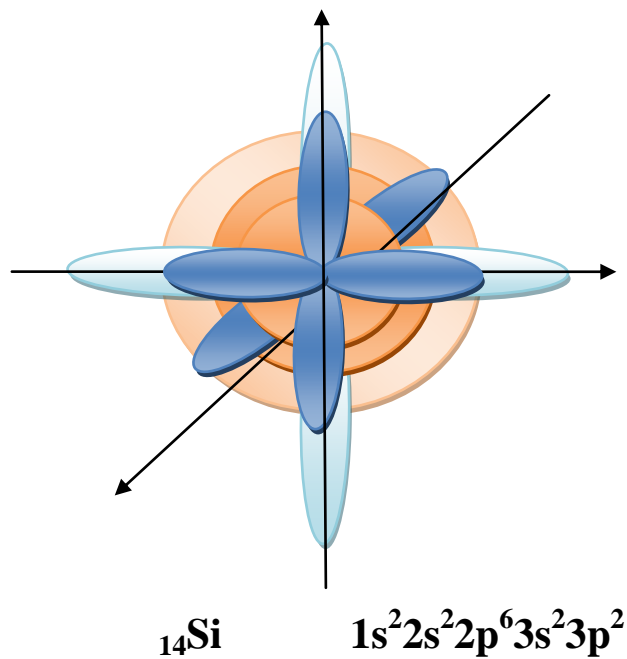
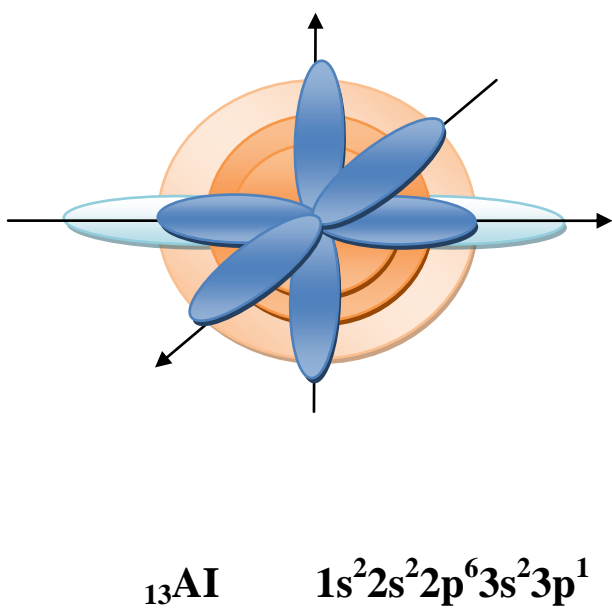
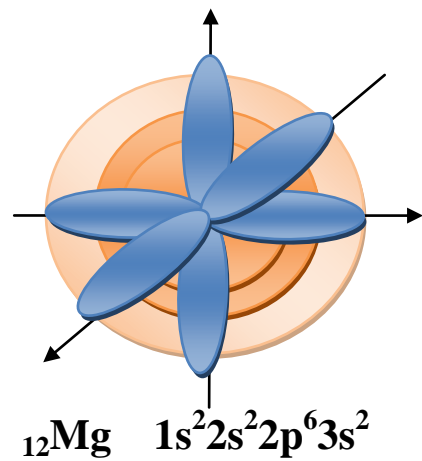
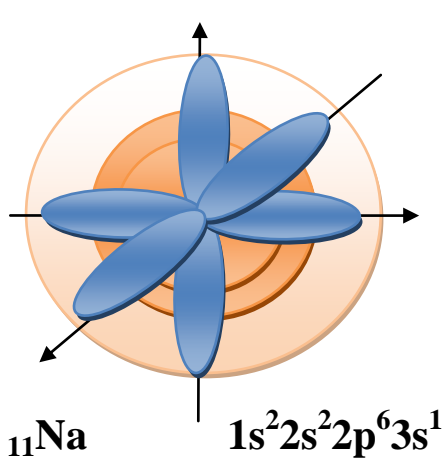
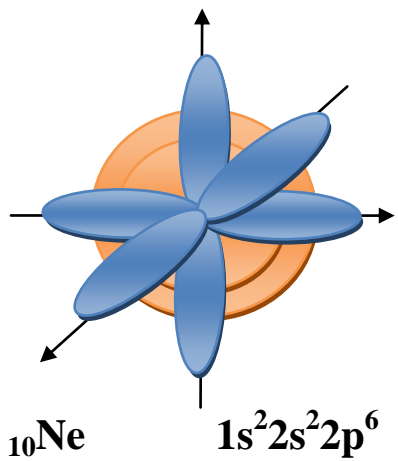
3)  $|\frac{1}{2} - \frac{1}{2} + \frac{1}{2}| = \frac{1}{2}$  ;   4)  $|\frac{1}{2} - \frac{1}{2} - \frac{1}{2}| = |-\frac{1}{2}| = \frac{1}{2}$

