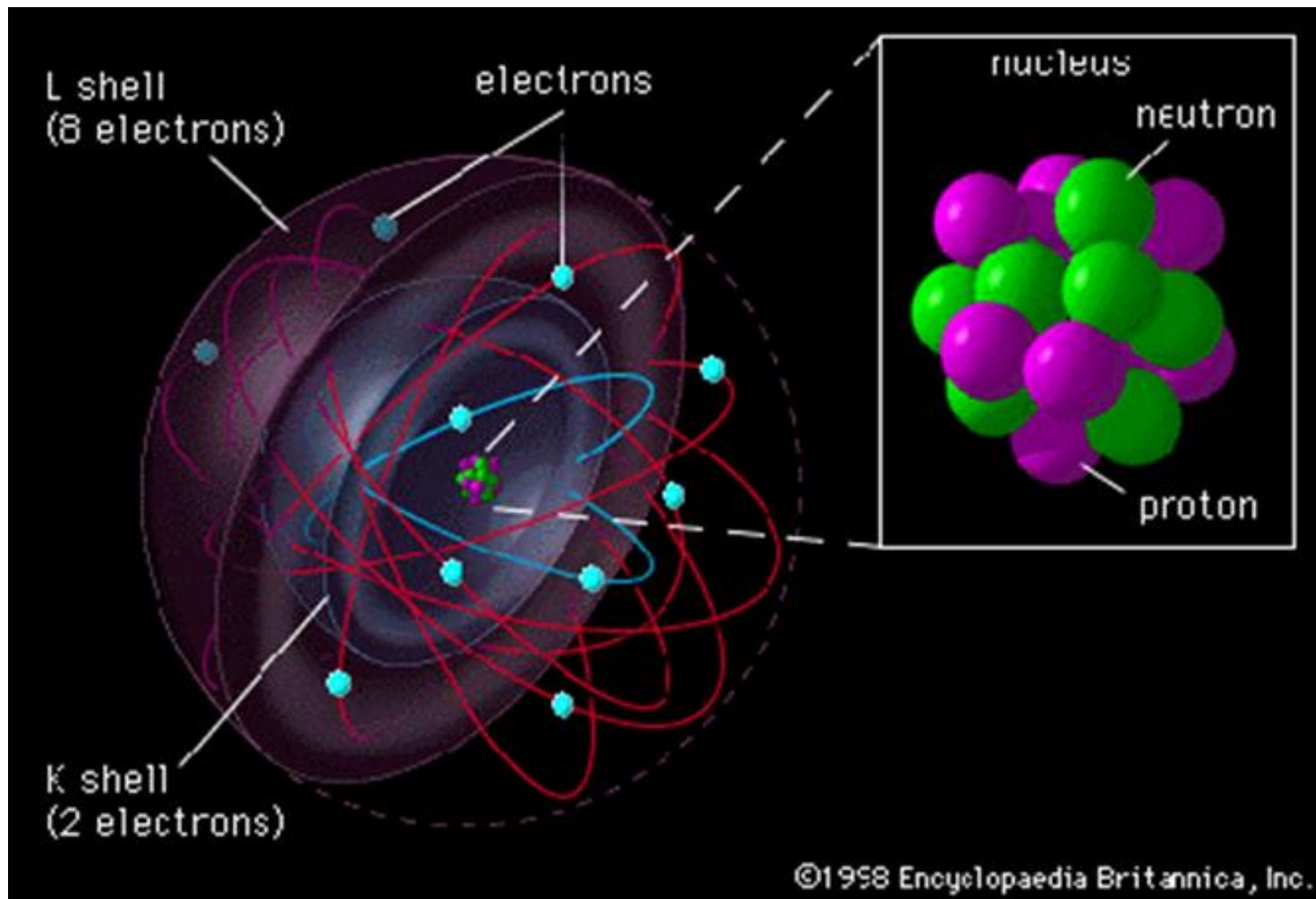




Многоэлектронные атомы



Вопросы

- 1. Квантовомеханическое описание состояний электронов в многоэлектронных атомах.**
- 2. Принцип запрета Паули.**
- 3. Электронные состояния в многоэлектронных атомах и их заполнение.**
- 4. Энергетические состояния и спектральные переходы в многоэлектронных атомах.**

