

## **IX. Електронска структура на атомот**

# *Електронска структура на атомот*

Тајната за хемиските својства на супстанците е скриена во електронската структура на атомот. Хемиските реакции се резултат на промени во електронската структура на атомите што учествуваат во хемиските реакции. Затоа, за разбирање на хемиските реакции, неопходно е да се проучи детално електронската структура на атомот.

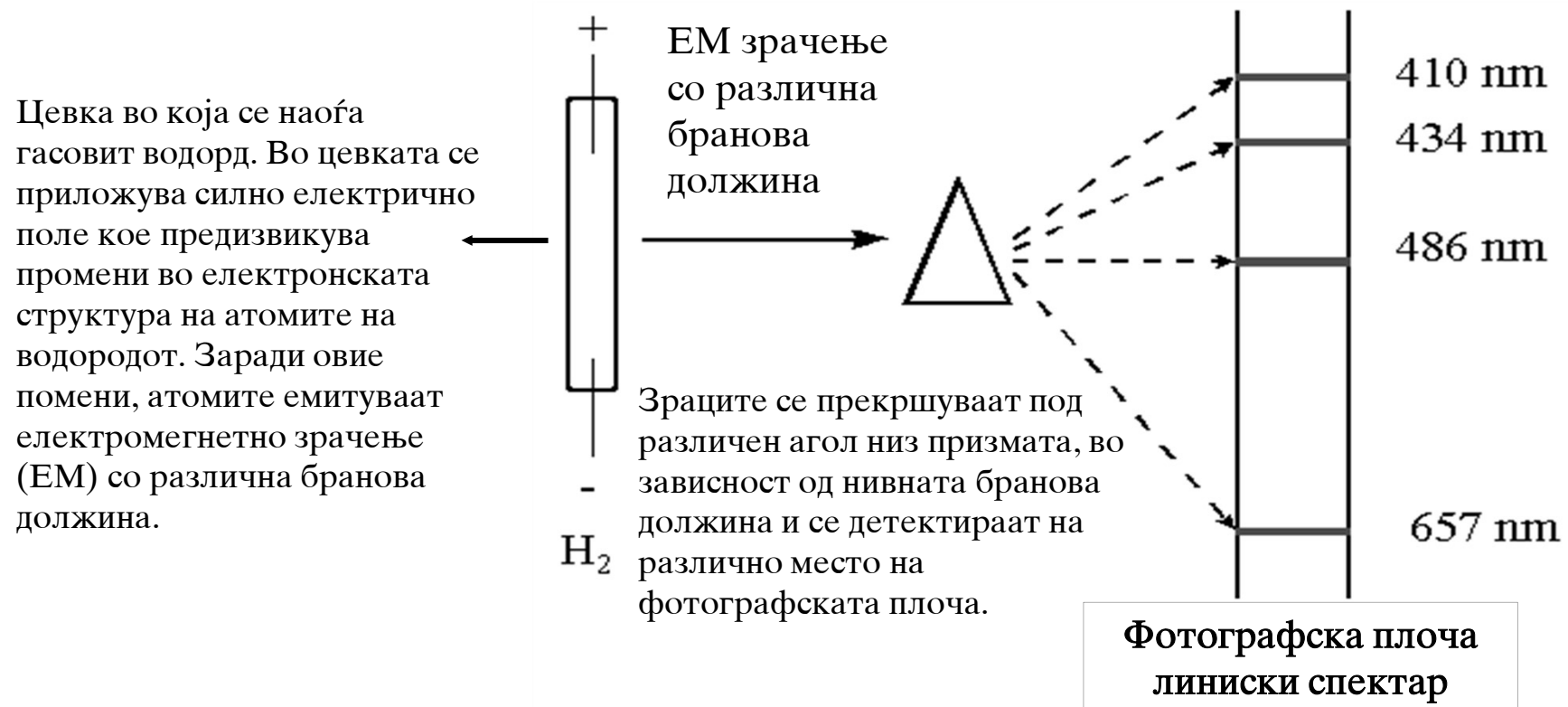
Под поимот *електронска структура на атомот* се подразбира

- *број на електрони во атомот;*
- *каде и како се распоредени електроните во атомот;*
- *колкава е енергијата на електроните;*

***Важно! Електроните имаат специфично однесување за кое не може да се најде аналогија во макроскопскиот свет!***

## ***Боров атомски модел (историски приод-поедноставена слика за електронската структура на атомот)***

*Шематски приказ на основниот експеримент за проучување на електронската структура на водородот.*



**Линиски спектар на електромагнетното (ЕМ) зрачење емитувано од гасовит водород под дејство на електрично поле со висок напон.**

Електромагнетното зрачење (спектарот на зрачењето) е во врска со електронската структура на атомите од кои е емитирано зрачењето.

**Боров постулат:**

- Електроните кружат околу јадрото по определени патеки наречени **електронски орбити**, слично на кружењето на планетите околу сонцето.

**Проблем!** Според класичните физички закони, движењето на наелектризирана честичка предизвикува емисија на енергија во облик на електромагнетно зрачење, што би резултирало со губење на енергија на електронот, односно негово спирално движење и конечно негова колизија (судар) со атомското јадро. Сепак ова не се случува.

