

В.А. Калибачук С.М. Гождзинский
Л.И. Грищенко Т.А. Овсянникова
В.И. Галинская В.А. Самарский



Медицинская ХИМИЯ

Национальный учебник

*Второе издание,
исправленное*

Под редакцией
д-ра хим. наук, проф.
В.А. Калибачук

Утверждено Министерством образования
и науки Украины как учебник для студентов
высших медицинских учебных заведений
IV уровня аккредитации

Издано в соответствии с приказом
Министерства здравоохранения Украины
№ 502 от 22.06.2010 как национальный учебник
для студентов высших медицинских учебных заведений
IV уровня аккредитации

Киев
ВСИ «Медицина»
2016

УДК 61:54(075.8)
ББК 24я73+5я73
М42

Утверждено

Министерством образования и науки Украины
как учебник для студентов высших медицинских учебных заведений
IV уровня аккредитации (письмо № 1/11-11152 от 05.02.2013)

Издано в соответствии с приказом
Министерства здравоохранения Украины
№ 502 от 22.06.2010 как национальный учебник для студентов высших
медицинских учебных заведений IV уровня аккредитации

Авторы:

*В.А. Калибабчук, Л.И. Грищенко, В.И. Галинская,
С.М. Гождзинский, Т.А. Овсянникова, В.А. Самарский*

Рецензенты:

В.В. Огурцов, кандидат фармацевтических наук, доцент, заведующий кафедрой общей, бионеорганической, физколлоидной химии Львовского национального медицинского университета имени Даниила Галицкого); *В.К. Яцимирский*, лауреат Государственной премии Украины в области науки и техники, академик АН Высшей школы Украины, доктор химических наук, профессор кафедры физической химии Киевского национального университета имени Тараса Шевченко; *Н.М. Антрапцева*, доктор химических наук, профессор, заведующий кафедрой общей химии Национального университета биоресурсов и природопользования Украины

М42 **Медицинская химия** : учебник / В.А. Калибабчук, Л.И. Грищенко, В.И. Галинская и др. — 2-е изд., испр. ; под ред. В.А. Калибабчук. — К. : ВСИ “Медицина”, 2016. — 400 с.

ISBN 978–617–505–503–8

Изложены теоретические основы биоэнергетики и кинетики биохимических реакций; описаны свойства растворов и их роль в протекании биохимических процессов; приведены современные представления об электродных процессах; освещены особенности поверхностных явлений и их роль в жизнедеятельности организма, свойства дисперсных систем и растворов биополимеров. Особое внимание уделено биогенным элементам и их свойствам, рассмотренным с позиции современных представлений о строении атомов, молекул и химической связи.

Затронуты актуальные аспекты проблем экологии.

Для студентов высших учебных заведений IV уровня аккредитации медицинских, фармацевтических, биологических и экологических специальностей.

УДК 61:54(075.8)
ББК 24я73+5я73

© В.А. Калибабчук, Л.И. Грищенко,
В.И. Галинская, С.М. Гождзинский,
Т.А. Овсянникова, В.А. Самарский, 2016
© ВСИ “Медицина”, оформление, 2016

ISBN 978–617–505–503–8

Содержание

ПРЕДИСЛОВИЕ	7
ВСТУПЛЕНИЕ	9
Раздел 1. СТРОЕНИЕ АТОМОВ, ХИМИЧЕСКАЯ СВЯЗЬ И СТРОЕНИЕ МОЛЕКУЛ	13
1.1. Квантово-механическая модель атома	14
1.2. Строение электронных оболочек атомов	18
1.3. Периодический закон Д.И. Менделеева. Структура периодической системы элементов	20
1.4. Периодичность свойств химических элементов	21
1.5. Химическая связь и ее экспериментальные характеристики	24
1.6. Ковалентная связь	27
1.7. Ионная связь	39
1.8. Металлическая связь	40
1.9. Водородная связь	42
1.10. Комплексные соединения	43
<i>Вопросы и задания для самоконтроля</i>	<i>54</i>
Раздел 2. ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ БИОЭНЕРГЕТИКИ	59
2.1. Предмет термодинамики	60
2.2. Термодинамические системы. Термодинамические функции	61
2.3. Первый закон термодинамики	62
2.4. Природа теплового эффекта химических реакций. Термохимические уравнения	65
2.5. Законы термохимии	66
2.6. Использование термохимических расчетов для энергетической характеристики биохимических процессов	70
2.7. Второй закон термодинамики	71
2.8. Уравнение Гиббса	76
<i>Вопросы и задания для самоконтроля</i>	<i>80</i>

