

ФІЗИКО-МАТЕМАТИЧНІ НАУКИ

УДК 539.1.01

ЗАПОЛНЕНИЕ ЭЛЕКТРОННЫХ ОБОЛОЧЕК АТОМОВ

Попенко В.И.

Научно-производственная корпорация
«Киевский институт автоматки»

Зависимость количества электронов полностью заполненных оболочек от номера оболочки и энергия связи электронов рассмотрена в [1]. В предлагаемой статье сделана попытка объяснения порядка заполнения оболочек с позиции энергетической выгоды электронных конфигураций, образуемых в процессе заполнения оболочек.

Ключевые слова: атом, электрон, электронная оболочка, ядро.

Электронная застройка атомов следует общему свойству материи, стремлению к состоянию с наименьшей энергией. Энергия связи электронов атома имеет отрицательный знак. Состоянию атома с наименьшей энергией соответствует максимальная энергия связи его составляющих.

Потенциалы атомных ядер и потенциалы электронов сферически симметричны, поэтому электроны в атомах размещаются сферическими слоями, или оболочками, на одинаковых расстояниях в слое от ядра и максимальных расстояниях друг от друга [1]. Первая или ближайшая к ядру оболочка поименована K , последующие – L , M , N , O , P , Q [3].

Энергия связи электрона в атоме равна сумме отрицательной энергии электрона в потенциале ядра, зависящей от заряда ядра и расстояния электрона до ядра, и положительной энергии взаимодействия между электронами оболочки, зависящей от числа электронов в оболочке и расстояний между ними, которые в свою очередь зависят от числа электронов в оболочке.

С увеличением заряда ядра атомов, и соответственно числа электронов в оболочке, энергия взаимодействия между электронами оболочки по абсолютной величине возрастает быстрее, чем энергия электрона в потенциале ядра. Это приводит к колебаниям величины энергии связи электронов атомов, при монотонном увеличении атомного номера.

Полностью заполненные оболочки содержат по $N = 2n^2$ электронов, где $n = 1, 2, 3, \dots$ – номер оболочки. Физически формула отражает пропорциональность числа электронов n -той электронной оболочки её относительному объёму V_n . Цифра два означает четное число электронов в оболочке. $V_n \propto \pi R_n^2 A_n \propto n^2$, где $R_n \propto n A_n$ – средний радиус оболочки, A_n – толщина оболочки, величина которой пропорциональна расстоянию до ядра и обратно пропорциональна заряду ядра. Объём, занимаемый электроном в атоме, зависит от заряда ядра и номера оболочки, в которой он расположен. Чем больше заряд ядра, и чем ближе электрон к ядру, тем меньше занимаемый им объём.

Регулярное заполнение, электронных оболочек атомов при последовательном увеличении заряда

ядра атома, в соответствии с формулой $N = 2n^2$, предполагает размещение двух электронов в K оболочке, восьми в L , восемнадцати в M , тридцати двух в N , пятидесяти в O оболочке и т.д.

Единственный электрон атома водорода размещается на дне потенциальной ямы образуемой, согласно [1], Кулоновским потенциалом ядра и слабым взаимодействием электрона с протоном. Вторая составляющая потенциальной функции, образующей потенциальную яму, вытекает из распада нейтронов и K захвата электронов некоторыми атомами, относящихся к слабым взаимодействиям.

Два электрона гелия размещаются в диаметрально противоположных точках потенциальной ямы атома.

Размещение электронов лития рассмотрим детальнее. Два его электрона размещаются в K оболочке в диаметрально противоположных точках потенциальной ямы, на расстоянии d . Третий размещается в следующей L оболочке.

Глубина потенциальной ямы ядра лития – 122.42 эВ [2]. Присутствие второго электрона в K оболочке повышает энергию связи каждого до -75.62 эВ, на величину энергии их взаимодействия друг с другом, равную разности энергии их связи и глубины потенциальной ямы $W_{e,e} = -75.62 - (-122.42) = 46.8$ эВ.

Если мысленно поместить третий электрон лития в K оболочку, расстояния, $a = d\sqrt{3}/2$ между электронами, равномерно рассредоточенными по окружности, уменьшится сравнительно расстояния d между двух электронов в $a/d = \sqrt{3}/2$ раз. При этом каждый электрон будет взаимодействовать не с одним, а уже с двумя другими, поэтому энергия взаимодействия каждого электрона станет равной $W_{e,e}^* = 2 \cdot 46.8 \cdot 2/\sqrt{3} = 108.08$ эВ.