1. Квантовомеханическое описание состояний электронов в многоэлектронных атомах



ПЕРИОДИЧЕСКАЯ СИСТЕМА ХИМИЧЕСКИХ ЭЛЕМЕНТОВ Д.И. МЕНДЕЛЕЕВА

Периоды	Ряды	Г Р У П П Ы Э Л Е М Е Н Т О В																Энергетические уровни				
		I		II		III		IV		V		VI		VII		VIII						
		а	б	а	б	а	б	а	б	а	б	а	б	а	б	б			а			
1	1	1 Н ВОДОРОД 1,008																2 He ГЕЛИЙ 4,003		1		
2	2	3 Li ЛИТИЙ 6,941		4 Be БЕРИЛЛИЙ 9,0122		5 B БОР 10,811		6 C УГЛЕРОД 12,011		7 N АЗОТ 14,007		8 O КИСЛОРОД 15,999		9 F ФТОР 18,998				10 Ne НЕОН 20,179		2		
3	3	11 Na НАТРИЙ 22,99		12 Mg МАГНИЙ 24,312		13 Al АЛЮМИНИЙ 26,982		14 Si КРЕМНИЙ 28,086		15 P ФОСФОР 30,974		16 S СЕРА 32,064		17 Cl ХЛОР 35,453				18 Ar АРГОН 39,948		3		
4	4	19 K КАЛИЙ 39,102		20 Ca КАЛЬЦИЙ 40,08		21 Sc СКАНДИЙ 44,956		22 Ti ТИТАН 47,88		23 V ВАНАДИЙ 50,941		24 Cr ХРОМ 51,996		25 Mn МАРГАНЕЦ 54,938		26 Fe ЖЕЛЕЗО 55,845		27 Co КОБАЛЬТ 58,933		28 Ni НИКЕЛЬ 58,7		4
	5	29 Cu МЕДЬ 63,546		30 Zn ЦИНК 65,37		31 Ga ГАЛЛИЙ 69,72		32 Ge ГЕРМАНИЙ 72,59		33 As МЫШЬЯК 74,922		34 Se СЕЛЕН 78,96		35 Br БРОМ 79,904						36 Kr КРИПТОН 83,8		
5	6	37 Rb РУБИДИЙ 85,468		38 Sr СТРОНЦИЙ 87,62		39 Y ИТТРИЙ 88,906		40 Zr ЦИРКОНИЙ 91,22		41 Nb НИОБИЙ 92,906		42 Mo МОЛИБДЕН 95,94		43 Tc ТЕХНЕЦИЙ [99]		44 Ru РУТЕНИЙ 101,07		45 Rh РОДИЙ 102,906		46 Pd ПАЛЛАДИЙ 106,4		5
	7	47 Ag СЕРЕБРО 107,865		48 Cd КАДМИЙ 112,41		49 In ИНДИЙ 114,82		50 Sn ОЛОВО 118,69		51 Sb СУРЬМА 121,75		52 Te ТЕЛЛУР 127,6		53 I ИОД 126,905						54 Xe КСЕНОН 131,3		
6	8	55 Cs ЦЕЗИЙ 132,905		56 Ba БАРИЙ 137,34		57 – 71 ЛАНТАНОИДЫ		72 Hf ГАФИЙ 178,49		73 Ta ТАНТАЛ 180,948		74 W ВОЛЬФРАМ 183,85		75 Re РЕНИЙ 186,207		76 Os ОСМИЙ 190,2		77 Ir ИРИДИЙ 192,22		78 Pt ПЛАТИНА 195,09		6
	9	79 Au ЗОЛОТО 196,967		80 Hg РУТУТЬ 200,59		81 Tl ТАЛЛИЙ 204,37		82 Pb СВИНЕЦ 207,19		83 Bi ВИСМУТ 208,98		84 Po ПОЛОНИЙ [210]		85 At АСТАТ [210]						86 Rn РАДОН [222]		
7	10	87 Fr ФРАНЦИЙ [223]		88 Ra РАДИЙ [226]		89 – 103 АКТИНОИДЫ		104 Rf РЕЗЕРФОРДИЙ [261]		105 Db ДУБИНИЙ [262]		106 Sg СИБОРГИЙ [263]		107 Bh БОРИЙ [262]		108 Hn ХАНИЙ [265]		109 Mt МЕЙТТЕРИЙ [265]		110		7
ВЫСШИЕ ОКСИДЫ		R ₂ O		RO		R ₂ O ₃		RO ₂		R ₂ O ₅		RO ₃		R ₂ O ₇		RO ₄						
ЛЕТУЧИЕ ВОДОРОДНЫЕ СОЕДИНЕНИЯ								RH ₄		R H ₃		H ₂ R		HR								



Д.И. Менделеев
1834 – 1907

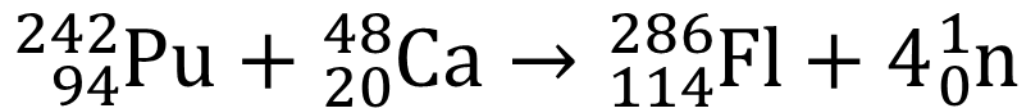


- s-элементы
- p-элементы
- d-элементы
- f-элементы

57 La ЛАНТАН 138,905	58 Ce ЦЕРИЙ 140,12	59 Pr ПРАЗЕДИЙ 140,908	60 Nd НЕОДИМ 144,24	61 Pm ПРОМЕТИЙ [145]	62 Sm САМАРИЙ 150,36	63 Eu ЕВРОПИЙ 151,96	64 Gd ГАДОЛИНИЙ 157,25	65 Tb ТЕРБИЙ 158,92	66 Dy ДИСПРОЗИЙ 162,5	67 Ho ГОЛЬМИЙ 164,93	68 Er ЭРБИЙ 167,26	69 Tm ТУЛИЙ 168,934	70 Yb ИТТЕРБИЙ 173,04	71 Lu ЛЮТЕЦИЙ 174,97
89 Ac АКТИНИЙ [227]	90 Th ТОРИЙ 232,038	91 Pa ПРОТАКТИНИЙ [231]	92 U УРАН 238,029	93 Np НЕПУТНИЙ [237]	94 Pu ПЛУТОНИЙ [244]	95 Am АМЕРИЦИЙ [243]	96 Cm КУРИЙ [247]	97 Bk БЕРКЛИЙ [247]	98 Cf КАЛИФОРНИЙ [251]	99 Es ЭЙНШТЕЙНИЙ [254]	100 Fm ФЕРМИЙ [257]	101 Md МЕНДЕЛЕВИЙ [258]	102 No НОБЕЛИЙ [259]	103 Lr ЛОУРЕНСИЙ [260]

1. Квантовомеханическое описание состояний электронов в многоэлектронных атомах

Впервые 114-й элемент ${}_{114}^{286}\text{Fl}$ периодической таблицы Менделеева был синтезирован в 1998 году в Объединенном институте ядерных исследований (коллаборация Дубна-Ливермор).