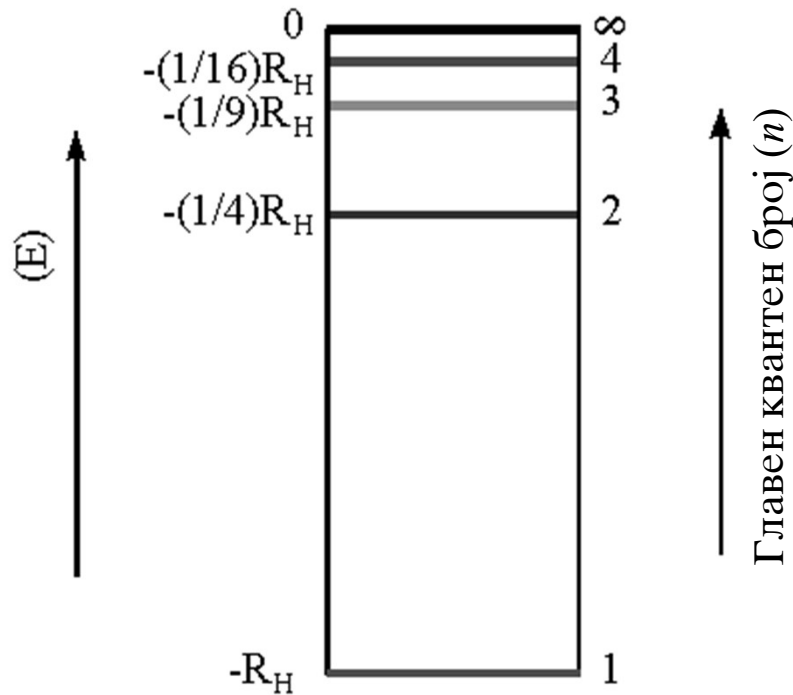
**Атомот е стабилна честичка. Заклучок: Класичните физички закони не можат да ја објаснат структурата на атомот.**

**Други Борови постулати:**

- Електроните можат да се движат само по строго определени (дозволените) орбити, со определена енергија и определен радиус (*позајмена идеја од Макс Планк за квантизирана енергетска состојба*).
- Електроните во дозволените орбити имаат определена енергија, при што не емитираат енергија во облик на ЕМ зрачење. Енергијата може да се пресмета според равенката:

$$E_n = -R_H \frac{1}{n^2}$$

$n$  се нарекува **главен квантен број** ( $n = 1, 2, 3..$ ), а  $R_H$  е Ридбергова константа ( $R_H = 2,18 \times 10^{-18} \text{ J}$ ).



Шемаски приказ на релативните енергии на електронот во дозволените орбити на атомот на водородот.

- \_ Колку е пониска енергијата, толку е атомот постабилен.
- \_ Најниската состојба ( $n = 1$ ) се нарекува **основна состојба**
- \_ кога електронот е во повисоко ниво ( $n = 2, 3..$ ), тогаш атомот е во **ексцитирана (возбудена) состојба**
- \_ со порастот на  $n$ , може да се стигне до состојба на целосно издвојување на електронот од атомот.
- \_ За премин на електронот од пониско ( $n_p$ ) кон повисоко енергетско ниво ( $n_f$ ), мора да биде апсорбирана енергија,  $\Delta E$ .
- \_ При премин во обратната насока, атомот го емитува истото количество енергија  $\Delta E$  во облик на ЕМ зрачење со определена фреквенција.

$$\Delta E = R_H \left( \frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_p^2} \right) = h \nu$$

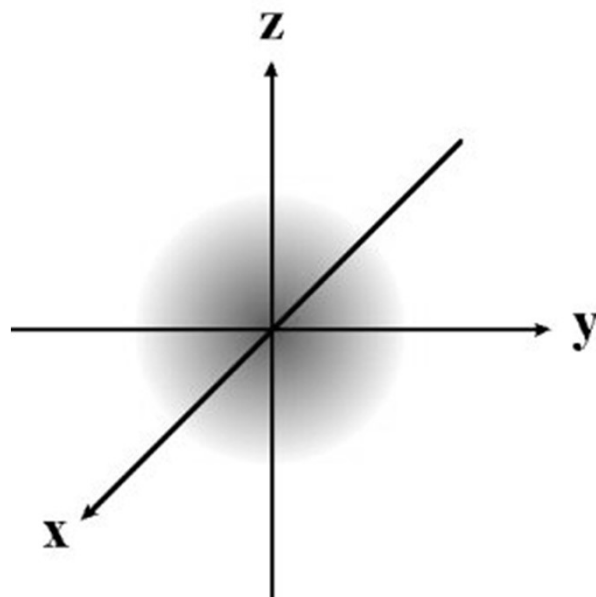
Важноста на Боровиот модел се огледа во идејата за **квантизирана енергетска состојба на електроните**. Но, моделот е применлив само за атомот на водородот или за едноелектронските јони ( $\text{He}^+$ ,  $\text{Li}^{2+}$ ...)

## ***Квантна механика:***

### ***Современи сознанија за електронската структура на атомот***

- о 1926 Erwin Schrödinger: Шредингеровата бранова равенка ја вклучува брановата и корпускуларната природа на електронот. Таа е основа на новата научна дисциплина наречена ***бранова механика*** или ***квантна механика***.
- о Решенијата на Шредингеровата равенка се серија од ***бранови функции***,  $\Psi$ . Функцијата  $\Psi$  нема конкретно физичко значење, но нејзиниот квадрат,  $\Psi^2$ , е еднаков на веројатноста на наоѓање на електронот во одреден дел од просторот околу атомското јадро.

***Важно:*** Според Боровиот атомски модел, електронот се движи по определени патеки, наречени ***орбити***, но според модерниот приод на Шредингер, не може да станува збор за определена патека на електронот, туку само за веројатност за наоѓање на електронот во определен дел од просторот околу атомот.



Шематски приказ на распределбата на електронската густина во атомот на водородот во неговата основна состојба. Интензитетот на бојата (затемнувањето) е пропорционален на веројатноста на наоѓање на електронот во просторот.