Раздел 3. ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ КИНЕТИКИ БИОХИМИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ	82
3.1. Зависимость скорости реакции от концентрации реагирующих веществ. Закон действия масс	85
3.2. Молекулярность и порядок реакции	86
3.3. Простые и сложные реакции	88
3.4. Зависимость скорости реакции от температуры	90
3.5. Катализ	93
3.6. Химическое равновесие. Константа равновесия	98
<i>Вопросы и задания для самоконтроля</i>	104
Раздел 4. РАСТВОРЫ И ИХ РОЛЬ В БИОХИМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССАХ	106
4.1. Современные представления о растворах	107
4.2. Величины, характеризующие количественный состав растворов	116
4.3. Растворимость газов в жидкостях	118
4.4. Растворимость жидкостей и твердых веществ в жидкостях	123
4.5. Коллигативные свойства разбавленных растворов	126
4.6. Растворы электролитов	141
4.7. Диссоциация воды	148
4.8. Теории кислот и оснований	154
4.9. Буферные растворы	165
4.10. Реакции осаждения и растворения	179
<i>Вопросы и задания для самоконтроля</i>	190
Раздел 5. ЭЛЕКТРОДНЫЕ ПРОЦЕССЫ И ИХ ЗНАЧЕНИЕ ДЛЯ ФИЗИОЛОГИИ И МЕДИЦИНЫ	195
5.1. Электродные потенциалы	195
5.2. Классификация электродов	198
5.3. Диффузионные и мембранные потенциалы	204
5.4. Биоэлектрические потенциалы	205
5.5. Окислительно-восстановительные реакции	209
<i>Вопросы и задания для самоконтроля</i>	215
Раздел 6. ФИЗИКОХИМИЯ ПОВЕРХНОСТНЫХ ЯВЛЕНИЙ И ИХ РОЛЬ В ПРОЦЕССАХ, ПРОИСХОДЯЩИХ В ОРГАНИЗМЕ	217
6.1. Поверхностное натяжение жидкостей. Поверхностная активность	218

6.2. Адсорбция на границе жидкость—газ и жидкость—жидкость	221
6.3. Ориентация молекул поверхностно-активных веществ в поверхностном слое	223
6.4. Уравнение адсорбции Ленгмюра	224
6.5. Строение биологических мембран	227
6.6. Полимолекулярная адсорбция	228
6.7. Адсорбция из растворов на твердой поверхности	229
6.8. Закономерности адсорбции растворенных веществ на твердой поверхности	231
6.9. Основы адсорбционной терапии	234
6.10. Адсорбция электролитов	239
6.10.1. Избирательная адсорбция	240
6.10.2. Ионообменная адсорбция	242
6.11. Хроматографические методы анализа	244
6.11.1. Принципы классификации хроматографических методов	245
6.11.2. Применение хроматографии в биологии и медицине	248
<i>Вопросы и задания для самоконтроля</i>	249
Раздел 7. ФИЗИКОХИМИЯ ДИСПЕРСНЫХ СИСТЕМ	252
7.1. Классификация дисперсных систем	254
7.2. Методы получения коллоидных систем	257
7.2.1. Методы диспергации	257
7.2.2. Методы конденсации	258
7.3. Методы очистки коллоидных систем	259
7.4. Молекулярно-кинетические свойства дисперсных систем	262
7.5. Оптические свойства коллоидных систем	265
7.6. Двойной электрический слой. Строение коллоидных частичек	267
7.6.1. Влияние электролитов на величину электрокинетического потенциала. Явление перезарядки коллоидных частичек	273
7.6.2. Электрокинетические явления	276
7.7. Устойчивость и коагуляция дисперсных систем	285
7.7.1. Факторы устойчивости дисперсных систем	286
7.7.2. Теория коагуляции и устойчивости дисперсных систем	288
7.7.3. Механизм коагулирующего действия электролитов	292
7.7.4. Кинетика коагуляции	294
7.7.5. Особые случаи коагуляции	295

