

Квантово-механични представи за строежа на електронната обвивка на атома. Квантови числа.

Химичните, физичните, механичните и много други свойства на всяко вещество се определят от неговия състав и строеж. Първостепенно значение за химията има познаването на строежа на атома и по-точно на неговата електронна обвивка, тъй като химичните свойства на веществата в най-голяма степен зависят от този строеж.

1. Модели на атома:

а) планетарен модел на Ръдърфорд за строежа на атома – атомът се състои от положително заредено ядро и обикалящи около него отрицателно заредени електрони. Масата на атома е съсредоточена в ядрото. Електроните (e) обикалят около ядрото подобно на планетите около слънцето.

недостатъци: Моделът не може да обясни защо електроните не падат върху ядрото, защо движението на заредени частици една спрямо друга поражда между тях допълнително привличане.

б) квантов модел за електронната обвивка на атома – Чрез експерименти е установено, че на електроните са присъщи освен *свойства на частици* (маса, електричен заряд и др.) и *свойства на електромагнитна вълна* (например наблюдавани са дифракция и интерференция на електрони). Бор (1913) прилага квантовата теория за светлината на Планк и Айнщайн, за да опише състоянието на електрона в електронната обвивка на атома. Той формулира следните постулати:

- електроните се движат около ядрото само по точно определени орбитали, наречени стационарни;
- при движението си по тези орбитали електроните не поглъщат и не излъчват енергия;
- електроните поглъщат или излъчват енергия само при прееминаването си от една стационарна орбита на друга. При това енергията на погълнатия или излъчения електромагнитен квант е равна на разликата в енергиите на електрона в крайното и началното състояние.

недостатъци: Моделът не е приложим за по-сложни атоми от водородния.

Луи дьо Бройл предлага вълновите свойства на електрона и на други частици с малка маса да се описват с уравнението:

$$\lambda = \frac{h}{m \cdot v}, \text{ където } \lambda \text{ е дължина на вълната на отговарящия на частицата вълнов процес;}$$

m – масата на частицата; v – нейната скорост; h – константа на Планк.

В квантовата механика свойствата на електроните се изучават чрез решаване на уравнение на стояща електромагнитна вълна, в което скоростта на светлината е заменена със скоростта на електрона, а масата му е въведена чрез формулата на Айнщайн за връзка между маса и енергия.

Шрьодингер предлага уравнение, решаването на което води до различни аналитични изрази на функцията, която описва свойствата на електрона. Тази функция се нарича вълнова функция и свързва енергията на електрона с координатите му спрямо атомното ядро.

Друго основно твърдение на квантовата механика е *принципът на неопределеността* (дефиниран от Хайзенберг) - за тела с малка маса е невъзможно с голяма точност едновременно определяне на тяхното място и скорост. Например в квантовата механика не се говори за орбита, защото това би означавало точно определяне на мястото на електрона. Съгласно квантовата механика е възможно да се определи само вероятността за намиране на електрона в дадена област от пространството.

Понятието орбита се заменя с *електронен облак* – област от пространството около ядрото на атома, големината и формата на която се намират като се реши уравнението на Шрьодингер. Вероятността да се намери електронът някъде вътре в електронния облак е 90%, а извън него – 10 %.

2. Квантови числа:

- а) главно квантово число n – определя енергията и размерите на електронния облак. По-големите стойности на n отговарят на по-голяма енергия и на по-големи размери на електронния облак. Електроните, които имат едно и също главно квантово число, образуват електронен слой (ниво). В зависимост от стойността му електронните слоеве се означават по следния начин:

стойност на n :	1	2	3	4	5	6	7	...
означение на слоя :	K	L	M	N	O	P	Q	...

- б) орбитално квантово число l - определя формата на електронния облак. Неговите възможни стойности се определят от конкретната стойност на главното квантово число и за слой с главно квантово число n , орбиталното квантово число l може да приема всяка една от стойностите $l = 0, 1, 2, \dots, (n-1)$

Състоянията на електроните, характеризиращи се с различни стойности на l , се наричат *енергетични поднива (подслоеве)*. Те се означават по следния начин:

стойност на орбиталното квантово число :	0	1	2	3	...
означаване на енергетичното подниво:	s	p	d	f	...

Електроните, намиращи се на съответните поднива, се наричат s-електрони, p-електрони, d-електрони и т.н.

За дадена стойност на n поднивата се подреждат според нарастващата енергия по следния начин: $s < p < d < f < \dots$

Състоянието на електрона в атома, отговарящо на конкретни стойности на n и l , се означава с цифра, съвпадаща със стойността на n и с буква, съответстваща на стойността на l . Например означението 3d се отнася за електроните, за които $n = 3$ и $l = 2$; казва се, че те се намират на 3d-подниво.