Суммарная энергия связи трех электронов в K оболочке мысленного атома лития будет составлять $W_{Li}^* = (108.08 - 122.42) \cdot 3 = -43.02$ эВ.

Отрицательная энергия связи электронов реального атома лития с двумя электронами в K и третьим в L оболочке $W_{Li} = -(75.62 \times 2 + 5.92) = -157.16$ эВ, по абсолютной величине больше энергии связи мысленного атома лития с тремя электронами в K оболочке на $|W_{Li} - W_{Li}^*| = 157.16 - 43.02 = 114.14$ эВ.

Это значит, что переход от двух электронов в слое к трём энергетически не выгодное событие в размещении электронов. Подтверждение тому то, что, при характерном для внешних оболочек атомов увеличении энергии связи с ростом числа электронов, энергия связи третьего электрона по абсолютной величине меньше энергии связи второго электрона. А именно: бериллий 9.32 эВ – бор 8.30 эВ, магний 7.64 эВ – алюминий 5.98 эВ, цинк 9.39 эВ – галлий 6.0 эВ, кадмий 8.99 эВ – индий 5.7 эВ, ртуть 10.43 эВ – таллий 6.11 эВ; где первый атом пары имеет два, второй три электрона во внешней электронной оболочке.

Это подтверждается и тем, что энергии связи второго электрона атома бериллия и изоэлектронных ионов, (первая строчка таблицы, приведенной ниже), практически равны энергиям связи третьего электрона атома бора и изоэлектронных ионов, (вторая строчка таблицы):

Be, 9.32; *BII*, 25.15; *CI*, 47.87; *NI*, 77.45; *OV*, 113.87; *FVI*, 157.1; *NeVII*, 208.1; *NaVIII* 264.2; *MgIX*, 328

B, 8.29; *CII*, 24.37; *NI*, 47.42; *OIV*, 77.39; *FV*, 114.21; *NeVI*, 157.9; *NaVII*, 208.4; *MgVIII*, 265.8; *AlIX*, 330.1.

Где: *Be*, *BII*, *CI*, *NI*... – символы атомов и ионов; 9.32, 25.15, 47.87... – эВ [Т].

При почти равных энергиях связи электронов элементы нижней строчки таблицы содержат на один электрон больше, т.е. удельная энергия связи электронов нижней строчки по абсолютной величине меньше, чем верхней.

Энергетически не выгодный переход от двух электронов к трём в слое, может приводить к нарушению регулярного порядка заполнения электронных оболочек некоторых атомов.

С лития по неон происходит регулярное заполнение второй *L* оболочки, которая согласно формуле $N = 2n^2$, может содержать $2 \cdot 2^2 = 8$ электронов. Хотя при переходе с двух электронов в атоме бериллия к трём в атоме бора наблюдается понижение величины энергии связи, нарушения регулярного порядка заполнения оболочки не происходит, поскольку ему нет альтернативы.

С достижением числа электронов внешней оболочке восьми, энергия взаимодействия их друг с другом по абсолютной величине приближается к энергии в потенциале ядра. Присоединение к ней девятого электрона может понизит энергию связи электронов оболочки по абсолютной величине, сравнительно восьми электронов. Рассмотрим это на примере атома натрия. Натрий содержит один электрон в *M* оболочке с энергией связи – 5.14 эВ, восемь электронов в *L* оболочке и два в *K* оболочке. Энергия связи шестого, седьмого и восьмого электронов *L* оболочки составляет $W_6 = -98.88$, $W_7 = -71.65$ и $W_8 = -47.29$ эВ. Разности их соответственно равны $\Delta W_{6,7} = -(98.88 - 71.65) = -27.23$, $\Delta W_{7,8} = -(71.65 - 47.29) = -24.36$ эВ.

Мысленно поместим одиннадцатый электрон натрия девятым в *L* оболочку. Энергию связи его экстраполируем разностью энергии связи восьмого электрона и среднего значения разностей между энергиями связи предыдущих электронов $W_9^* = W_8 - (\Delta W_{6,7} + \Delta W_{7,8})/2 = -[47.29 - (27.23 + 24.36)/2] = -21.46$ эВ.

