

Задача 1. Изразете електронните конфигурации и определете броя и типа на единичните електрони в основно състояние на атомите на следните елементи: P, Ca, Cu, W. За фосфора изразете електронната конфигурация и на възбуденото състояние.

Решение:

Атомите на химичните елементи са изградени от ядро и електронна обвивка. Атомите са електронеутрални частици - броят на протоните p^+ в ядрото е равен на броя на електроните e^- в електронната обвивка.

Всеки електрон има определено количество енергия, която се квантува, т.е. може да заема само определени стойности. На всяка от тези стойности отговаря част от пространството около ядрото, където вероятността да се намери електронът е 90%. Математичната функция, чийто квадрат описва вероятността за намиране на електрона в пространството около ядрото се нарича атомна орбитала (АО). Всяка АО (s, p, d, f и т.н.) се характеризира с енергия, размер, форма, и насоченост в пространството (с изключение на s АО) и се описва еднозначно с три квантови числа:

- Главно квантово число ($n = 1, 2, 3, \dots, \infty$). То е свързано с енергията на електрона и средното му разстояние от ядрото.
- Орбитално квантово число ($l = 0, 1, 2, \dots, n-1$). То характеризира формата и енергията на АО.
- Магнитно квантово число ($m = -l, -l+1, \dots, 0, \dots, l-1, l$). То характеризира пространствената насоченост на АО.

За цялостно дефиниране състоянието на електрона в електронната обвивка, освен тези квантови числа, се въвежда и:

- Спиново квантово число (s), което заема само стойностите $+1/2$ и $-1/2$. То характеризира спина на електрона.

Разпределението на електроните в електронната обвивка въз основа на тяхната енергия се нарича електронна конфигурация. Тя се изразява с електронна формула или енергетична диаграма (квантови клетки). При електронната формула първо се изписва с цифра електронният слой, после с буква електронният подслой и с горен индекс – броят на електроните в съответния подслой. В енергетичните диаграми електроните се изразяват със стрелки, чиято посока различава стойностите на спиновото квантово число. С енергетичните диаграми се показва разпределението на електроните не само по слоеве и подслоеви, но и по АО.

Електронната конфигурация се изгражда като се спазва принципът за минимална енергия на атома, съгласно следните правила:

1. АО се запълват постепенно по възходящ ред на тяхната енергия. Енергията на разрешените състояния в атома нараства в реда, в който нараства сумата от

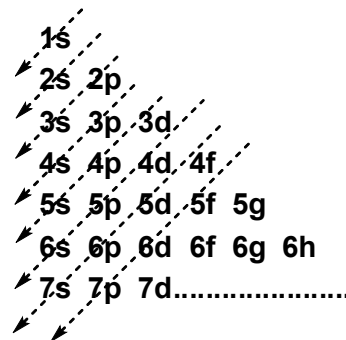
главното и орбитално квантови числа (n+l). При равни суми, по-ниска енергия има състоянието с по-малко главно квантово число (правило на Клечковски).

Така се създава ред на разрешените състояния по нарастване на енергията им:

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

2. Принцип на Паули – в един атом не може да има две състояния с четири еднакви квантови числа. Следствие от този принцип е, че на една атомна орбитала не може да има повече от два електрона и то с противоположни спинове.
3. Правило на Хунд – изродените (еквиваленти) АО първо се запълват с единични електрони с паралелни спинове, след което електроните се сдвояват.

Графиката представя реда, по който се подреждат атомните орбитали съгласно принципа за минимална енергия.

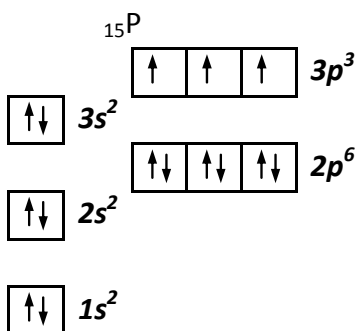


При изграждане на електронните конфигурации с особена стабилност се отличават състоянията, при които всички орбитали на даден подслой са заети с единични електрони или с електронни двойки. Такива са например конфигурациите p^3 , p^6 , d^5 , d^{10} , f^7 и f^{14} . Те се наричат още предпочетени електронни конфигурации.

Основно състояние на атома е онова, в което той има минимална енергия.

Химичният елемент ${}_{15}\text{P}$ има електронна формула $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^3$ в основно състояние. Той е p-елемент, защото последният електрон, изграждащ електронната обвивка заема p АО.

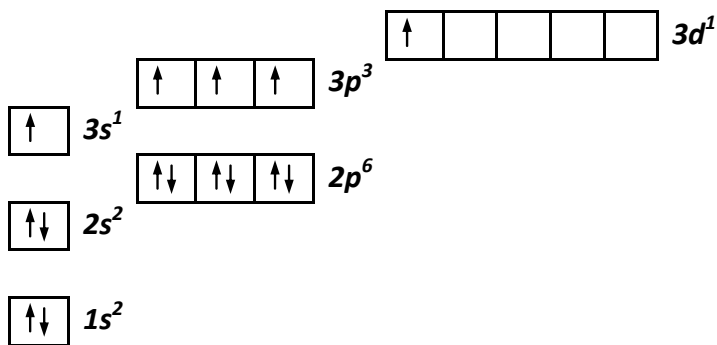
Енергетичната диаграма (квантови клетки) за основно състояние на фосфора е:



Поради поглъщане на енергия, в условията на външни въздействия, електрони на атома могат да заемат АО с по-висока енергия от основното състояние. По-високото енергетичното състояние на атома се нарича възбудено състояние.