В ядре атома флеровия **114 протонов** и **172 нейтрона**.

Электронная подсистема атома включает **114 электронов**.

Официальное название **флерóвий (flerovium)** дано в честь *Лаборатории ядерных реакций им. Г. Н. Флёрва Объединённого института ядерных исследований*, где был синтезирован элемент.

1. Квантовомеханическое описание состояний электронов в многоэлектронных атомах

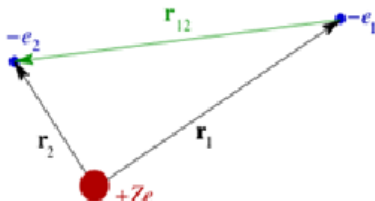
Многоэлектронный атом — это система, состоящая из трех подсистем тождественных частиц (протоны, нейтроны и электроны).

Тождественные частицы принципиально неразличимы!

В квантовой механике состояния систем тождественных частиц описываются **многочастичными волновыми функциями**.

Нас интересует описание **электронной подсистемы**.

Пример уравнения Шрёдингера для двухэлектронной волновой функции атома гелия:



$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_{r_1}^2 - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r_1} - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_{r_2}^2 - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r_2} + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{|r_1 - r_2|} \right] \psi(r_1, r_2) = E \psi(r_1, r_2)$$

1. Квантовомеханическое описание состояний электронов в многоэлектронных атомах

Для анализа многоэлектронных атомов используется одноэлектронное приближение.

$$\psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n) = \psi(\mathbf{r}_1) \dots \psi(\mathbf{r}_n)$$

После того как **одночастичные волновые функции** в первом приближении найдены (**взаимодействием электронов пренебрегаем**) находим электрическое поле, которое электроны создают. Потенциал этого поля суммируется с потенциалом поля ядра и подставляется в уравнение Шредингера. Решение последнего позволяет найти **одночастичные функции в новом приближении**. Процедура многократно повторяется до тех пор, пока вид волновых функций перестанет меняться. В результате определено эффективное электрическое поле, в котором движутся электроны, и найдены волновые функции, соответствующие этому полю.

1. Квантовомеханическое описание состояний электронов в многоэлектронных атомах

Проблема!

Уравнение Шредингера имеет множество возможных решений. Необходимо знать, в каких из разрешенных собственных состояний находятся электроны в атоме, и для определения эффективного поля использовать волновые функции именно этих состояний.

2. Принцип запрета Паули

Пусть в системе две **тождественные частицы** (например два электрона в атоме) могут занимать некоторые квантовые состояния “a” и “b”.

Рассмотрим две возможные ситуации, связанные с перестановкой двух тождественных частиц:

$$\begin{aligned}\psi(1,2) &= \psi_a(1)\psi_b(2), \\ \psi(2,1) &= \psi_a(2)\psi_b(1)\end{aligned}$$

Т.к. частица неразличимы, то:

$$\psi^2(1,2) = \psi^2(2,1).$$

Симметричная волновая функция

$$\psi(1,2) = +\psi(2,1) .$$

Антисимметричная волновая функция

$$\psi(1,2) = -\psi(2,1) .$$

2. Принцип запрета Паули

Можно составить две линейные комбинации функций, которые будут удовлетворять необходимым требованиям:

$$\psi_+ = \psi_a(1)\psi_b(2) + \psi_a(2)\psi_b(1).$$

Первая функция **симметрична по отношению к перестановке частиц.**

$$\psi_- = \psi_a(1)\psi_b(2) - \psi_a(2)\psi_b(1).$$

Вторая функция **антисимметрична по отношению к перестановке частиц.**

Закономерен вопрос!

Какие волновые функции (симметричные или антисимметричные) характерны для систем реальных частиц? Какой из двух возможных вариантов реализует Природа?

2. Принцип запрета Паули

- Для частиц с полуцелым спином (фермионов) характерны только **антисимметричные многочастичные волновые функции**.
- Для частиц с целым спином (бозонов) характерны только **симметричные многочастичные волновые функции**.

Для двух фермионов в системе, если $a=b$ (одно состояние), то получаем:

$$\psi_- = \psi_a(1)\psi_a(2) - \psi_a(2)\psi_a(1) = 0.$$

Два и более одинаковых фермионов в системе не могут находиться в одном и том же квантовом состоянии!

2. Принцип запрета Паули

Принцип был сформулирован для электронов **Вольфгангом Паули** в 1925 г. В дальнейшем распространён на все частицы с полуцелым спином.

Если состояние электрона в системе определяется четверкой квантовых чисел, то из принципа Паули следует, что **в системе не может быть двух электронов с одной и той же четверкой квантовых чисел**.

В соответствии с принципом запрета происходит заполнение разрешенных состояний электронами в многоэлектронных системах.

На одной орбитали $\psi_{n,l,m}$ может находиться или один электрон, или два электрона, но с противоположно направленными спинами.