Размещение восьми электронов в *L* и одного в *M* оболочке реального натрия энергетически вы-

годнее девяти электронов *L* оболочке мысленного натрия с девятью электронами в *L* оболочке на $W_{Na} - W_{Na}^* = -[(47.29 \times 8 + 5.14) - (21.46 \times 9)] = -190.32$ эВ. Переход от восьми к девяти электронам в оболочке, как и от двух к трём, энергетически не выгодное событие в размещении электронов. Девятый электрон никогда не присоединяется к внешней оболочке.

Энергетический барьер перехода от восьми к девяти электронам $|190.32|$ эВ выше, чем $|114.14|$ эВ, от двух к трём поэтому, как, правило, приводит к образованию нового слоя. Заполнение внешних оболочек атомов заканчивается восемью электронами, а вместо присоединения девятого электрона начинается заполнение следующего слоя.

Энергетический барьер перехода от двух к трём электронам во внешней оболочке, при наличии не достроенных внутренних оболочек, приводит к их дальнейшей доработке.

Поскольку потенциал ядра в области расположения внутренних оболочек, сопровождающийся присоединением двух внешних электронов, повышается до некоторого уровня, в атомах скандия, иттрия, лантана, актиния становится энергетически возможным присоединение к восьми девятого и последующих электронов.

С натрия по аргон происходит регулярное заполнение восьми электронов *M* оболочки. Энергетически не выгодный переход к девяти электронам в *M* оболочке атома калия замещается присоединением его девятнадцатого электрона первым, и двадцатого электрона кальция вторым, к следующей *N* оболочке.

После повышения заряда ядра на две единицы, сопровождающегося присоединением двух электронов калия и кальция к *N* оболочке, положительный потенциал ядра во внутренней *M* оболочке поднимается до уровня, достаточного для преодоления энергетического барьера при переходе от восьми к девяти электронам. По этой причине, энергетически не выгодный переход от двух к трём электронам во внешней *N* оболочке, скандия замещается продолжением, временно отложенного, заполнения восемнадцати электронной *M* оболочки с размещением в ней девятого и последующих электронов.

Завершение его происходит переходом от шестнадцати электронов в *M* оболочке никеля к восемнадцати электронам атома меди, с одновременным уменьшением на один числа электронов в *N* оболочке, минуя менее выгодный переход к семнадцати электронам.

С атома меди продолжается регулярное заполнение *N* оболочки, прерываемое, предстоящим за атомом криптона, энергетически не выгодным переходом от восьми к девяти электронам, который замещается последовательным присоединением тридцать седьмого электрона рубидия и тридцать восьмого электрона стронция к следующей *O* оболочке.

Повышение заряда ядра на две единицы и потенциала ядра в области внутренней *N* оболочки, с присоединением двух электронов внешней *O* оболочки, становится достаточным для перехода в *N* оболочке атома иттрия от восьми к девяти электронам. Поэтому энергетически не выгодный переход от двух к трём электронам,

намечающийся в O оболочке после стронция замещается продолжением отложенного заполнения N оболочки до восемнадцати электронов, завершаемого палладием. При этом минуются энергетически менее выгодные конфигурации с одиннадцатью электронами ниобия и семнадцатью родия, с соответствующим изменением на один электрон в O оболочке.

С сорок седьмого электрона серебра продолжается регулярное заполнение O оболочки, прерываемое предстоящим за атомом ксенона, энергетически не выгодным переходом от восьми к девяти электронам во внешней оболочке, замещаемым последовательным присоединением пятидесяти пятого электрона цезия и пятидесяти шестого электрона бария к следующей P оболочке.

Энергетически невыгодный переход от двух к трём электронам во внешней P оболочке, который должен последовать за атомом бария, замещается присоединением пятидесяти седьмого электрона лантана девятым к внутренней O оболочке, положительный потенциал ядра, в которой повысился до уровня позволяющего это присоединение.

Пятидесят восьмым электроном церия продолжается временно отложенное заполнение тридцати двух электронной N оболочки лантаноидов, заканчиваемое лютецием, минуя энергетически не выгодные девятнадцать и двадцать шесть, с соответствующим изменением числа электронов в O оболочке.