- Брановите функции, што се решенија на Шредингеровата равенка, се наречени **орбитали**. Функциите имаат определен облик кој е во врска со дистрибуцијата на електронската густина, или со други зборови, во врска со дистрибуцијата на веројатноста на наоѓање на електронот на определен дел од просторот. Покрај тоа, решенијата нудат информации и за енергетската состојба на електронот во определената орбитала.
- Боровиот атомски модел користи само еден број, наречен главен квантен број  **$n$** , за опишување на **орбитата** на електронот. Но, според Шредингеровата равенка, за опишување на електронските орбитали се користат три квантни броеви :  **$n$** ,  **$l$**  и  **$m_l$** .
  - **Главен квантен број  $n$ :**
    - Вредности: 1, 2, 3, итн. (прости цели броеви)
    - Со порастот на  **$n$** , електронската густина е се подалеку од атомското јадро, односно расте големината на орбиталата.
    - Со порастот на  **$n$** , расте енергијата на електронот, односно електронот е се послабо сврзан со атомското јадро.
  - **Орбитален (азимутален) квантен број  $l$ :**
    - Вредностите за  **$l$**  зависат од  **$n$**  и се движат од 0 до  **$n-1$**  за секоја вредност на  **$n$** .
    - Вредностите за  **$l$** , наместо со бројки, најчесто се означуваат со букви и тоа:  **$s$  ( $l = 0$ ),  **$p$  ( $l = 1$ ),  **$d$  ( $l = 2$ ),  **$f$  ( $l = 3$ ).********
    - Вредностите на  **$l$**  го дефинираат обликот, односно видот на орбиталите.
  - **Магнетен квантен број  $m_l$ :**
    - Вредностите за  **$m_l$**  зависат од  **$l$**  и се движат од  **$-l$**  до  **$+l$** .
    - Вредностите на  **$m_l$**  го дефинираат магнетниот момент на еден ист вид орбитали.  **$m_l$**  го дефинираат бројот на дегенерирани орбитали (орбитали со иста енергија) коишто најчесто се разликуваат само според ориентацијата во просторот.



- о Да ги погледнеме различните комбинации на квантните броеви, нивната взаемна поврзаност и нивното значење:

➤  $n = 1, l = 0$  ( $s$  орбитала);  $m_l = 0$  (една вредност за  $m_l$ , тоа значи една  $s$  орбитала). Првиот електронски слој содржи само една  $s$  орбитала.

➤  $n = 2$ :  
 $l = 0$  ( $s$  орбитала);  $m_l = 0$ ; (една вредност за  $m_l$ );  
 $l = 1$  ( $p$  орбитали);  $m_l = -1, m_l = 0, m_l = 1$ ; (три вредности за  $m_l$ )

*Во вториот слој постојат една  $s$  и три  $p$  орбитали.* Дека постојат три  $p$  дегенерирани орбитали дознаваме од трите вредности за магнетниот квантен број, диктирани од вредноста  $l = 1$  за орбиталниот квантен број.

➤  $n = 3$ ,  
 $l = 0$  ( $s$  орбитала);  $m_l = 0$  (една  $s$  орбитала);  
 $l = 1$  ( $p$  орбитали);  $m_l = -1, m_l = 0, m_l = 1$  (три  $p$  орбитали)  
 $l = 2$  ( $d$  орбитали);  $m_l = -2, m_l = -1, m_l = 0, m_l = 1, m_l = 2$  (пет  $d$  орбитали).

Од вредноста за  $l = 2$ , следуваат пет вредности за  $m_l$ , што значи пет дегенерирани  $d$  орбитали.

*Во третиот електронски слој постојат една  $s$ , три  $p$  и пет  $d$  орбитали.*

*Пример:*

| <b><math>n</math></b><br>(главен квантен број) | <b><math>l</math></b><br>(азимутален квантен број)<br>(облик на орбиталите) | ознака на<br>орбиталите со<br>букви (тип на<br>орбитали) | <b><math>m_l</math></b><br>(магнетен<br>квантен број)<br>(ориентација на<br>орбиталите) | број на<br>различни<br>орбитали |
|------------------------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------|----------------------------------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------------|
| <b>3</b>                                       | <b>0</b>                                                                    | <b>s</b>                                                 | <b>0</b>                                                                                | <b>1</b>                        |
|                                                | <b>1</b>                                                                    | <b>p</b>                                                 | <b>-1, 0, 1</b>                                                                         | <b>3</b>                        |
|                                                | <b>2</b>                                                                    | <b>d</b>                                                 | <b>-2, -1, 0, 1, 2</b>                                                                  | <b>5</b>                        |

➤ Множеството орбитали со ист главен квантен број  **$n$**  се нарекува *електронски слој* или *електронска лушпа*.

➤ Множеството орбитали со ист главен квантен број  **$n$**  и орбитален квантен број  **$l$** , се нарекува *електронски потслој* или *подлушпа*.

- о Бројот на електронски потслоеви во одреден слој е еднаков со главниот квантен бројот на слојот. Првиот слој ( $n = 1$ ) има само еден потслој ( $s$  потслојот). Вториот слој ( $n = 2$ ) има два потслоеви ( $s$  и  $p$  потслој). Третиот слој ( $n = 3$ ) има три потслоеви ( $s$ ,  $p$  и  $d$  потслој) итн.



Секој потслој содржи определен број орбитали:

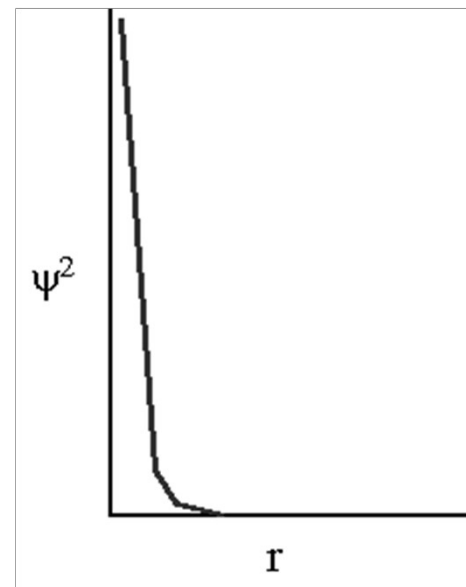
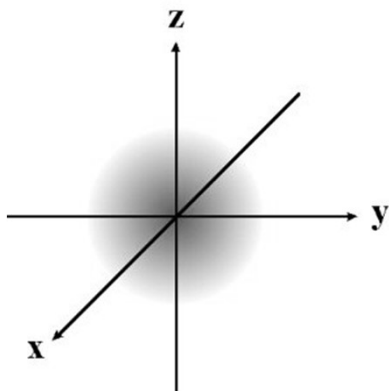
- потслојот  $s$  содржи една орбитала;
- потслојот  $p$  содржи три орбитали;
- потслојот  $d$  содржи пет орбитали;
- потслојот  $f$  содржи седум орбитали.