Вольфганг Паули
(1900-1958 г)

Нобелевская премия 1945 г

3. Электронные состояния в многоэлектронных атомах и их заполнение

В одноэлектронном приближении стационарные электронные состояния в многоэлектронных атомах определяются четверкой квантовых чисел - n, l, m_l, m_s .

У невозбужденных атомов заполнение состояний электронами подчиняется **двум основным принципам** — **принципу Паули и принципу минимума энергии системы**.

Последнее означает, что с увеличением количества электронов у атомов (по мере увеличения их атомного номера), **каждый «новый» электрон должен занимать разрешенное состояние с наименьшей энергией**.

3. Электронные состояния в многоэлектронных атомах и их заполнение

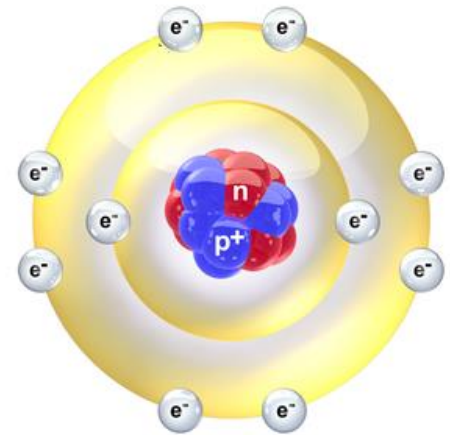
В многоэлектронных атомах энергия стационарных состояний электронов зависит не только от главного квантового числа n , но и от орбитального квантового числа l .

При фиксированном значении n энергия растет с увеличением l .

Зависимость энергии от l связана с эффектом **частичного экранирования электрического поля ядра полем электронов**.

Чем ближе электрон находится к ядру, тем меньше на него действуют другие электроны и тем больше действует ядро.

Чем дальше электрон от ядра, тем сильнее поле ядра экранируется для него полем остальных электронов. Это приводит к тому, что электроны, движущиеся ближе к ядру, находятся в более **«глубокой» потенциальной яме**, чем удаленные от него.



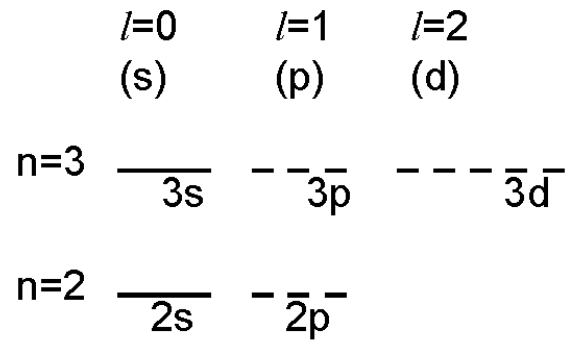
3. Электронные состояния в многоэлектронных атомах и их заполнение

Значения энергий стационарных состояний у «**близких**» **электронов** оказываются лежащими ниже, чем у «**далеких**» при одних и тех же значениях главного квантового числа **n** .

Степень удаленности электрона от ядра связана непосредственно с величиной орбитального квантового числа **l** . С ростом **l** (при фиксированном значении **n**) происходит изменение волновой функции электрона так, что положение ее максимума все больше удаляется от ядра. Это и означает большее удаление электрона и, как следствие, увеличение энергии его состояний с ростом **l** .

3. Электронные состояния в многоэлектронных атомах и их заполнение

Energy Diagram for Hydrogen



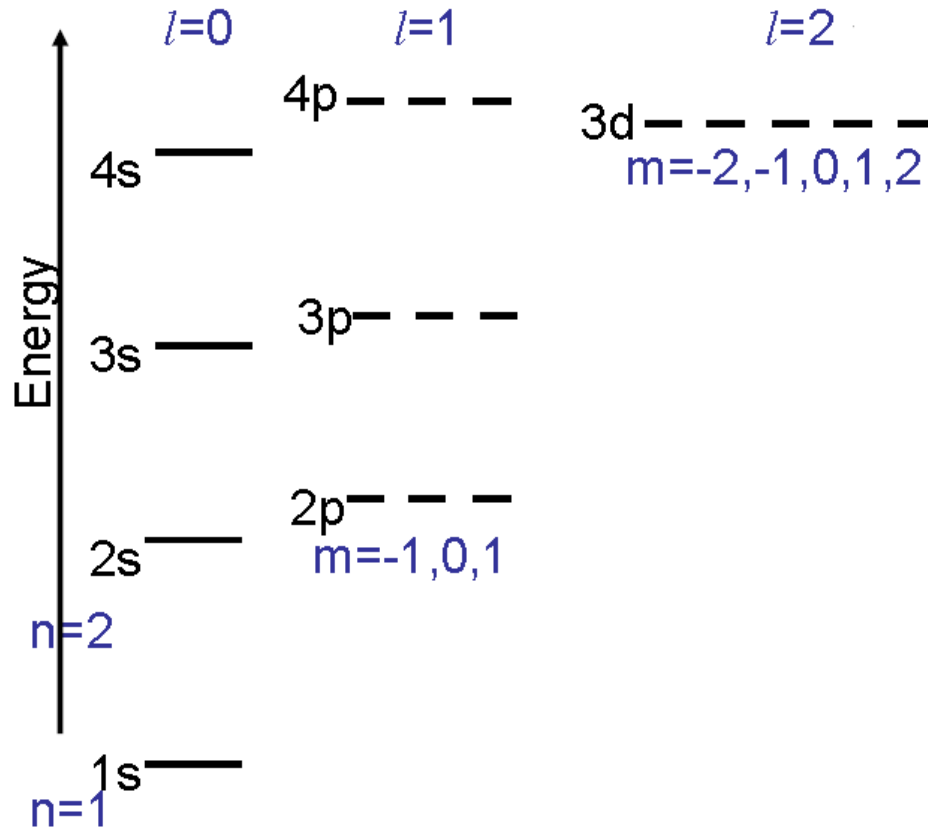
In HYDROGEN, energy only depends on n , not l and m .

