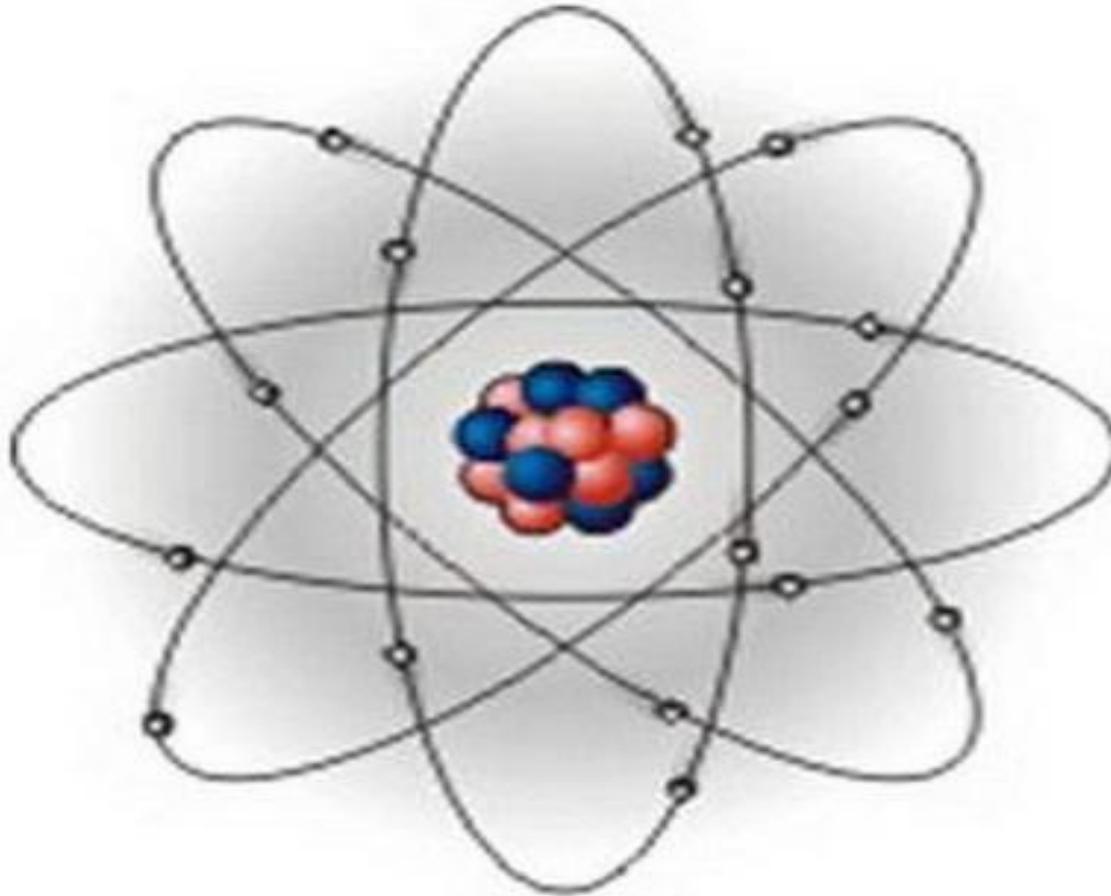


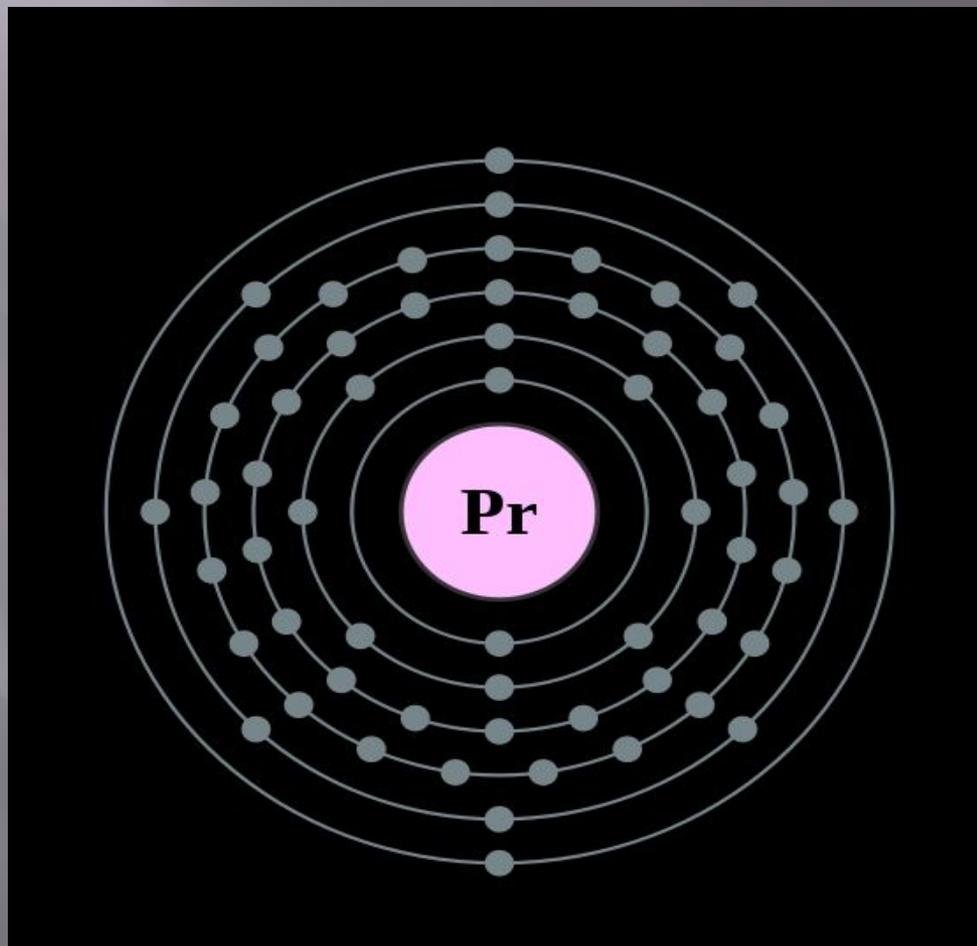
КВАНТОВЫЕ ЧИСЛА

Молчанова Елена
Робертовна.
МБОУ СОШ 144
Красноярск 2011.

**Атом состоит из ядра и
электронной оболочки.**



Электронная оболочка- это совокупность всех электронов в данном атоме.

