

Неорганічна хімія

Роман Гладішевський



кафедра неорганічної хімії

*Львівський національний університет
імені Івана Франка*



Тема 25.

**Будова багатоелектронних
атомів.**

Наближені методи розрахунку електронних орбіталей

1. Метод нульового наближення – нехтують міжелектронним відштовхуванням.
2. Метод самоузгодженого поля (Хартрі-Фок, 1928-1920) – електрон взаємодіє не лише з ядром, але й з усередненим електричним полем решти електронів.
3. Метод констант екранування (Слейтер, 1929) – електрон рухається в центрально-симетричному полі, яке створюється ефективним зарядом ядра

$$Z_{\text{еф.}} = Z - S ,$$

$$S_{\text{Li}} = 1,7, Z_{\text{еф.}} = 3 - 1,7 = 1,3; \quad S_{\text{Na}} = 8,8, Z_{\text{еф.}} = 11 - 8,8 = 2,2.$$

Висновки:

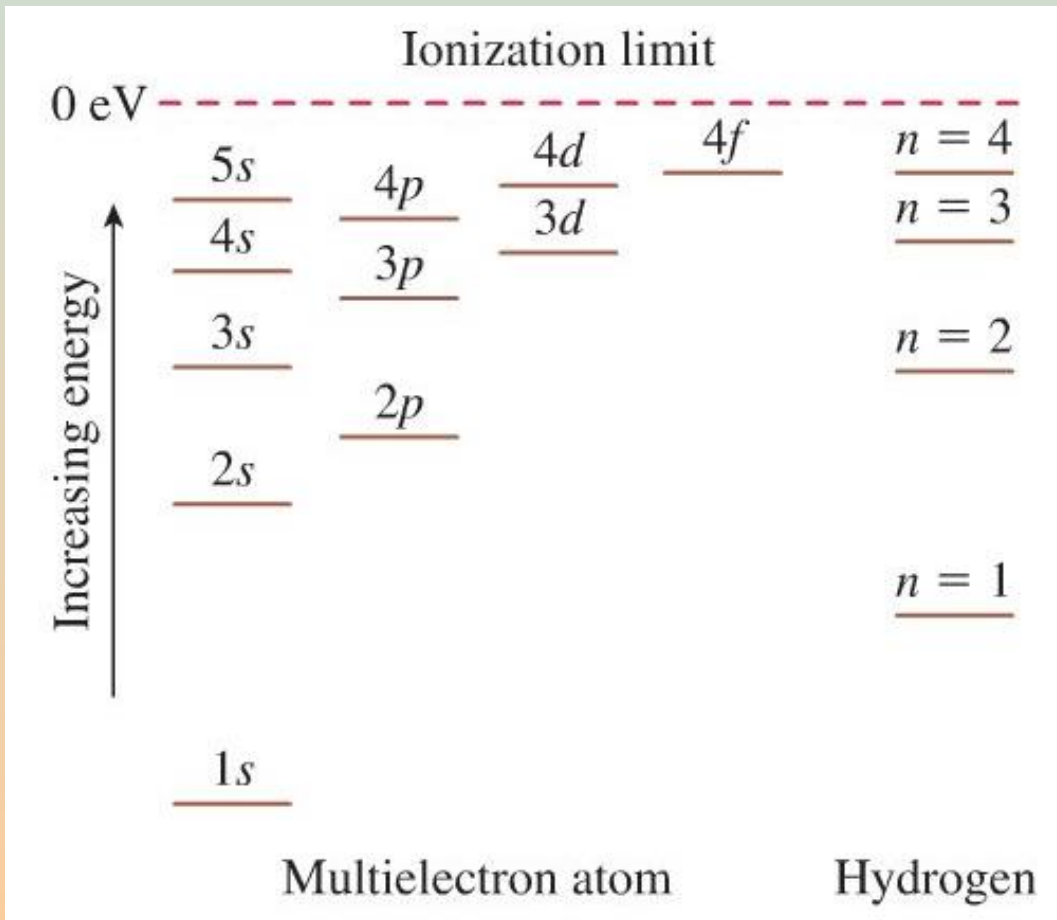
- Присутність інших електронів впливає тільки на радіальну складову хвильової функції електрона і не впливає сферичний розподіл електронної густини.
- Стан електрона визначається значеннями чотирьох квантових чисел n , l , m_l та m_s .
- Енергія електрона визначається значеннями головного та орбітального квантових чисел. Енергія збільшується зі збільшенням обох квантових чисел.
- Енергія орбіталей змінюється в залежності від порядкового номера елемента. Зі збільшенням заряду ядра зростає притягання електрона (та ж орбіталь) до ядра.