(NOT true for multi-electron atoms!)

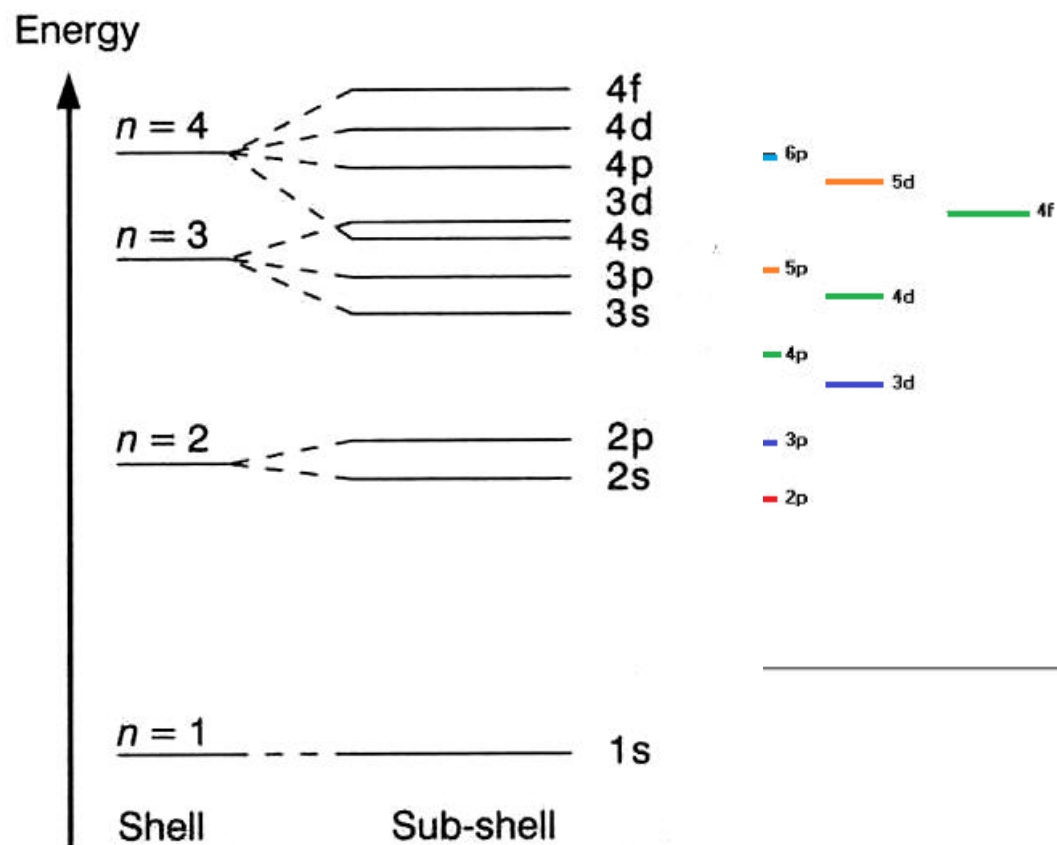
$n=1$ $\text{---} \underline{1s}$ $l=0, m=0$

3. Электронные состояния в многоэлектронных атомах и их заполнение

Энергетические уровни многоэлектронных атомов



3. Электронные состояния в многоэлектронных атомах и их заполнение



3. Электронные состояния в многоэлектронных атомах и их заполнение

За счет зависимости энергии от орбитального квантового числа некоторые уровни с большим значением n , но с меньшим значением l оказываются лежащими ниже, чем уровни с меньшим значением, n , но с большим l . Например, уровень $4s$ ($n=4, l=0$) лежит ниже уровня $3d$ ($n=3, l=2$), уровень $5s$ ($n=5, l=0$) — ниже уровня $4f$ ($n=4, l=3$), а уровень $6s$ ($n=6, l=0$) — ниже уровней $4f$ ($n=4, l=3$) и $5d$ ($n=5, l=2$).

3. Электронные состояния в многоэлектронных атомах и их заполнение

Зная закономерности расположения энергетических уровней и принципы заполнения состояний электронами, можно определить **электронную конфигурацию** для атома любого химического элемента таблицы Менделеева.

Причиной периодичности свойств химических элементов является повторяемость заполнения электронами близко расположенных групп энергетических состояний, получивших название **оболочек**. Сходные свойства химических элементов, стоящих в одном вертикальном ряду (группе) таблицы, связываются с **одинаковым заполнением верхних энергетических оболочек** различных атомов, принадлежащих одной и той же группе.