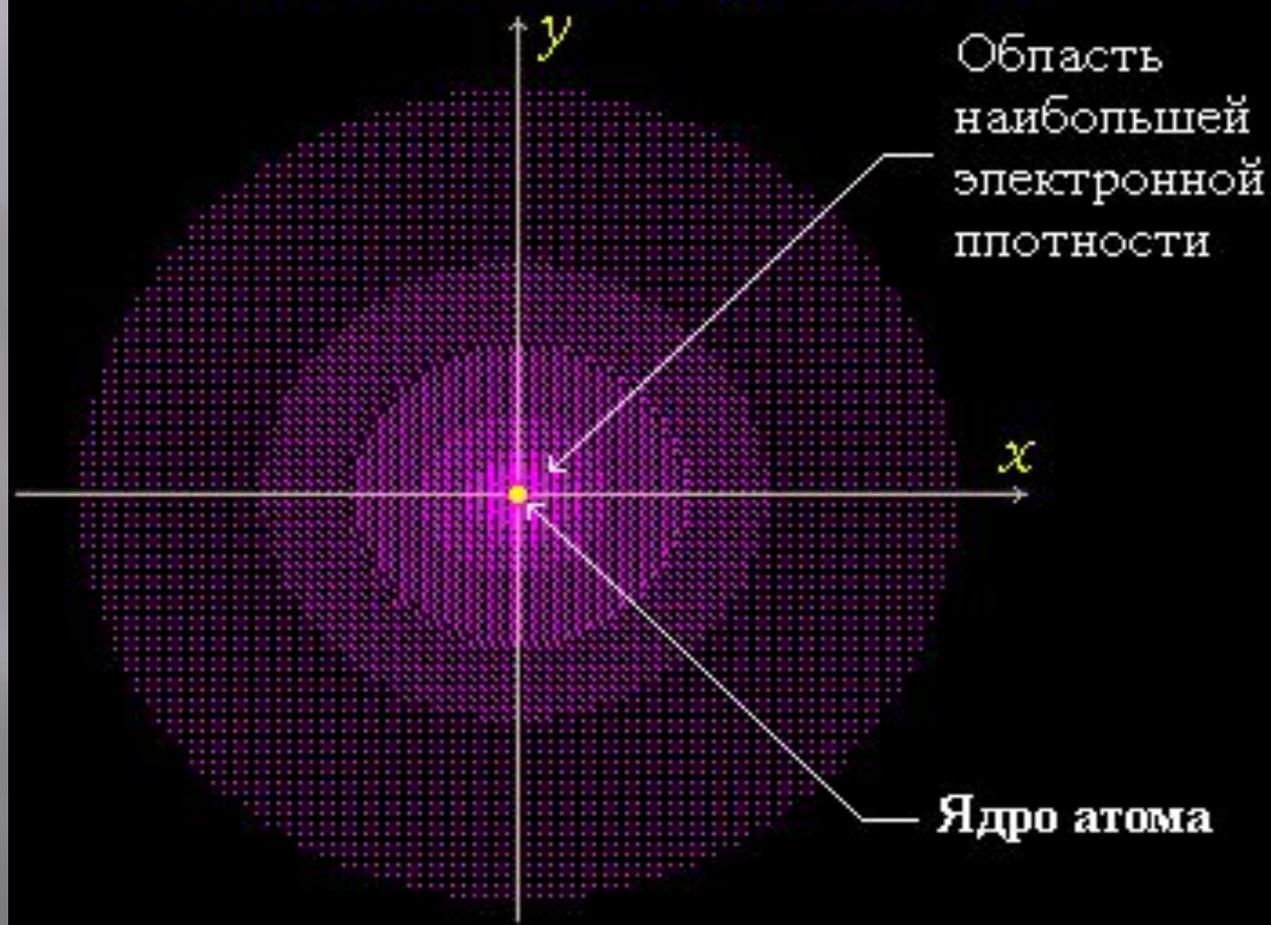


Электрон обладает дуализмом- он одновременно является и частицей и волной



- ▣ Как и другие микрочастицы, электрон не имеет строго определенной траектории движения.
- ▣ *Та часть атомного пространства, в которой вероятность нахождения электрона наибольшая-90%, называется атомной орбиталью.*