Розподіл електронів на енергетичних рівнях і підрівнях

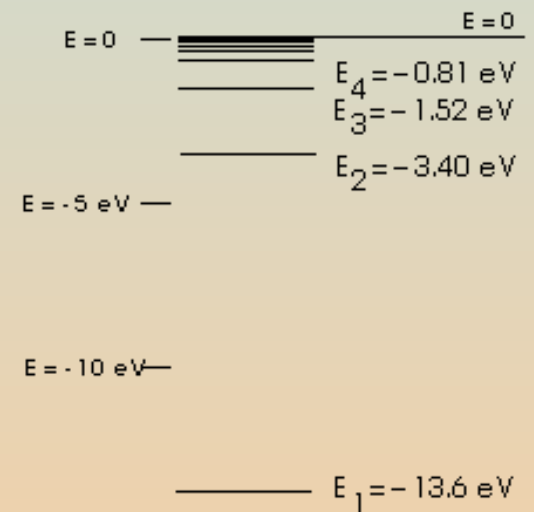
В багатоелектронних атомах заповнення електронних оболонок підпорядковується таким принципам і правилам:

- принцип мінімуму енергії;**
- принцип Паулі;**
- правило Гунда;**
- правило Клечковського.**

Принцип мінімуму енергії: електрони в першу чергу заповнюють вакантні орбіталі з найменшим значенням енергії.



$$E = -\frac{me^4Z^2}{2n^2\hbar^2}; E_n = -\frac{hR}{n^2}$$



$$E = -\frac{13.6}{n^2} \text{ eV}$$

Принцип Паулі (1925): кожний електрон в атомі має індивідуальний набір чотирьох квантових чисел.

n рівень

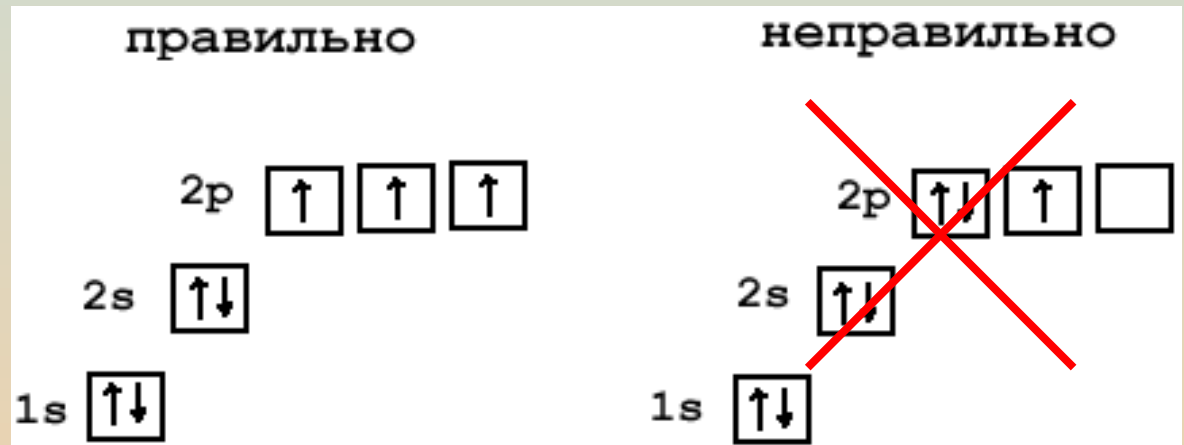
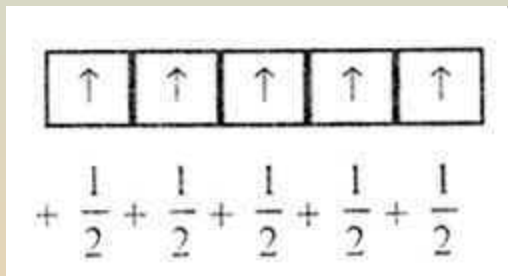
n^2 орбіталей на рівні, $(2l + 1)$ на підрівні
 $2n^2$ електронів на рівні, $2(2l + 1)$ на підрівні