ПЕРИОДИЧЕСКАЯ СИСТЕМА ХИМИЧЕСКИХ ЭЛЕМЕНТОВ Д.И. МЕНДЕЛЕЕВА

Периоды	Ряды	Г Р У П П Ы Э Л Е М Е Н Т О В																Энергетическое состояние			
		I		II		III		IV		V		VI		VII		VIII					
		а	б	а	б	а	б	а	б	а	б	а	б	а	б	б	а				
1	1	H ВОДОРОД 1,008	1															He ГЕЛИЙ 4,003	2		
2	2	Li ЛИТИЙ 6,941	3	Be БЕРИЛЛИЙ 9,0122	4	B БОР 10,811	5	C УГЛЕРОД 12,011	6	N АЗОТ 14,007	7	O КИСЛОРОД 15,999	8	F ФТОР 18,998	9			Ne НЕОН 20,179	10		
3	3	Na НАТРИЙ 22,99	11	Mg МАГНИЙ 24,312	12	Al АЛЮМИНИЙ 26,092	13	Si КРЕМНИЙ 28,086	14	P ФОСФОР 30,974	15	S СЕРА 32,064	16	Cl ХЛОР 35,453	17			Ar АРГОН 39,948	18		
4	4	K КАЛИЙ 39,102	19	Ca КАЛЬЦИЙ 40,08	20	Sc СКАНДИЙ 44,956	21	Ti ТИТАН 47,956	22	V ВАНАДИЙ 50,941	23	Cr ХРОМ 51,996	24	Mn МАРГАНЕЦ 54,938	25	Fe ЖЕЛЕЗО 55,849	26	Co КОБАЛЬТ 58,933	27	Ni НИКЕЛЬ 58,7	28
	5	Cu МЕДЬ 63,546	29	Zn ЦИНК 65,37	30	Ga ГАЛЛИЙ 69,72	31	Ge ГЕРМАНИЙ 72,59	32	As МЫШЬЯК 74,922	33	Se СЕЛЕН 78,96	34	Br БРОМ 79,904	35			Kr КРИПТОН 83,8	36		
5	6	Rb РУБИДИЙ 85,468	37	Sr СТРОНЦИЙ 87,62	38	Y ИТТРИЙ 88,906	39	Zr ЦИРКОНИЙ 91,22	40	Nb НИОБИЙ 92,906	41	Mo МОЛИБДЕН 95,94	42	Tc ТЕХНЕЦИЙ [99]	43	Ru РУТЕНИЙ 101,07	44	Rh РОДИЙ 102,906	45	Pd ПАЛЛАДИЙ 106,4	46
	7	Ag СЕРЕБРО 107,868	47	Cd КАДМИЙ 112,41	48	In ИНДИЙ 114,82	49	Sn ОЛОВО 118,69	50	Sb СУРЬМА 121,75	51	Te ТЕЛЛУР 127,6	52	I ЙОД 126,905	53			Xe КСЕНОН 131,3	54		
6	8	Cs ЦЕЗИЙ 132,905	55	Ba БАРИЙ 137,34	56	57 – 71 ЛАНТАНОИДЫ	72	Hf ГАФИЙ 178,49	73	Ta ТАНТАЛ 180,948	74	W ВОЛЬФРАМ 183,85	75	Re РЕНИЙ 186,207	76	Os ОСМИЙ 190,2	77	Ir ИРИДИЙ 192,22	78	Pt ПЛАТИНА 195,09	79
	9	Au ЗОЛОТО 196,967	79	Hg РУТУТЬ 200,59	80	Tl ТАЛЛИЙ 204,37	81	Pb СВИНЕЦ 207,19	82	Bi ВИСМУТ 208,98	83	Po ПОЛОНИЙ [210]	84	At АСТАТ [210]	85			Rn РАДОН [222]	86		
7	10	Fr ФРАНЦИЙ [223]	87	Ra РАДИЙ [226]	88	89 – 103 АКТИНОИДЫ	104	Rf РЕЗЕРФОРДИЙ [261]	105	Db ДУБИЙ [262]	106	Sg СИБОРГИЙ [263]	107	Bh БОРИЙ [262]	108	Hn ХАНИЙ [265]	109	Mt МЕЙТНЕРИЙ [268]	110		
ВЫСШИЕ ОКСИДЫ		R₂O		RO		R₂O₃		RO₂		R₂O₅		RO₃		R₂O₇		RO₄					
ЛЕТУЧИЕ ВОДОРОДНЫЕ СОЕДИНЕНИЯ						RH₄		R H₃		H₂R		HR									



Д.И. Менделеев
1834 – 1907

СИМВОЛ
ЭЛЕМЕНТА

ПОРЯДКОВЫЙ
НОМЕР

Rb 37
РУБИДИЙ
85,468

НАЗВАНИЕ
ЭЛЕМЕНТА

ОТНОСИТЕЛЬНАЯ
АТОМНАЯ МАССА

РАСПРЕДЕЛЕНИЕ
ЭЛЕКТРОНОВ
ПО СЛОЯМ

s-элементы

p-элементы

d-элементы

f-элементы

ЛАНТАНОИДЫ

57 La ЛАНТАН 138,906	58 Ce ЦЕРИЙ 140,12	59 Pr ПРАЗЕОДИЙ 140,908	60 Nd НЕОДИМ 144,24	61 Pm ПРОМЕТИЙ [145]	62 Sm САМАРИЙ 150,4	63 Eu ЕВРОПИЙ 151,96	64 Gd ГАДОЛИНИЙ 157,25	65 Tb ТЕРБИЙ 158,925	66 Dy ДИСПРОЗИЙ 162,5	67 Ho ГОЛЬМИЙ 164,93	68 Er ЭРБИЙ 167,26	69 Tm ТУЛИЙ 168,934	70 Yb ИТТЕРБИЙ 173,04	71 Lu ЛЮТЕЦИЙ 174,97
----------------------------	--------------------------	-------------------------------	---------------------------	----------------------------	---------------------------	----------------------------	------------------------------	----------------------------	-----------------------------	----------------------------	--------------------------	---------------------------	-----------------------------	----------------------------