7.7.6. Пептизация как процесс, обратный процессу коагуляции	302
7.7.7. Коагуляция в биологических системах	303
7.8. Аэрозоли	304
7.9. Порошки	306
7.10. Суспензии	307
7.11. Пасты	308
7.12. Эмульсии	308
7.13. Пены	310
7.14. Коллоидные поверхностно-активные вещества	311
<i>Вопросы и задания для самоконтроля</i>	314
Раздел 8. ФИЗИКОХИМИЯ БИОПОЛИМЕРОВ И ИХ РАСТВОРОВ	318
8.1. Биологические макромолекулы	320
8.3. Изоэлектрическое состояние белков	323
8.4. Растворы ВМС и их свойства	325
8.5. Термодинамическая устойчивость растворов ВМС. Методы осаждения белков	329
8.6. Осмос. Осмотическое давление в растворах ВМС	331
8.7. Вязкость растворов ВМС	335
8.8. Студни, их образование и свойства	337
<i>Вопросы и задания для самоконтроля</i>	340
Раздел 9. ХИМИЯ БИОГЕННЫХ ЭЛЕМЕНТОВ	342
9.1. Общие сведения о биогенных элементах	342
9.2. <i>s</i> -Элементы. Биологическая роль, применение в медицине	351
9.3. <i>p</i> -Элементы. Биологическая роль, применение в медицине	359
9.4. Общая характеристика <i>d</i> -элементов	379
<i>Вопросы и задания для самоконтроля</i>	389
СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ	393
ПРЕДМЕТНЫЙ УКАЗАТЕЛЬ	394

Понимаемые в глубоком смысле химия и медицина неотделимы.

М.В. Ломоносов

Не только сам врач может применять в деле все, что необходимо, но и больной, и все, кто его окружают, и все внешние обстоятельства должны оказывать содействие врачу в его деятельности.

Гиппократ

Предисловие

Основы преподавания химии для медиков были заложены в XIX ст. русским химиком М.М. Зининым. Медицину в те времена изучали преимущественно в университетах, и потому курс химии для медиков представлял собой адаптированную к потребностям медицины модель университетского химического курса: отдельные разделы неорганической, аналитической, органической, физической и коллоидной химии.

С 2005—2006 учебного года в учебный план высших медицинских учреждений, разработанный в соответствии с условиями вхождения в Болонский процесс, введен курс медицинской химии, который может служить основой дальнейшего изучения медиками физиологии, фармакологии, анестезиологии, санитарии и гигиены.

Целью предлагаемого учебника является наполнение содержанием программы курса “Медицинская химия”. В основу учебника положен многолетний опыт преподавания бионеорганической, физической и коллоидной химии на кафедре общей химии Национального медицинского университета имени А.А. Богомольца.

Учебник состоит из девяти разделов.

В первом разделе (Л.И. Грищенко, В.А. Калибачук) изложены принципы, на основе которых химические свойства веществ можно прогнозировать, исходя из строения атомов и молекул. Цель второго раздела (В.А. Калибачук) — определение границ применения термодинамики к живому организму на основе системных знаний химической термодинамики. В третьем разделе (В.А. Калибачук) описаны методы прогнозирования протекания химических превращений во времени в разных условиях, в частности физиологических. Четвертый раздел (С.М. Гождинский) посвящен теории ра-

створов и связан с широким применением знаний о них в практической медицине. В пятом разделе (Л.И. Грищенко, В.А. Калибачук) рассмотрены механизм возникновения электродных потенциалов и представление о биопотенциалах. В шестом разделе (В.И. Галинская) изложены основные закономерности поверхностных явлений, их биологическая роль и физико-химические основы применения адсорбентов в медицинской практике. В седьмом разделе (В.А. Самарский, Т.А. Овсянникова) описаны свойства дисперсных систем, к которым относят многие жидкости и ткани организма. Восьмой раздел (В.А. Самарский) посвящен физико-химическим свойствам растворов высокомолекулярных соединений, в частности биополимеров. В девятом разделе (Л.И. Грищенко) приведена биологическая роль биогенных элементов.

Разделы начинаются с перечня вопросов, определяющих их проблематику, и формулирования умений, которыми может овладеть студент после усвоения материала раздела. В конце разделов приведены вопросы и задания для самоконтроля знаний.

В учебнике использована номенклатура ИЮПАК, в соответствии с правилами которой каждое вещество получает систематическое название, полностью отображающее его состав. Таких равноценных названий может быть несколько.

Правила ИЮПАК разрешают использование небольшого количества несистемных, специальных названий, таких, как вода, аммиак, аммоний. На практике применяют и тривиальные названия, например соляная кислота, гашеная известь, сода и т.п.

На форзаце учебника помещена периодическая система элементов Д.И. Менделеева, в которой приведены названия химических элементов и простых веществ.

