



# ЭЛЕКТРО́ННАЯ ПЛО́ТНОСТЬ

Авторы: В. И. Пупышев

ЭЛЕКТРО́ННАЯ ПЛО́ТНОСТЬ, плотность вероятности распределения электронов в квантовой системе (атоме, молекуле, кристалле). Обычно Э. п. задают как функцию координат одного электрона. В этом случае Э. п. отражает пространственное распределение заряда и позволяет найти электрич. свойства частицы (*дипольный момент* и т. п.), в связи с чем Э. п. называют также зарядовой плотностью. Э. п. молекулярных систем чаще всего изучают с помощью эксперим. данных о рассеянии электронов или рентгеновского излучения.

В молекулярных системах с ненулевым суммарным спином (радикалы, триплетные *возбуждённые состояния* молекул и др.) плотность распределения проекции электронного спина на выделенную ось называют спиновой плотностью. Спиновая плотность может быть изучена экспериментально методами ЭПР.

Данные об Э. п. представляют обычно либо в компактной форме с помощью эффективных «зарядов на атомах», либо картами Э. п. (похожими на топографические), на которых для определённых сечений трёхмерного пространства задаются линии уровня Э. п. Как правило, Э. п. имеет максимумы лишь в точках пространства, отвечающих положениям ядер. Хотя в целом Э. п. — гладкая функция, в указанных точках она имеет особенности, характеризующиеся зарядами ядер. Некоторые из ядер на картах Э. п. соединены «горными хребтами», которые соотносят с химич. связями. Изучение изменений электронных распределений позволяет судить об особенностях перераспределения Э. п. при образовании молекул или кристаллов из атомов или при др. химич. реакциях.

Для осн. состояния молекулы Э. п., согласно теореме Хоэнберга — Кона, отражает всю специфику молекулы. Напр., с ростом расстояния от электрона до молекулы Э. п. экспоненциально спадает, причём показатель экспоненты задаётся *ионизационным потенциалом*. В рамках методов функционалов плотности делаются попытки соотнести Э. п. и энергию молекулы.

Э. п. — важная физич. характеристика молекулярной системы, анализ которой позволяет соотнести химич. строение молекулы с локальными особенностями электронного распределения. Перераспределение Э. п. молекулы по сравнению с Э. п. входящих в её состав атомов отражает характер химич. связи и позволяет судить о взаимном влиянии атомов, изменении строения того или иного молекулярного фрагмента в ряду родственных молекул.

## Литература

Лит. см. при ст. Квантовая химия.