АКТИНОИДЫ

89 Ac АКТИНИЙ [227]	90 Th ТОРИЙ 232,038	91 Pa ПРОТАКТИНИЙ [231]	92 U УРАН 238,29	93 Np НЕПТУНИЙ [237]	94 Pu ПЛУТОНИЙ [244]	95 Am АМЕРИЦИЙ [243]	96 Cm КУРИЙ [247]	97 Bk БЕРКЛИЙ [247]	98 Cf КАЛИФОРНИЙ [251]	99 Es ЭЙНШТЕЙНИЙ [254]	100 Fm ФЕРМИЙ [257]	101 Md МЕНДЕЛЕВИЙ [258]	102 No НОБЕЛИЙ [259]	103 Lr ЛОУРЕНСИЙ [260]
---------------------------	---------------------------	-------------------------------	------------------------	----------------------------	----------------------------	----------------------------	-------------------------	---------------------------	------------------------------	------------------------------	---------------------------	-------------------------------	----------------------------	------------------------------

3. Электронные состояния в многоэлектронных атомах и их заполнение

Первый период таблицы Менделеева

Водород Н. ($Z=1$) Электронная конфигурация $1s^1$. Энергия ионизации атома водорода составляет 13.6 эВ.

Гелий Не. ($Z = 2$). Электронная конфигурация $1s^2$. Самая нижняя энергетическая оболочка полностью заполнена. Энергия однократной ионизации около 24,6 эВ. Она является самой большой среди значений энергии однократной ионизации всех атомов.

Высокая энергия ионизации и наличие полностью заполненной оболочки определяют исключительную химическую инертность гелия.

3. Электронные состояния в многоэлектронных атомах и их заполнение

Второй период таблицы Менделеева

Литий Li ($Z = 3$). Электронная конфигурация $1s^2 2s^1$. Электроны первой заполненной оболочки сильно экранируют поле ядра для третьего электрона. Поэтому энергетический уровень $2s$ -состояния оказывается довольно высоко. Соответственно энергия однократной ионизации лития не очень велика и составляет около 5.4 эВ.

Бериллий Be ($Z = 4$). Электронная конфигурация бериллия $1s^2 2s^2$.

Бор B ($Z = 5$). Электронная конфигурация бора $1s^2 2s^2 2p^1$.

После бора заполняют второй период таблицы: **углерод** ($Z = 6$), **азот** ($Z = 7$), **кислород** ($Z = 8$), **фтор** ($Z = 9$) и **неон** ($Z = 10$). При этом укомплектовывается электронами p - подоболочка.

3. Электронные состояния в многоэлектронных атомах и их заполнение

Третий период таблицы Менделеева

В третьем периоде таблицы Менделеева, так же как и во втором находится **восемь элементов**. Начиная с **натрия** ($Z=11$) и кончая **аргоном** ($Z=18$), происходит последовательное заполнение электронами состояний с $n=3$. Сначала заполняются $3s$ - состояния ($l=0$). На них размещается 2 электрона. После этого заполняются $3p$ - состояния ($l=1$), на которых разместится 6 электронов. Таким образом, имеет место **точно такая же картина заполнения состояния, как и в предыдущем периоде таблицы**. Поэтому многие свойства элементов третьего периода очень схожи со свойствами элементов второго периода, стоящих в тех же самых группах.

3. Электронные состояния в многоэлектронных атомах и их заполнение

Четвертый период таблицы Менделеева

Начиная с **калия** ($Z = 19$), сказывается факт, что некоторые состояния с большим n , но меньшим l , лежат ниже состояний с меньшим n , но большим l . Так как $4s$ - состояние энергетически ниже, чем $3d$ - состояние, то последний электрон у **калия** размещается в состоянии $4s$. Поскольку уже у **кальция** ($Z = 20$) оба $4s$ - состояния оказываются занятыми, то, начиная со **скандия** ($Z = 21$), заполняются $3d$ - состояния которые энергетически лежат между $4s$ - и $4p$ - состояниями. У **цинка** ($Z = 30$) $3d$ - состояния полностью заполняются. Начиная с **галлия** ($Z = 31$), происходит заполнение $4p$ - состояний. Процесс завершается на **криптоне** ($Z = 36$) - инертном газе, замыкающем четвертый период таблицы Менделеева. Таким образом, четвертый период содержит всего 18 элементов.

4. Энергетические состояния и спектральные переходы в многоэлектронных атомах

Анализ спектров многоэлектронных атомов в общем случае представляет достаточно **сложную задачу**, что определяется несколькими обстоятельствами.

Во-первых, энергия состояний в многоэлектронном атоме **зависит** от двух квантовых чисел **n** и **l** .