Искреннюю благодарность авторы учебника высказывают Т.А. Лысенко, Н.А. Симонец, В.Л. Слипчук, О.В. Власовой за техническую помощь в подготовке издания.

Авторы признательны заведующему кафедрой общей, бионеорганической, физколлоидной химии доценту В.В. Огурцову (Львовский национальный медицинский университет имени Даниила Галицкого), академику АН Высшей школы Украины, доктору химических наук, профессору В.К. Яцимирскому (Национальный университет имени Тараса Шевченко) и заведующей кафедрой общей химии Национального аграрного университета, доктору химических наук, профессору Н.М. Антрапцевой за внимательное рецензирование.

Все замечания и пожелания, направленные на улучшение учебника, будут восприняты с благодарностью.

Авторы

Вступление

С давних пор человек наблюдал химические явления в природе и старался использовать их для улучшения условий своего существования.

К истокам химии как науки относят атомистические представления о строении вещества, разработанные древнегреческими философами, которые в своем богатом наследии оставили нам философию природы, со временем послужившую фундаментом современной науки.

Термин “химия” пришел к нам от арабов, превративших его в “алхимию”. Этот период развития химии, который сейчас называют периодом алхимии, длился с III по XV ст. От алхимиков современная наука унаследовала исключительно ценный метод работы — эксперимент.

Реформу алхимии начал в XV ст. Т. Парацельс. В результате возникло новое направление — применение химии в медицине — ятрохимия (греч. *ятрос* — врач). Т. Парацельс (1493—1541) считал, что настоящая цель химии состоит не в получении золота, а в приготовлении лекарств, поскольку здоровый организм содержит четко определенные количества химических веществ, а болезни возникают в случае их изменения.

Превращение химии в науку произошло лишь тогда, когда значительных успехов достигла математика, и с ее помощью физики (Р. Бойль, Э. Мариотт, Г. Кавендиш, Дж. Пристли, А. Авогадро, С. Канниццаро) фундаментально изучили газы. Сочетание результатов исследования газов с огромным опытом алхимиков и ятрохимиков стало важнейшим этапом в становлении химии как отдельной области естественных наук.

Большой вклад в развитие химии внесли медики. Кроме упомянутого Парацельса (настоящее имя — Филипп Ауреол Теофраст Бомбаст фон Гогенгейм) это и немецкий врач Г.Е. Шталь (1659—

1734), предложивший теорию флогистона, и французский физиолог А.Ф. Фуркруа (1755—1809), который способствовал утверждению антифлогистонной теории. Его перу принадлежат 11 томов “Системы химических знаний”.

Шведский фармацевт К.В. Шееле (1742—1786) разработал способы получения азота и кислорода, многих минеральных и органических кислот, в частности синтезировал из CO_2 , С и NH_3 синильную кислоту, описал ее запах и даже вкус!

Немецкий судебный врач Ю.Р. Майер (1814—1878) по праву считается вместе с Д. Джоулем (1818—1889) основателем термодинамики. Оказывая медицинскую помощь морякам, он обратил внимание на то, что венозная кровь пациентов в тропиках имеет более светлую окраску, чем у жителей Германии. Майер объяснил этот факт тем, что в венах жителей тропиков остается больше кислорода и, соответственно, оксигемоглобина, чем у жителей холодных стран. Снижение затрат кислорода является результатом замедления биокисления, так как для поддержания постоянной температуры тела в тропиках расходуется меньшее количество пищи. Судебный врач Майер сделал вывод: теплота сгорания пищи расходуется на поддержание постоянной температуры тела и на выполнение мышечной работы.

Из 109 научных работ выдающегося русского врача-физиолога И.М. Сеченова (1829—1905) 40 посвящены применению в медицине химических методов исследования. Он детально изучил, как переносится CO_2 из ткани в кровь и из нее в легкие. И.М. Сеченова можно считать основателем современной медицинской химии.

XX столетие ознаменовалось существенными изменениями в области методов химических и физико-химических исследований. Прежде всего это касается рентгеноструктурного анализа, с помощью которого начали изучать строение кристаллических веществ и геометрию молекул. Метод рентгеновской спектроскопии нашел применение в определении энергии орбиталей и эффективных зарядов. Такие спектроскопические методы, как ядерный магнитный резонанс, электронный парамагнитный резонанс, ядерный квадрупольный резонанс, гамма-резонансная спектроскопия, начали активно использоваться для исследования строения веществ, кинетики и механизмов реакций. Развитие оптических исследовательских методов, в частности электронной и инфракрасной спектроскопии, спектрополяриметрии, масс-спектроскопии, открыло новые возможности в химическом анализе.