Секој атом на водород при обична температура се наоѓа во својата основна состојба. Тоа значи дека неговиот електрон се наоѓа во  $1s$  орбиталата. Другите енергетски нивоа (орбитали) се празни, непополнети. За да електронот премине во повисоките енергетски слоеви потребно е да се апсорбира енергетски квант со точно определена фреквенција и количина енергија што одговара на разликата помеѓу енергетските нивоа помеѓу кои се врши електронскиот премин.

# Атомски орбитали

- о *S* орбитали

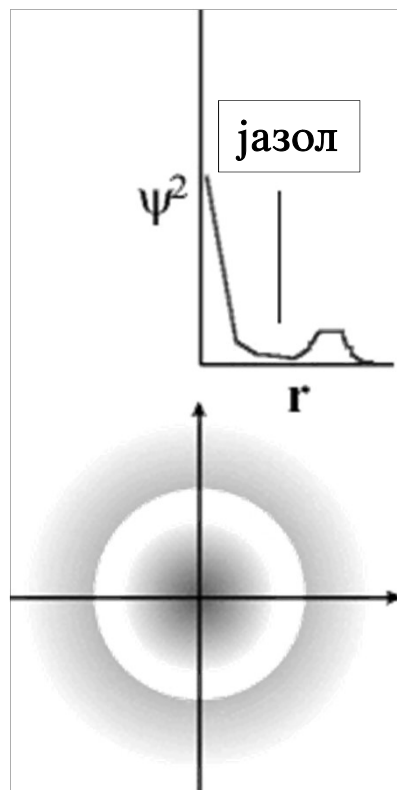
*1s* орбиталата е сферно симетрична, односно има облик на сфера.



*1s* орбитала. Зависност на веројатноста за наоѓање на електронот  $\Psi^2$  од растојанието од атомското јадро  $r$ .

**Важно:** Во *1s* орбиталата веројатноста за наоѓање на електронот во дел од просторот далеку од атомското јадро е скоро нула, односно, веројатноста драстично опаѓа со порастот на растојанието.

о *S орбитали во повисоките електронски слоеви.*



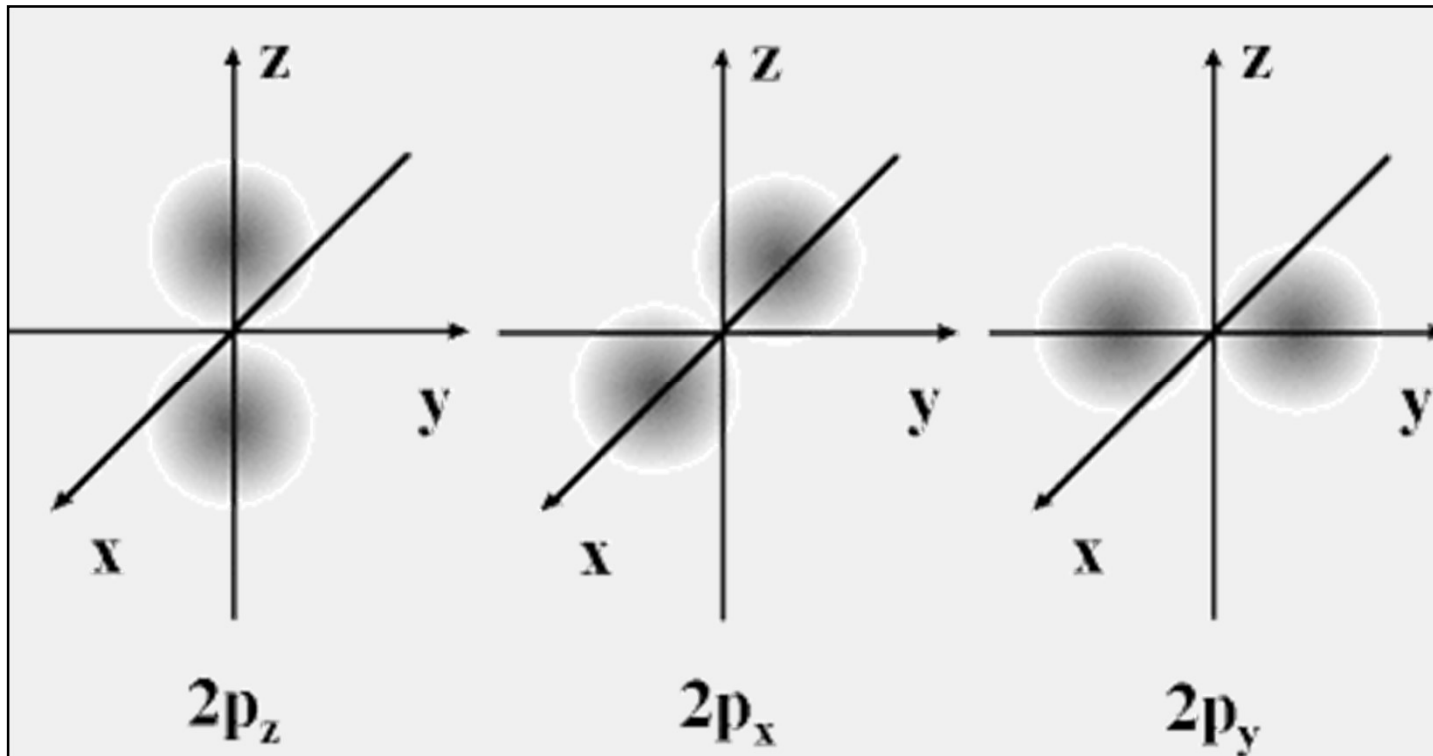
Веројатноста на наоѓање на електронот кај  $2s$  орбиталата најпрво опаѓа со порастот на растојанието од атомското јадро, потоа повторно расте, постигнувајќи локален максимум, а потоа повторно опаѓа и асимптотски се стреми кон вредност нула. Според ова, иако  $2s$  орбиталата има сферен облик, распределбата на електронската густина во сферата не е хомогена. Електронската густина е најголема близу до јадрото. Оддалечувајќи се од јадрото, таа опаѓа скоро до нулта вредност и потоа повторно расте. Затоа за  $2s$  орбиталата се вели дека има еден јазол. Јазолот го покажува делот од просторот каде е многу мала веројатноста за наоѓање на електронот.