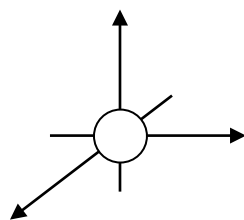
- в) магнитно квантово число m – определя пространствената ориентация на електронния облак, енергията и формата на който се определя от стойностите на n и l . Магнитното квантово число може да приема всички стойности на целите числа от $-l$ до $+l$, включително и 0. На дадена стойност на l отговарят $2l+1$ възможности за пространствено разположение на електронния облак.

Атомна орбитала – състояние на електрона, характеризиращо се с определени стойности на n , l и m . Тя представлява конкретна стойност на вълновата функция и характеризира енергетичното състояние на електрона. Атомната орбитала няма нищо общо с понятието орбита. Схематично орбиталата се означава с квадратче, а съответстващите ѝ електрони - със стрелки.

На s-състоянието ($l=0$) съответства само една стойност на m ($m=0$) и s-електронният облак може да се разположи в пространството само по един начин. Електронните облаци, отговарящи на p-атомна орбитала ($l=1$), се характеризират с три различни стойности на m ($-1, 0, +1$). Те се разполагат в три взаимноперпендикулярни направления, които се приемат и за направления на трите координатни оси на една правоъгълна координатна система. За електронните облаци, отговарящи на d-атомна орбитала ($l=2$), са възможни пет различни стойности на m ($-2, -1, 0, +1, +2$) и съответно пет различни

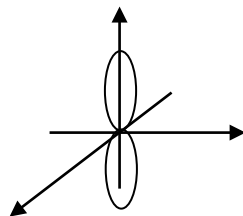
пространствени ориентации на електронните облаци, които за разлика от s- и p-атомни орбитали може да имат две различни форми.

г) спиново квантово число s – характеризира собствения магнитен момент на електрона и не е свързано с движението му около ядрото. Стойностите на s не зависят от стойностите на другите квантови числа и може да бъдат $+1/2$ и $-1/2$.

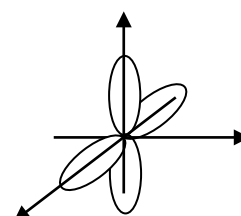


s-орбитала

$$l = 0$$

p_z-орбитала

$$l = 1$$

d_{x²-y²}-орбитала

$$l = 2$$

$$n > l \geq |m|$$

n (слой)	l (подслой)	m (квантови клетки)	s (электроны)	брой электроны	
				в подслой	в слой
1 (K)	0 (1s)	0	+1/2 , -1/2	2	2
2 (L)	0 (2s)	0	+1/2 , -1/2	2	8
	1 (2p)	-1	+1/2 , -1/2	6	
		0	+1/2 , -1/2		
		+1	+1/2 , -1/2		
3 (M)	0 (3s)	0	+1/2 , -1/2	2	18
	1 (3p)	-1	+1/2 , -1/2	6	
		0	+1/2 , -1/2		
		+1	+1/2 , -1/2		
	2 (3d)	-2	+1/2 , -1/2	10	
		-1	+1/2 , -1/2		
		0	+1/2 , -1/2		
		+1	+1/2 , -1/2		
+2		+1/2 , -1/2			

Строеж на електронната обвивка на атомите на елементите в периодичната система. Класификация на химичните елементи

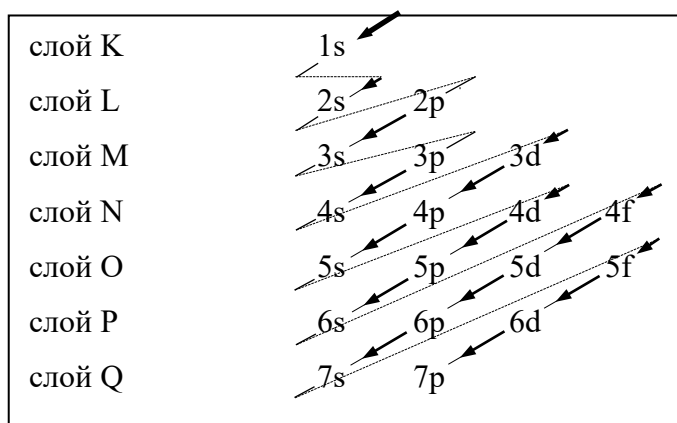
1. Принципи и правила за разполагане на електроните по енергетичните поднива.