Практическое применение результатов химических исследований привело к возникновению ряда новых химических дисциплин, в том числе медицинской химии.

Медицинская химия изучает химические основы процессов жизнедеятельности живого организма, которые подчиняются основным химическим закономерностям.

Большинство процессов, происходящих в живом организме, объясняется на основании теоретических положений неорганической, физической и коллоидной химии. Например, изменение структуры и функций клеток крови в растворах кровезаменителей объясняется законами осмотического давления; распределение ионов электролитов между клетками и внешней средой — законами мембранного равновесия Доннана; механизм передачи нервных импульсов — положениями теории электролитической диссоциации; постоянство концентрации ионов H^+ в биологических жидкостях (крови, лимфе, ликворе) в значительной мере зависит от наличия в их составе буферных систем. Учение об окислительно-восстановительных потенциалах позволяет объяснить протекание многих реакций в организме, обусловленных поступлением и затратой энергии. Особенности физикохимии поверхностных явлений помогают трактовать механизм действия фармацевтических препаратов, объяснять явления фагоцитоза и иммунитета. Не менее важную роль играют законы кинетики и катализа, которые дают возможность понимать закономерности протекания ферментативных и фармакокинетических процессов. Теоретические положения коллоидной химии помогают понять роль факторов устойчивости дисперсных систем организма в процессе его жизнедеятельности.

Медицинская химия изучает строение и реакционную способность наиболее важных биологически активных молекул, теорию химической связи в комплексных соединениях биометаллов с биолигандами и роль биогенных элементов в жизнедеятельности организма. Она изучает процессы, происходящие на молекулярном и субмолекулярном уровнях, поскольку именно здесь и следует искать причину возникновения разных форм заболеваний и специфичность наследственных признаков.

Знание законов химии дает возможность медику целенаправленно влиять на обмен веществ клинически здорового и больного организмов, что в конечном итоге служит залогом улучшения качества жизни.

Ни одна из наук не открыла перед человечеством такие широкие перспективы и не сделала для него больше, чем химия. За по-

следние десятилетия химия обеспечила человечество множеством самых необходимых вещей и предметов комфорта, которые улучшили качество жизни людей, дали возможность жить в чистоте и высокопрофессионально лечиться.

Прогресс современной медицины во многом обусловлен достижениями в химии. Положительный эффект врачебной деятельности на 70 % определяется наличием лекарственных препаратов, большинство которых синтезировано химиками.

Успехи во внедрении электронно-вычислительной техники дали возможность разработать программы, предусматривающие, какие из новых химических структур могут быть особенно эффективными в их фармакологическом применении.

В настоящее время в практической медицине (для диагностики и лечения) повсеместно используются методы, основанные на теоретических разработках физической и коллоидной химии. К ним относятся гемодиализ, гемосорбция, гемофильтрация, препаративный электрофорез клеток и др.

Медицинская химия обеспечивает многогранной информацией дисциплины таких профилей, как медико-биологический (биохимия, физиология, биоорганическая химия, фармакология, медицинская и биологическая физика) и клинический (патологическая физиология, клиническая биохимия, гигиена, токсикология, терапия, анестезиология, физиотерапия, реаниматология и др.). В свою очередь, эти дисциплины как источник первичной информации должны влиять на развитие медицинской химии.

Широкое применение химии в медицине еще раз подчеркивает мудрость мысли бывшего студента Киево-Могилянской академии, великого русского ученого М.В. Ломоносова: "...медик без довольного познания химии совершенен быть не может".

Наука имеет свои храмы, каждый из которых возведен усилиями нескольких архитекторов и большим числом рабочих.

Г. Льюис

Когда в музыке внезапно замолкают басы, полновластно господствующие в мире, создается впечатление, что исчез злой дух. То, что раньше казалось неуправляемым, теперь, словно какими-то чарами, упорядочилось.