*1s орбиталата нема јазол; 2s орбиталата има 1 јазол; 3s има 2 јазли итн. Колку е “повисока” s орбиталата, толку е поголема веројатноста за наоѓање на електронот подалеку од атомското јадро. Понепрецизно кажано (но поразбирливо) тоа значи дека 2s орбиталата е поголема од 1s, а 3s орбиталата е поголема од 2s итн.*

*2s орбитала. Зависност на веројатноста за наоѓање на електронот од растојанието од атомското јадро и шематски приказ на напречениот пресек на 2s орбиталата.*

### ***p** орбитали*

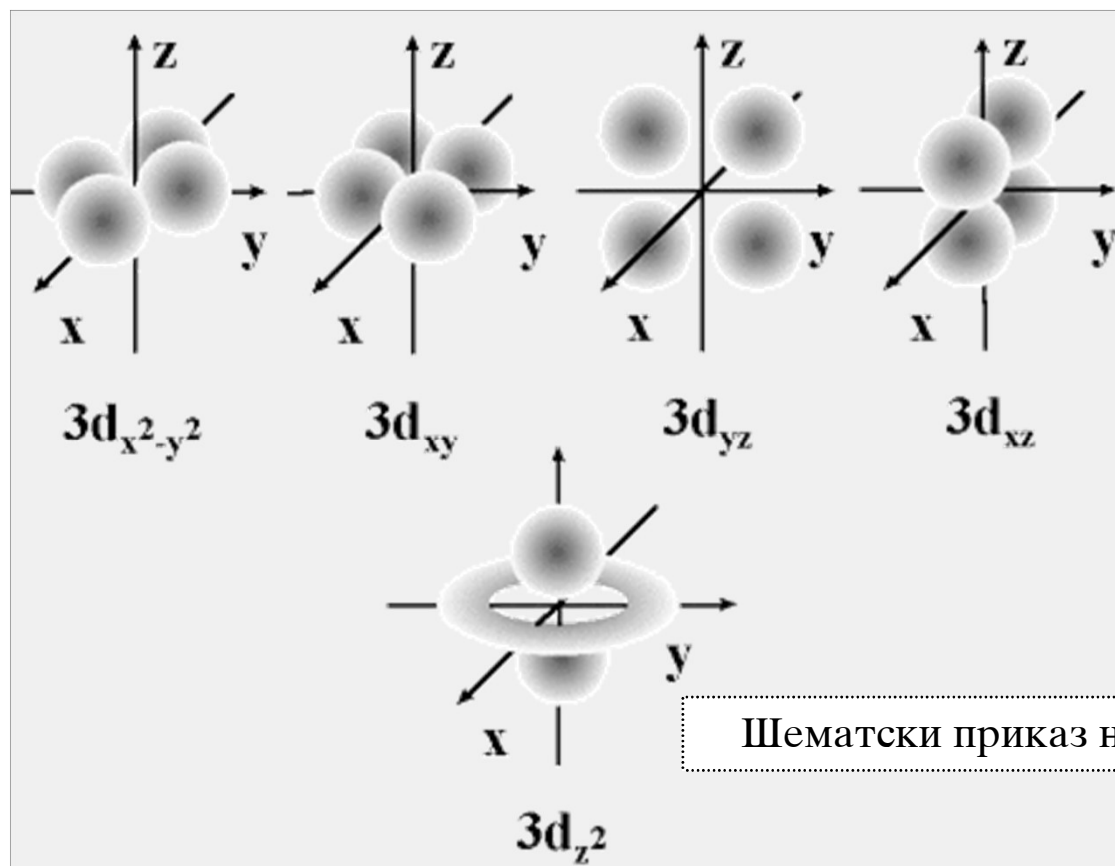
- о **p** орбиталите имаат облик на просторни осумки со јазол во атомското јадро.
- о Постојат три **p** орбитали што се разликуваат само по нивната ориентација во просторот.



*Шематски приказ на p орбиталите.*

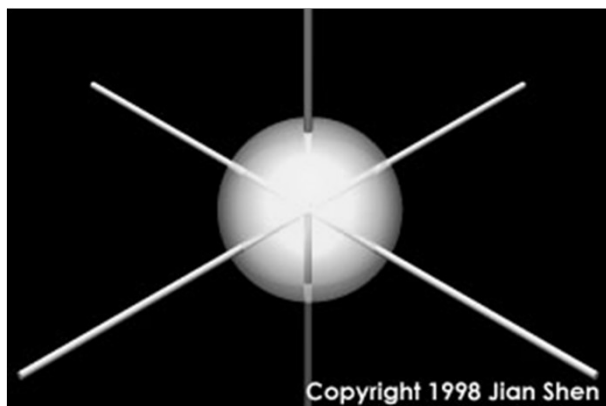
## *d* орбитали

- Во третиот електронски слој, а и во повисоките слоеви, постојат по пет **d** орбитали со следниов облик и ориентација во просторот.