- принцип на Паули – в един атом или друга квантовомеханична система не може да има два или повече електрона, състоянието на които да се описва с четири еднакви квантови числа. Следователно на една атомна орбитала, на която отговарят едни и същи стойности на n , l и m , може да се намират най-много два електрона с противоположни спинови числа s . Тези електрони се наричат електронна двойка. От този принцип може да се определи максималният брой електрони, които може да се разположат на едно енергетично ниво по формулата $2n^2$. Например за $n = 5 \rightarrow 2 \times 5^2 = 50$.
- принцип на минималната енергия – електронът се разполага на тази свободна или частично заета с електрони атомна орбитала, която е с най-ниската енергия.
- правило на Хунд – на едно енергетично подниво, електроните се разполагат отначало по един на атомна орбитала, а електронните двойки започват да се образуват едва когато на всяка атомна орбитала от поднивото вече се намира по един електрон.

2. Подреждане на енергетичните нива и поднива по нарастваща енергия

Съществуват два начина за определяне на това подреждане:

- правило на Клечковски – ако запишем символите на поднивата, както е показано на фигурата, последователността, по която те се запълват, е подобна на светкавица, започвайки от най-горе:

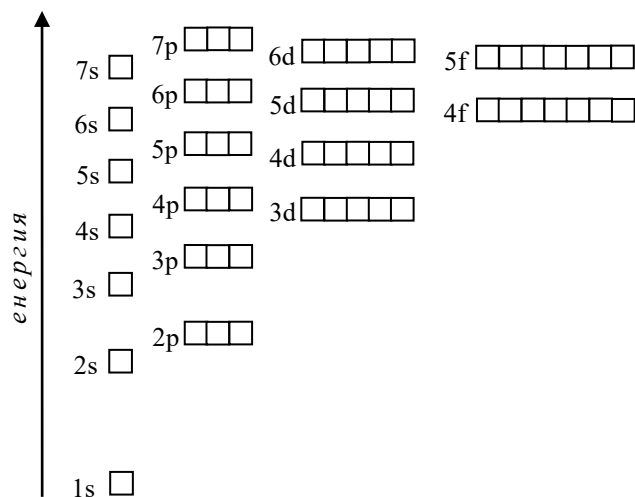


- правило на най-малката сума на $n + l$ – енергията на поднивата нараства с нарастване на сумата $n + l$. Например 3d-поднивото, при което $n = 3$, $l = 2$, $n+l=5$, е с по-висока енергия от 4s, при което $n = 4$, $l = 0$, $n+l = 4$. При една и съща стойност на сумата $n+l$ с по-ниска енергия е това подниво, което с по-малка стойност на n . Например $n+l = 5$ съществува на три различни енергетични поднива: 3d (при което $n = 3$, $l = 2$), 4p ($n=4$, $l = 1$) и 5s ($n = 5$, $l = 0$). От тях с най-ниска енергия е 3d-поднивото, след него е 4p-, а с най-висока енергия е 5s-подниво.

Следователно енергетичните нива се подреждат по нарастваща енергия по следния начин:

$$1s < 2s < 2p < 3s < 3p < 4s < 3d < 4p < 5s < 4d < 5p < 6s < 4f < 5d < 6p < 7s < 5f < 6d < 7p.$$

Подреждането на поднивата може да се представи и графично чрез квантови клетки – едно квадратче съответства на една атомна орбитала.



3. Периодичен закон и класификация на химичните елементи:

В периодичната система на елементите мястото на един елемент се определя от неговия атомен номер Z (броя на p). Броят на протоните в даден атом съвпада с поредния номер на елемента в периодичната система. Може да се приеме, че масата на атома е съсредоточена в ядрото, което е изградено от протони (p) и неутрони (n), които имат еднаква маса, равна на една атомна единица (1u). Следователно масата на атома може да бъде представена като сума от броя на протоните и на неутроните. Всеки протон има по един положителен електричен товар, а всеки електрон е носител на един отрицателен електричен товар. Броят на електроните в един атом е равен на броя на протоните, така че атомите като цяло са електронеутрални частици, състоящи се от положително заредено ядро и отрицателно заредена електронна обвивка.

Периоди и групи:

Вертикалните колони са наречени групи (колони), хоризонталните – периоди. Един елемент и неговото “семейство” (другите членове на групата) са с много подобни свойства, т.к. валентният им слой от електронната обвивка е подобен.

От периодичната система може да се извлече следната информация:

- **име и символ на елементите;**
- **атомната маса или моларната маса:**

АМ е приблизително равна на общия брой протони и неутрони.