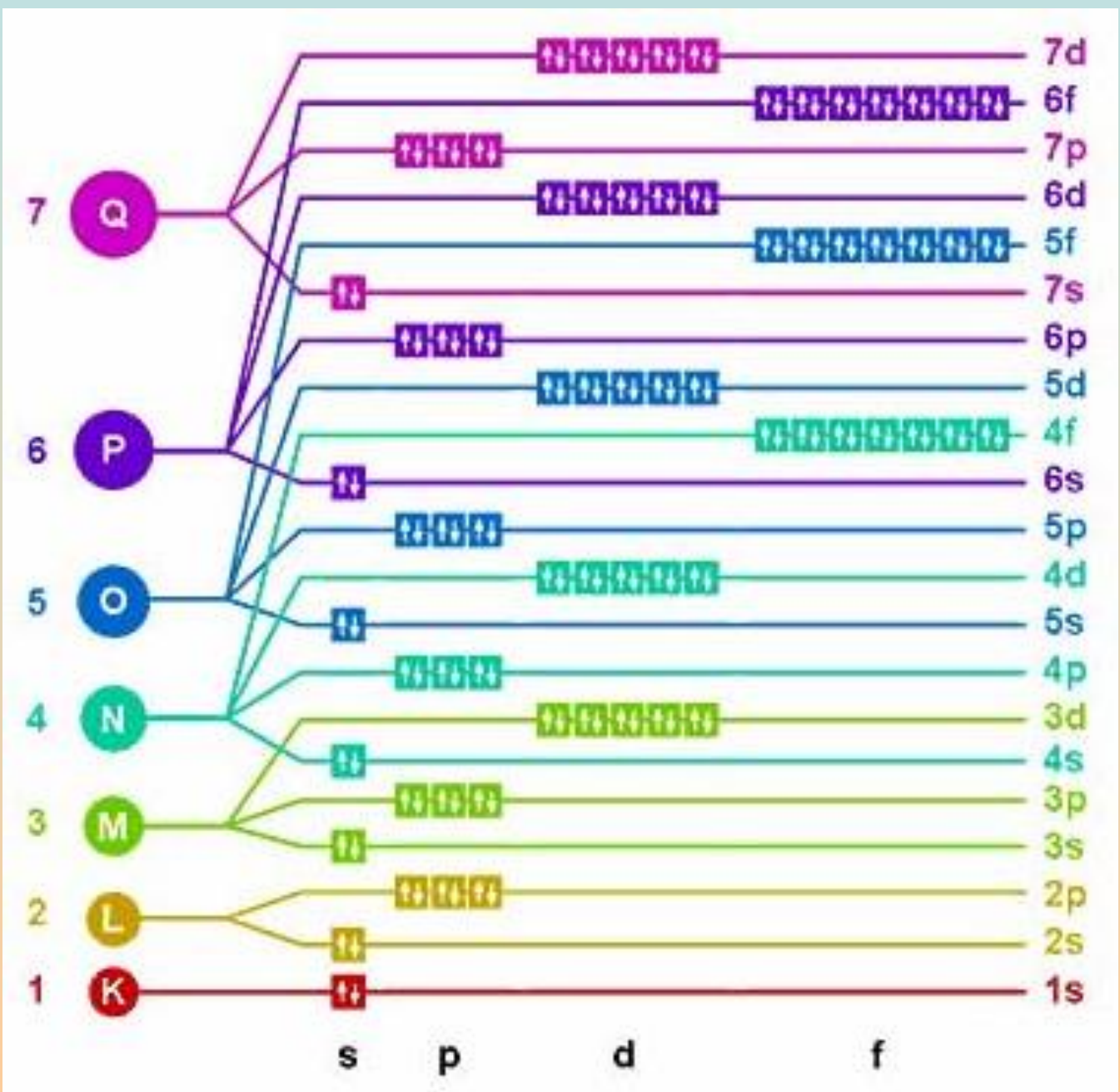


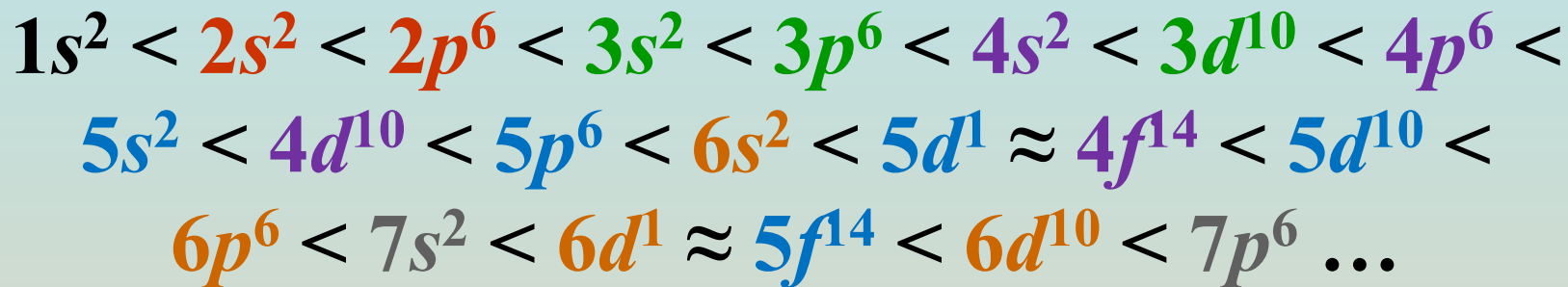
Вольфганг Паулі
1900-1958

1	2		3			4				5				
K	L		M			N				O				
2	8		18			32				50				
0	0	1	0	1	2	0	1	2	3	0	1	2	3	4
1s	2s	2p	3s	3p	3d	4s	4p	4d	4f	5s	5p	5d	5f	5g
2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	14	18

Правило Гунда (1927): найстійкішим для заданої електронної конфігурації є стан з найбільшим абсолютним значенням сумарного спінового моменту.







Правило Клечковського (1951): послідовне заповнення електронних орбіталей відбувається відповідно до збільшення суми головного та орбітального квантових чисел, а за однакових значень суми – у порядку збільшення головного квантового числа.

Виключення з правила Клечковського:

1. Після заповнення $6s^2$ або $7s^2$ -орбіталей наступний електрон з'являється на орбіталях $5d^1$ або $6d^1$.
2. Підрівні p , d і f мають підвищену стійкість, якщо вони порожні, заповнені наполовину, або заповнені цілком (${}_{24}\text{Cr}: 4s^1 3d^5$, ${}_{29}\text{Cu}: 4s^1 3d^{10}$).