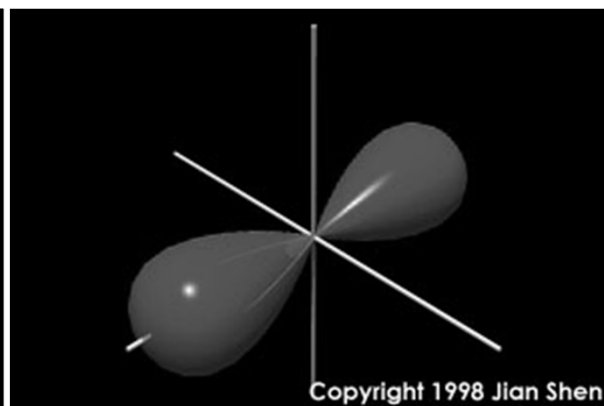


Шематски приказ на **d** орбиталите.

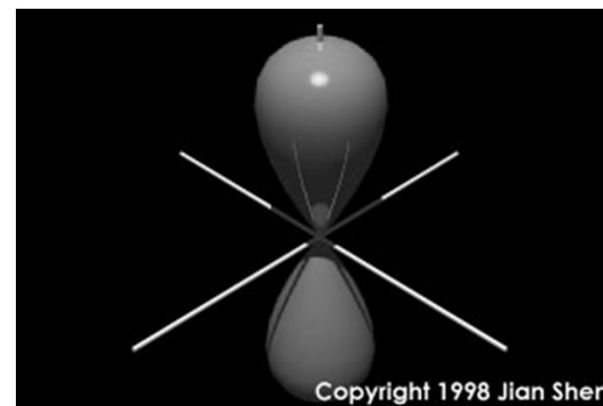
*Забелешка:* Иако  $3d_{z^2}$  орбиталата има значително различен облик од останатите **d** орбитали, нејзината енергија е идентична со останатите **d** орбитали.