Во-вторых, переход электронов в возбужденное состояние приводит **к изменению** результирующего поля, а значит, волновых функций и энергий состояний.

В-третьих, в многоэлектронных атомах вероятными являются одновременные переходы нескольких электронов в возбужденные состояния.

4. Энергетические состояния и спектральные переходы в многоэлектронных атомах

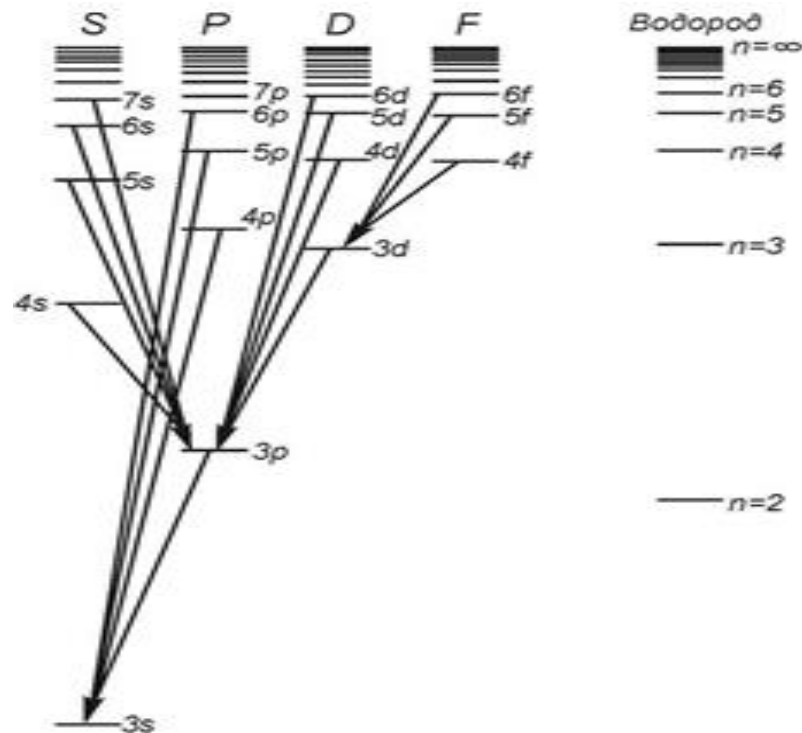
Две достаточно простые для анализа ситуации

- **Первая** реализуется в атомах *щелочных металлов*, имеющих на внешней оболочке всего **один электрон**. Он довольно легко переходит в возбужденные состояния. При этом результирующее электрическое поле, в котором электрон движется, практически не изменяется.
- **Вторая** характерна для *рентгеновских спектров атомов*. Переходы электронов из невозбужденных состояний внешних оболочек в освободившиеся нижние состояния внутренних оболочек. **Анализ упрощается для атомов с большим Z** . Удаление электрона с внутренней оболочки такого атома слабо изменяет результирующее поле для остальных электронов, а значит, практически не изменяет значения энергии состояний.

4. Энергетические состояния и спектральные переходы в многоэлектронных атомах

Спектральные переходы, связанные с возбуждением электрона верхней оболочки натрия.

У натрия возможны переходы и без изменения квантового числа n , а только с изменением l . Например, переходы $3p \rightarrow 3s$, $3d \rightarrow 3p$.

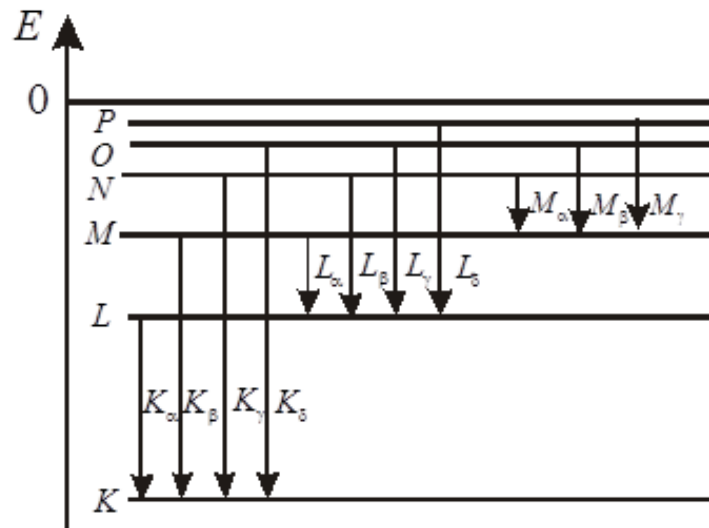


4. Энергетические состояния и спектральные переходы в многоэлектронных атомах

Рентгеновские спектры

Серии отдельных линий, связанных с переходами на одну и ту же нижележащую оболочку.

Рентгеновские фотоны, обладающие наибольшей энергией, связаны с K –серией, которая возникает при переходе электронов на K –оболочку с $n=1$. Затем по убывающей следует L – серия (L – оболочка с $n=2$), M – серия (M – оболочка с $n=3$), N – серия (N – оболочка с $n=4$) и т.д.



4. Энергетические состояния и спектральные переходы в многоэлектронных атомах

С увеличением порядкового номера Z растет число заполненных электронами состояний и *возрастает количество линий в рентгеновских спектрах атомов.*

Одновременно увеличивается и *энергия излучаемых рентгеновских фотонов* одной и той же серии.

Спасибо за внимание!