С лютеция, потенциал ядра которого во внутренней O оболочке повысился до уровня, позволяющего присоединение девятого электрона, продолжается, прерванное на атоме ксенона, дальнейшее заполнение восемнадцати электронов внутренней O оболочки до золота включительно. Минуя число шестнадцать с соответственным изменением числа электронов в P оболочке.

С золота по радон выполняется регулярное заполнение восьми электронами внешней P оболочки отложенное не реализованным, энергетически не выгодным переходом в ней от двух к трём электронам после бария.

Энергетически не выгодное присоединение девятого электрона к P оболочке после радона, замещается присоединением первого электрона в атоме франция, и следующего за ним второго в атоме радия к Q оболочке.

Восемьдесят девятый электрон актиния присоединяется девятым, и девяностый десятый к внутренней P оболочке, потенциал ядра, в об-

ласти которой возрос сравнительно франция до уровня допускающего эти конфигурации.

С девяносто первого электрона протактиния до атома лоуренсия включительно, продолжается, отложенное из-за энергетически предпочтительного заполнения восьми электронами внешней P оболочки начинающееся на атоме золота, регулярное заполнение с двадцатого по тридцать второй электрон O оболочки актиноидов. При этом минуются энергетически менее выгодные девятнадцать и двадцать четыре электрона с соответствующим, изменением числа электронов P оболочке.

И наконец, в атоме курчатовия к девяти электронам внутренней P оболочке присоединяется десятый электрон.

Таким образом, электронная застройка атомов следует общему свойству материи, стремлению к состоянию с наименьшей энергией.

Энергия связи электронов в атомах изменяется не равномерно при последовательном изменении числа электронов в оболочках.

Резкие понижения величины её, связанные с переходом от восьми к девяти электронам во внешнем слое, приводят к очевидным, нарушениям порядка заполнения оболочек в целых группах атомов, начинающихся одним электроном в слое и заканчивающихся инертными газами. А, так же от двух к трём электронам во внешнем слое, приводящим к продолжению, отложенного заполнения внутренних оболочек.

Менее значительные понижения её в оболочках с числом электронов более восьми приводят к менее очевидным нарушениям порядка заполнения отдельных атомов, таких как хром, медь, ниобий, технеций, палладий, церий, гадолиний, платина, протактиний лютеций, америций.

Электронная застройка атомов отвечает энергетически выгодному размещению электронов, с максимальной энергией связи и минимальной общей энергией связанных в атом частиц. Зависимость её, от каких либо квантовых условий и квантовых чисел, свойственных квантовой физике, не наблюдается.

В статье дано качественное объяснение электронной застройки атомов. Количественное её описание сложная проблема, поскольку задача взаимодействия более трёх тел практически не решается. А в электронной застройке кроме ядра и электрона, присоединяемого к оболочке, во взаимодействии принимают участие восемь и более электронов оболочек.

Список литературы:

1. Попенко В. И. Энергия связи электронов в атомах «Молодой вчений» 2016.
2. Потенциалы ионизации атомов и ионов. Справочник химика / под ред. Б. П. Никольского – М.-Л.: Химия, 1982, т. 1, с. 325-327.
3. Макареня А. А. Трифонов Д. И. Периодический закон Д. И. Менделеева – М. Просвещение 1969.

Попенко В.Й.

Науково-виробнича корпорація
«Київський інститут автоматички»

ЗАПОВНЕННЯ ЕЛЕКТРОННИХ ОБОЛОНОК АТОМІВ

Анотація

Залежність кількості електронів повністю заповнених оболонок від номера оболонки і енергія зв'язку електронів розглянута в [1]. У пропонованій статті зроблена спроба пояснення порядку заповнення оболонок з позиції енергетичної вигідності електронних конфігурацій, що утворюються в процесі заповнення оболонок.

Ключові слова: атом, електрон, електронна оболонка, ядро.

Popenko V.I.

Scientifically Productive Corporation
«Kyiv Institute of Automation»

FILLING OF THE ELECTRONIC SHELLS OF ATOMS

Summary

Dependence of amount of electrons of the fully filled shells on the number of shell and energy of connection of electrons are considered in [1]. In the offered article given it a short explanation of order of filling of shells from position of power advantage of the electronic configurations formed in the process filling of shells.

Keywords: atom, electron, electronic shell, kernel.