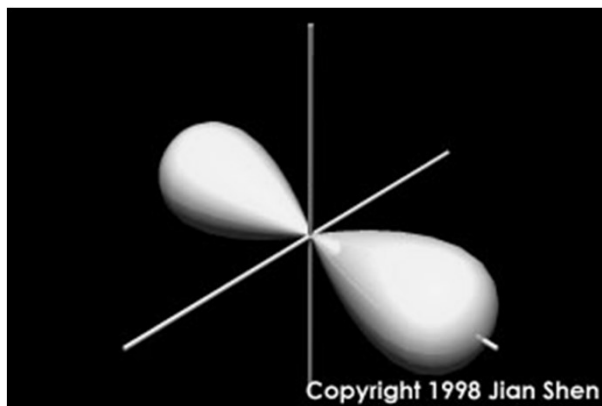
$s$ -орбитала



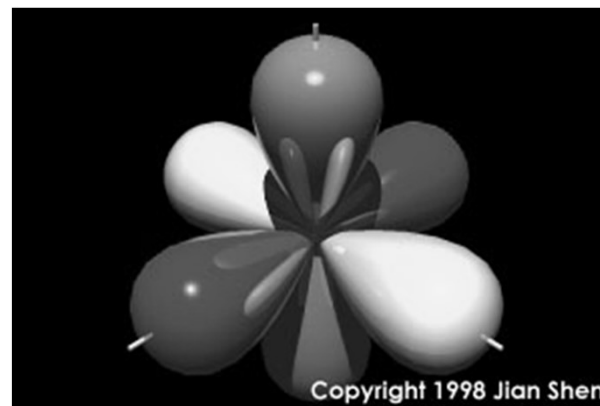
$p_x$ -орбитала



$p_y$ -орбитала

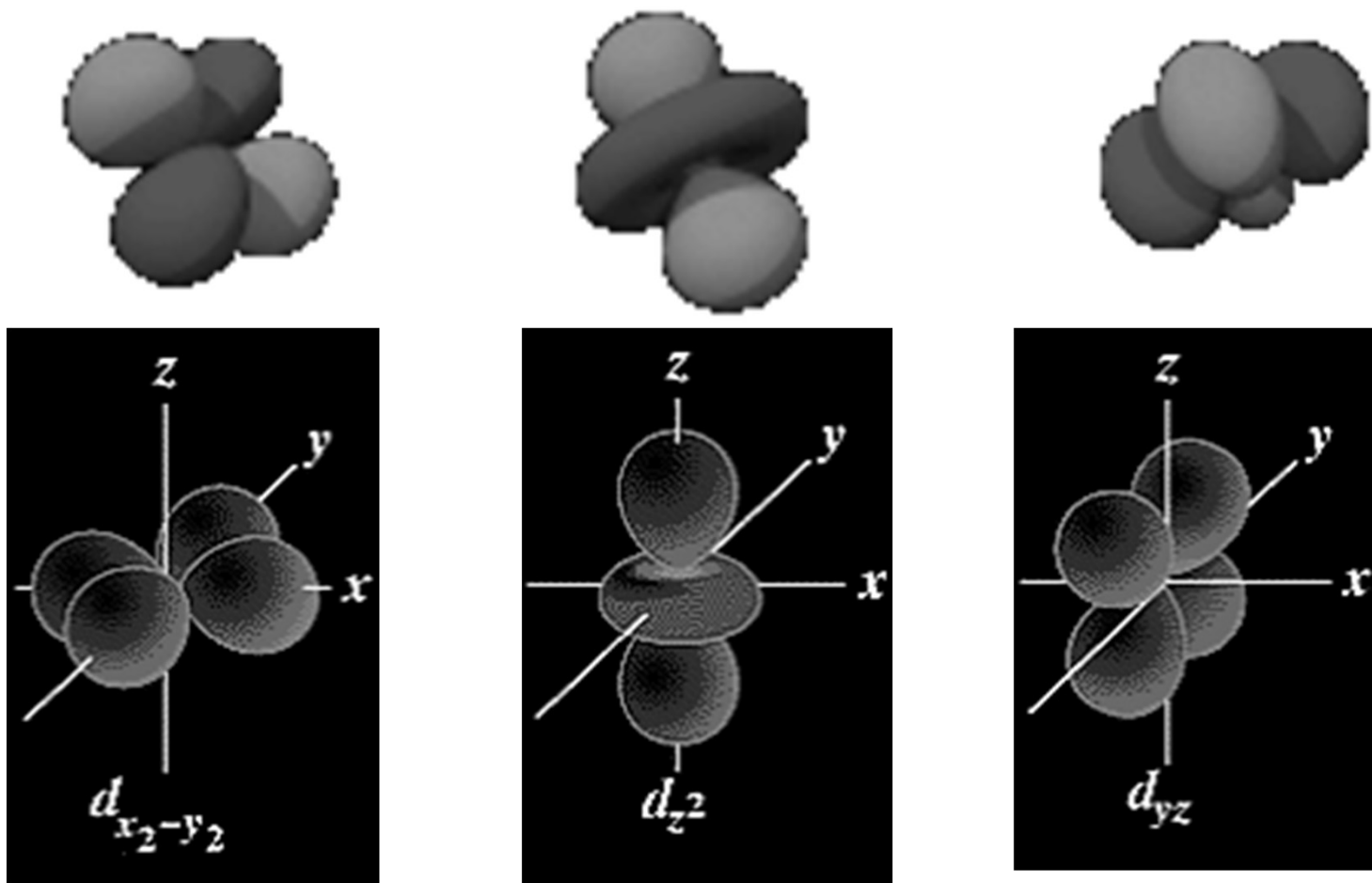


$p_z$ -орбитала



Трите  $p$ -орбитали





$d$ -орбитали

# Орбитали кај атоми со повеќе електрони

- Атомот на водородот содржи само еден електрон и тоа е наједноставниот електронски систем. Електронот е сместен во 1s орбиталата или во најниското енергетско ниво. Другите електронски слоеви, и потслоевите во нив, се празни. Во рамките на еден слој, сите празни потслоеви имаат иста енергија. На пример, 2s и 2p имаат иста енергија; или 3s, 3p и 3d имаат иста енергија.
- Кога во атомот се наоѓаат повеќе електрони, обликот на орбиталите е идентичен како кај водородот, но енергијата на потслоевите во рамките на еден слој не е идентична, заради постоење на *електрон-електрон одбивните интеракции*.



## Енергија на орбиталите

Веројатноста електронот да се најде подалку од јадрото зависи од видот на орбиталата. Во рамките на еден електронски слој, веројатноста на наоѓање на електронот се менува според следнава шема:

$$\begin{array}{ccccccc} n(s) & < & n(p) & < & n(d) & < & n(f) \\ \text{блиску} & & & & & & \text{далеку} \end{array}$$

Во рамките на ист слој, *s* електроните се најблиску до јадрото, *p* електроните се подалеку, *d* електроните се уште подалеку, а *f* електроните се најдалеку.

Според ова, степенот на екранираност на атомското јадро е различен за различните орбитали во рамките на ист слој. Колку што електроните се подалеку, толку е екранираноста на јадрото поголема од страна на електроните што се поблиску до јадрото.

*Пример:* Од електроните во третиот слој, *3d* електроните се најмногу екранирани, а *3s* најмалку.

Во повеќе електронски атом, за даден главен квантен број (даден електронски слој),  $Z_{ef}$  опаѓа со порастот на орбиталниот (азимуталниот) квантен број на орбиталата  $l$ .

*Енергијата на електронот зависи од  $Z_{ef}$*

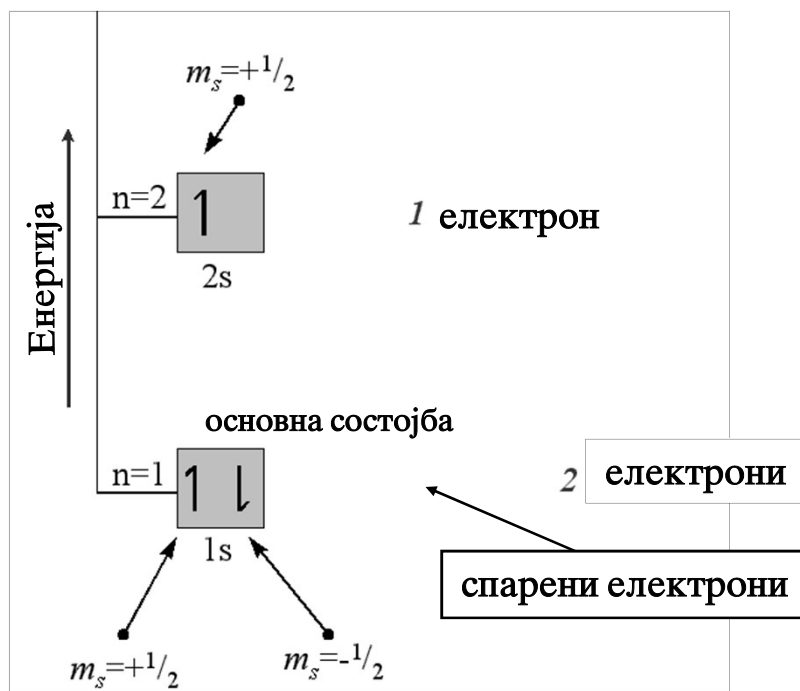
Во повеќе електронски атом, за даден главен квантен број (даден електронски слој), *енергијата на електронот расте со опаѓањето  $Z_{ef}$ , односно со порастот на орбиталниот квантен број  $l$ .*

## *Спин на електронот и принципот на исклучување на Паули*

- На кој начин електроните ги пополнуваат електронските орбитали?
- Линиските спектри на атомите покажале дека секоја единечна линија се состои од две, многу блиски по енергија (фреквенција), поодделни линии.
- Uhlenbeck и Goudsmit (1925) претпоставиле дека за опишување на состојбата на електронот неопходен е уште еден квантен број, наречен **СПИНСКИ КВАНТЕН БРОЈ  $m_s$** .
- $m_s$  има вредности  $1/2$  и  $-1/2$ .
- Според ова, за целосно опишување на состојбата на електронот неопходни се четири квантни броеви:  $n$ ,  $l$ ,  $m_l$  и  $m_s$ .
- $m_s$  е во врска со насоката на ротација на електронот околу својата оска.
- **Принципот на исклучување** на Wolfgang Pauli 1925: *Не можат да постојат два електрони во атомот со идентичен сет на сите четири квантни броеви* (сите четири квантни броеви да бидат идентични).
- Последица од Паулиевiot принцип: Во една орбитала можат да се населат најмногу *два електрони со различни спински броеви*.