При фосфора е възможно възбудено състояние, тъй като валентните орбитали от 3d подслоя са свободни и електрон от 3s АО може да премине в 3d АО.

Електронната формула на фосфора във възбудено състояние е $1s^2 2s^2 2p^6 3s^1 3p^3 3d^1$. Енергетичната диаграма на възбуденото състояние на фосфора е следната:

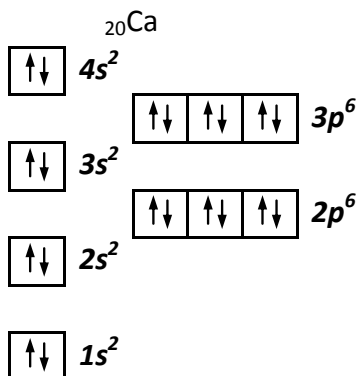


В основно състояние Р има три единични р-електрона, а във възбудено – пет несдвоени: един s, три p и един d електрон.

В основно състояние фосфорът проявява трета валентност, а във възбудено – пета. Валентност наричаме свойството на атомите на химичните елементи да влизат в образуването на точно определен брой химични връзки с атоми на други елементи. Числено валентността е равна на броя на единичните електрони във валентния електронен слой на атома.

Електронната формула на ${}_{20}\text{Ca}$ в основно състояние е $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2$. Той е s-елемент, защото последният електрон, изграждащ електронната обвивка заема s АО.

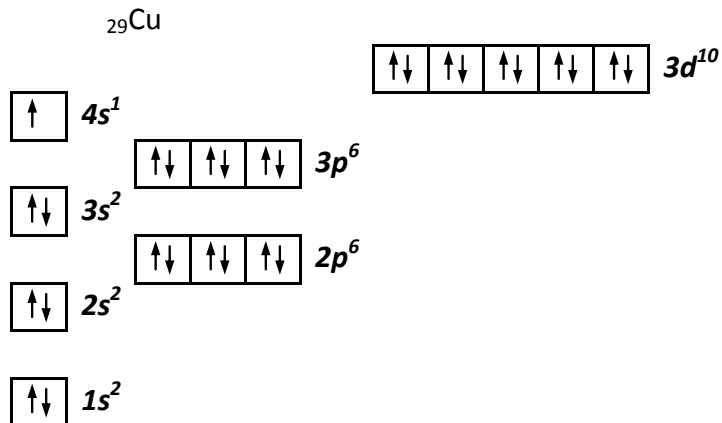
Енергетичната диаграма съответно е:



Калцият в основно състояние няма единични електрони. Проявява 0 валентност.

Електронната формула на ${}_{29}\text{Cu}$ в основно състояние е $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^1 3d^{10}$. Медта е d-елемент, защото последният електрон, изграждащ електронната обвивка се намира на d АО.

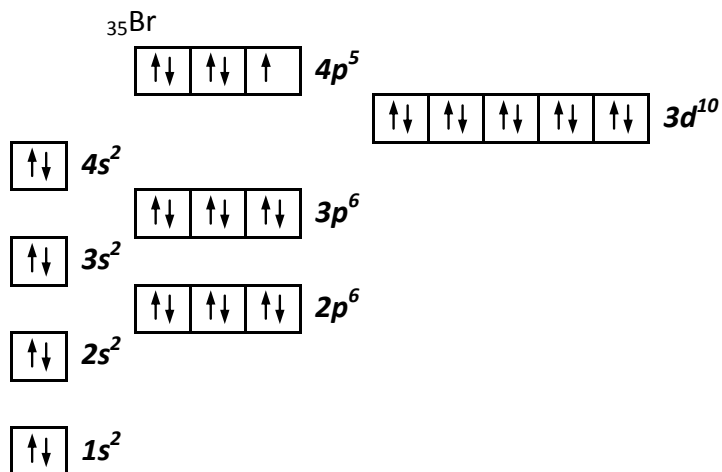
Енергетичната диаграма на медта е:



Медта има един единичен s електрон в основно състояние.

Конфигурацията на медта е пример за стабилна (предпочетена) електронна конфигурация d^{10} , която се осъществява чрез „прескачане“ на един електрон от 4s нивото на 3d, за да може последното да се изгради до d^{10} .

Електронната формула на ${}_{35}\text{Br}$ в основно състояние е $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^5$. Той е p-елемент – последният електрон, изграждащ електронната обвивка, заема p АО. Енергетичната диаграма съответно е :



Бромът в основно състояние има един единичен p-електрон и проявява първа валентност.