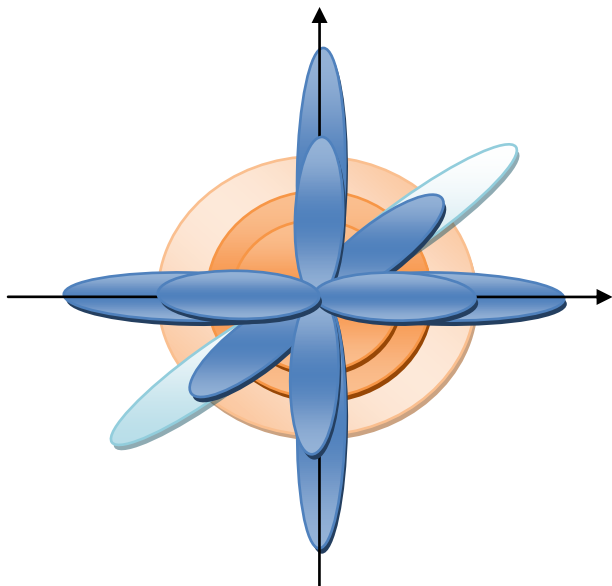
5)  $|\frac{1}{2} - \frac{1}{2} - \frac{1}{2}| = |-\frac{1}{2}| = \frac{1}{2}$

Максимальним абсолютним значенням сумарного спина характеризуються стани 2 і 5. Тому саме вони відповідають стійким станам атома.

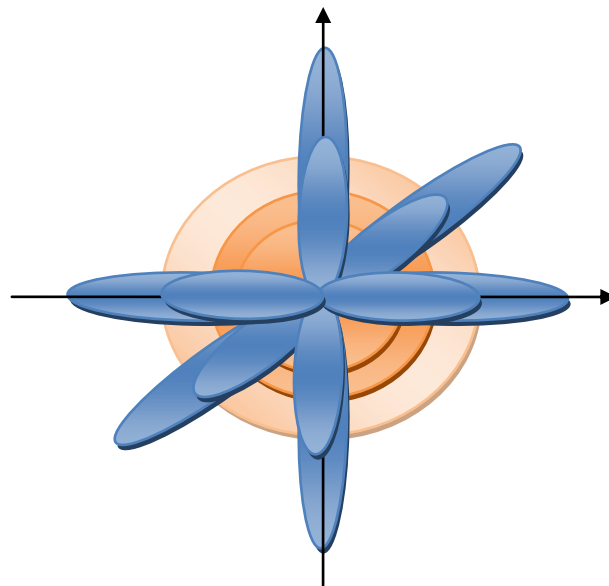
### Моделі електронних оболонок атомів I-III періодів







${}_{17}\text{Cl}$   $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^5$



${}_{18}\text{Ar}$   $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$

**ПОЯСНЕННЯ:**

світлий колір електронної оболонки – розташовані неспарені електрони,  
темний колір електронної оболонки – розташовані спарені електрони.