# Електронска конфигурација

- Начинот на кој се распоредени електроните во атомските орбитали во рамките на еден атом се нарекува **електронска конфигурација**.
- Орбиталите се пополнуваат според редослед кој зависи од енергијата на електроните во соодветните орбитали, одејќи од **најниска кон повисока енергија**, при што во една орбитала можат да се сместат најмногу **два електрони**.



Шематски приказ на електронската конфигурација на Li

Li:  $1s^2 2s^1$  (се чита: еден s два два s еден).

Внимание! Овој начина на запишување е идентичен со начинот на запишување на степенуван број во математиката (пример  $a^2$ ). Меѓутоа, степенуваните броеви и електронската конфигурација немаат заедничка врска.

| Елемент | Вкупен број на електрони | Шематски приказ на орбиталите |    |    |  |  |    | Електронска конфигурација                       |
|---------|--------------------------|-------------------------------|----|----|--|--|----|-------------------------------------------------|
|         |                          | 1s                            | 2s | 2p |  |  | 3s |                                                 |
| H       | 1                        | 1                             |    |    |  |  |    | 1s <sup>1</sup>                                 |
| He      | 2                        | 1↓                            |    |    |  |  |    | 1s <sup>2</sup>                                 |
| Li      | 3                        | 1↓                            | 1  |    |  |  |    | 1s <sup>2</sup> 2s <sup>1</sup>                 |
| Be      | 4                        | 1↓                            | 1↓ |    |  |  |    | 1s <sup>2</sup> 2s <sup>2</sup>                 |
| B       | 5                        | 1↓                            | 1↓ | 1  |  |  |    | 1s <sup>2</sup> 2s <sup>2</sup> 2p <sup>1</sup> |

Хелим (He) - пополнет електронски слој, стабилна електронска конфигурација (“стабилна”-значи ниска енергија).

Во атомот на В не е важно која p орбитала ќе биде прва пополнета, зашто сите p орбитали имаат иста енергија.

| Елемент | Вкупен број на електрони | Шематски приказ на орбиталите |                      |                      |                      |                      |            | Електронска конфигурација |
|---------|--------------------------|-------------------------------|----------------------|----------------------|----------------------|----------------------|------------|---------------------------|
|         |                          | 1s                            | 2s                   | 2p                   |                      |                      | 3s         |                           |
| C       | 6                        | $\uparrow\downarrow$          | $\uparrow\downarrow$ | $\uparrow$           | $\uparrow$           |                      |            | $1s^2 2s^2 2p^2$          |
| N       | 7                        | $\uparrow\downarrow$          | $\uparrow\downarrow$ | $\uparrow$           | $\uparrow$           | $\uparrow$           |            | $1s^2 2s^2 2p^3$          |
| Ne      | 10                       | $\uparrow\downarrow$          | $\uparrow\downarrow$ | $\uparrow\downarrow$ | $\uparrow\downarrow$ | $\uparrow\downarrow$ |            | $1s^2 2s^2 2p^6$          |
| Na      | 11                       | $\uparrow\downarrow$          | $\uparrow\downarrow$ | $\uparrow\downarrow$ | $\uparrow\downarrow$ | $\uparrow\downarrow$ | $\uparrow$ | $1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$     |

Кај јаглеродот двата електрони од последниот слој се сместени во две различни *p* орбитали. Двата електрони имаат идентични (паралелни) спинови. Со таква конфигурација, одбивањето помеѓу електроните е најмало, а енергијата на атомот е најниска (најстабилна состојба).

*Хундово правило: Електроните најпрво ги пополнуваат орбиталите со најниска енергија. Доколку постои можност, секој електрон ќе биде распределен во посебна орбитала, за да се намалат електрон-електрон одбивните интеракции. При тоа електроните ќе заземат паралелен спин помеѓу себе, што доведува до стабилизирање на вкупната енергетска состојба.*

Електронските конфигурации можат да се запишат и во скратен облик: **Na: [Ne]3s<sup>1</sup>** наместо

**Na: 1s<sup>2</sup>2s<sup>2</sup>2p<sup>6</sup>3s<sup>1</sup>.**

Нешто чудно!



Дали наредниот елемент со вкупно 19 електрони, (калиум К) ќе го смести последниот електрон во **3d** орбиталата на третиот слој? Одговорот е **НЕ!** К има слични својства со Li и Na, што значи дека неговиот последен електрон е во **4s** орбиталата. **Заклучок: 4s има пониска енергија од 3d!**



*Пример:* Која од следниве орбитали има пониска енергија: **4d** или **6s**? За **4d** важи следново:  $n = 4, l = 2, 4 + 2 = 6$ . За **6s** важи:  $n = 6, l = 0, 6 + 0 = 6$ . Збирот на  $n$  и  $l$  е еднаков за двете орбитали. Според тоа, пониска енергија има онаа чиј главен квантен број е помал. Тоа е **4d** орбиталата.

Редослед на пополнување на атомските орбитали според растењето на енергијата:

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

*Критериум за подредување на енергетските нивоа:*

1. Енергијата на електронската орбитала е определена од збирот на главниот и орбиталниот квантен број. Колку е збирот поголем, толку е и енергијата на орбиталата поголема.
2. Доколку постојат две орбитали со ист збир на главниот и орбиталниот квантен број, тогаш пониска енергија има онаа орбитала која има понизок главен квантен број.