Атомните маси на елементите са изключително малки (10^{-24} до 10^{-23} g). Например атомната маса на 1 атом водород е $1,674 \cdot 10^{-24}$ g. Следователно е по-практично да има единица, която да дава много по-прости стойности от порядъка на грамове. Затова Lorenzo Avogadro е въвел единицата мол (mol), за да обхване един изключително голям брой атоми.

1 mol е броя атоми, които се съдържат точно в 12 g въглерод 12 (с равен брой = 6 протони и неутрони). Въпреки че е определена за въглерода, тази единица е приложима за всички частици (атоми, молекули, йони и електрони).

$$N_A = \text{брой частици в } 1 \text{ mol} = 6,022 \cdot 10^{23}$$

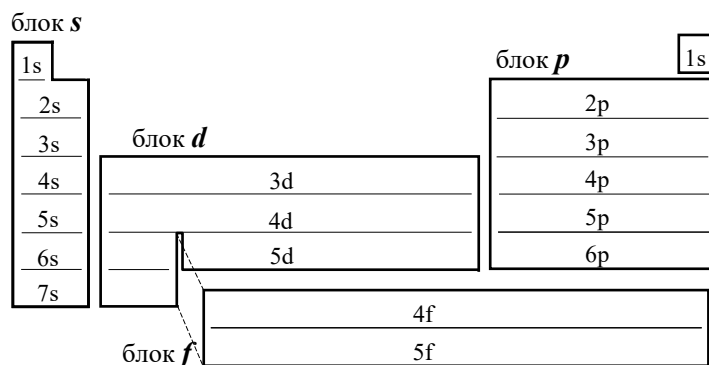
Следователно **един мол, от която и да е частица съдържа точно $6,022 \cdot 10^{23}$ броя от нея**. Така масата на елемента в периодичната система може да се използва както в **атомни единици**, така и в **g/mol**. Например атомната маса на елемента Na е $AM_{Na}=23 \text{ g/mol}$, което означава, че $6,022 \cdot 10^{23}$ атома натрий тежат точно 23 грама.

- **електронната конфигурация на елементите в периодичната система:**

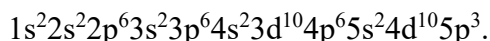
Проследявайки таблицата на елементите ред по ред в нарастване на атомния номер, можем да проследим електронната конфигурация на елементите и принципа на Паули.

Основното правило за неговата конструкция е връщане в първата колона всеки път за започване на запълването на нов слой.

По протежение на всеки период (започвайки от първия), подслоеве където се настаняват новите електрони са винаги от един и същи тип (*s*, *p*, *d*, *f*) в дадената колона. Освен това броят на електроните, които може да получи даден подслой определя ширината на всеки блок. Тази регулярност е удобно средство за намиране на електронната конфигурация на всеки един елемент. Достатъчно е да се **проследят подслоеве започвайки от водорода и следвайки реда на нарастване на атомните номера до избрания елемент.**



Пример: Антимонът $\text{Sb}(Z=51)$ е третия от *p*-елементите в 5 период; следователно притежава три електрона на 5*p*-ниво. Освен това всички нива предхождащи 5*p*, ред по ред на таблицата, са запълнени. Следователно електронната конфигурация на Sb е:



- химичните отнасяния на елементите;

Положението на един елемент в разгънатата таблица на елементите дава информация за неговите свойства (химични и физични) и за различните видове съединения, които образува.

Всички елементи от *s*- (без H и He), *d*- и *f*-блока, както и елементите от *p*-блока под линията В-Ат са **метали** - редутори, които отдават електрони в хода на химичните процеси. Останалите елементи от *p*-блока (без група VIII) са **неметали** – елементи с голям електронен афинитет и могат и да приемат електрони (окислителни). Най-силните редутори се намират в долния ляв ъгъл на периодичната система (5*s*, 6*s* и 7*s*), докато най-силните окислителни (акцептори на електрони) – в горния десен ъгъл. Елементите от група VIII имат напълно завършен най-външен електронен слой (*p*-подслой), поради което обикновено трудно приемат и отдават електрони. Те са наречени **благородни газове**.

Примерна задача за изпита:

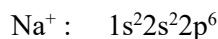
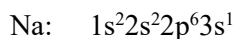
Елементът Na има пореден номер 11 и маса 23. Определете броя на електроните, на протоните и на неутроните.

$$\text{бр. } p = 11$$

$$\text{бр. } e^- = 11$$

$$\text{бр. } n = 23 - 11 = 12$$

Напишете разпределението на електроните в електронната обвивка на натриевите атоми и на натриевите йони.



Представете структурата на електронната обвивка на натрия чрез квантови клетки.