Л. Больцман

Раздел 1

Строение атомов, химическая связь и строение молекул

- 1.1. Квантово-механическая модель атома
- 1.2. Строение электронных оболочек атомов
- 1.3. Периодический закон Д.И. Менделеева. Структура периодической системы элементов
- 1.4. Периодичность свойств химических элементов
- 1.5. Химическая связь и ее экспериментальные характеристики
- 1.6. Ковалентная связь
- 1.7. Ионная связь
- 1.8. Металлическая связь
- 1.9. Водородная связь
- 1.10. Комплексные соединения

Вопросы и задания для самоконтроля

После изучения раздела вы сможете:

- 1) трактовать основные положения квантово-механической модели атома;
- 2) интерпретировать квантовые числа; описывать состояние электрона в атоме с помощью квантовых чисел;
- 3) составлять электронные формулы атомов в основном и возбужденном состояниях;
- 4) формулировать принцип минимальной энергии, принцип Паули, правила Хунда и Клечковского;
- 5) объяснять структуру периодической системы элементов, местонахождение *s*-, *p*-, *d*- и *f*-элементов;
- 6) предусматривать свойства элемента в связи с его положением в периодической системе элементов;

- 7) классифицировать химические связи; пользоваться экспериментальными характеристиками химических связей; объяснить способы образования ковалентной связи;
- 8) оценить валентность, координационное число, степень окисления атомов в молекулах; различать полярные и неполярные ковалентные связи;
- 9) трактовать геометрию структур с ковалентным типом связей с привлечением концепции гибридизации атомных орбиталей;
- 10) объяснить на примерах влияние водородной связи на физические и химические свойства веществ;
- 11) отличать комплексные соединения от других соединений; объяснить состав и строение комплексных соединений;
- 12) привести примеры использования комплексонов в медицине и объяснить механизм их действия как антидотов.

1.1. Квантово-механическая модель атома

Основой современной теории строения атома являются законы и положения квантовой (волновой) механики — раздела физики, который изучает движение микрочастиц (электронов, протонов и др.).

В соответствии с квантово-механическими представлениями движущимся микрообъектам присуща двойственная природа: они являются частичками, обладая при этом волновым характером движения, т. е. микрообъекты имеют одновременно *корпускулярные и волновые свойства*. Математически это выражается уравнением де Бройля, согласно которому частичке с массой m , движущейся со скоростью v , отвечает волна длиной λ :

$$\lambda = \frac{h}{mv},$$

где h — постоянная Планка.

Исходя из волновых свойств частичек микромира, Гейзенберг пришел к выводу, известному под названием **принципа неопределенности Гейзенберга**:

микрочастица (так, как и волна) не имеет одновременно точных значений координат и импульса.

Чем точнее определяется положение частички в пространстве, тем менее определен ее импульс (или связанная с ним скорость), и наоборот. Вследствие этого для характеристики движения микрочастиц используют *вероятностный подход*, т. е. определяют не точное их положение, а вероятность пребывания в определенном объеме

пространства. Вместо термина *“движение электрона”* применяют термин *“состояние электрона”*.

Состояние электрона в атоме описывается с помощью электронного облака, плотность соответствующих участков которого пропорциональна вероятности нахождения в них электрона. Поскольку такая вероятность существует даже на относительно большом расстоянии от ядра, электронное облако не имеет четко определенных границ. Итак, под *электронным облаком* понимают пространство вокруг ядра, где нахождение электрона, который характеризуется волновой функцией ψ , наиболее вероятно. Эту область пространства называют также *орбиталью*.

Волновая функция ψ является *амплитудой вероятности* нахождения электрона в определенном месте пространства. Произведение $\psi^2 \Delta V$ представляет вероятность нахождения электрона в элементарном объеме пространства ΔV , а ψ^2 — плотность вероятности, или электронную плотность.

Рассчитывают волновую функцию ψ с помощью **уравнения Шредингера**, которое в наиболее компактной форме можно записать:

$$H\psi = E\psi,$$

где H — оператор Гамильтона, которым обозначают все те математические действия, которые в левой части уравнения производят с величиной ψ ; E — полная энергия электрона.

Решение этого уравнения, т. е. математическое описание орбитали, возможно только при вполне определенных, дискретных значениях характеристик, которые называют **квантовыми числами**. Их обозначают буквами n , l , m .

Орбиталь является полностью описанной, если для нее известны значения квантовых чисел n , l , m .

Главное квантовое число n определяет запас энергии электрона или, другими словами, размер электронного облака (орбитали). Оно приобретает целочисленные значения от 1 до ∞ .

Состояние электрона, характеризующееся определенным значением n , называют **энергетическим уровнем электрона** в атоме. Электроны, имеющие одинаковое значение n , образуют электронные оболочки, которые обозначают цифрами 1, 2, 3, 4, 5... или соответствующими буквами K , L , M , N , O

Наименьшее значение энергии E соответствует $n = 1$. Другим квантовым состояниям отвечают более высокие значения энергии, и электроны, находящиеся на этих энергетических уровнях, слабее связаны с ядром.