Атомная $1s$ -орбиталь

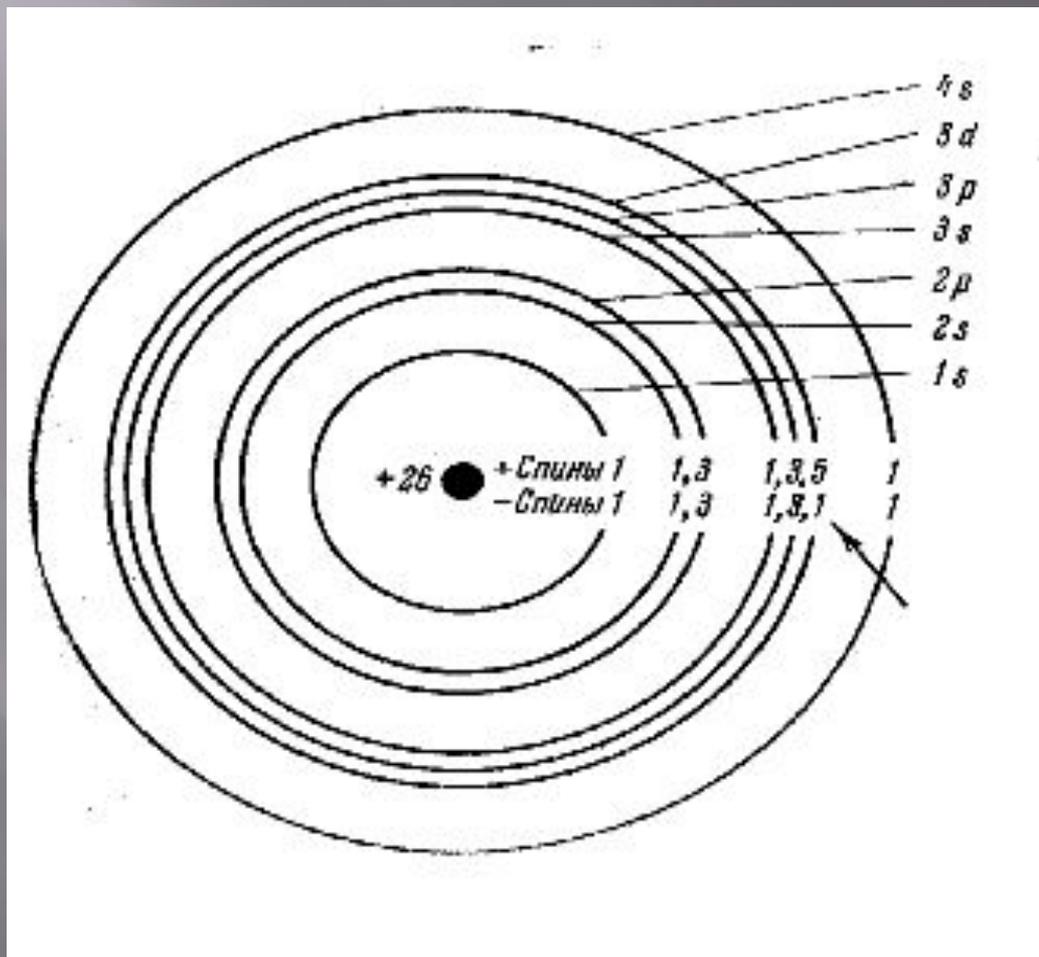


- Электроны, двигаясь в орбиталях близкого размера, создают электронные слои или энергетические уровни.
- Для характеристики электронов и энергетических уровней используют 4 квантовых числа.

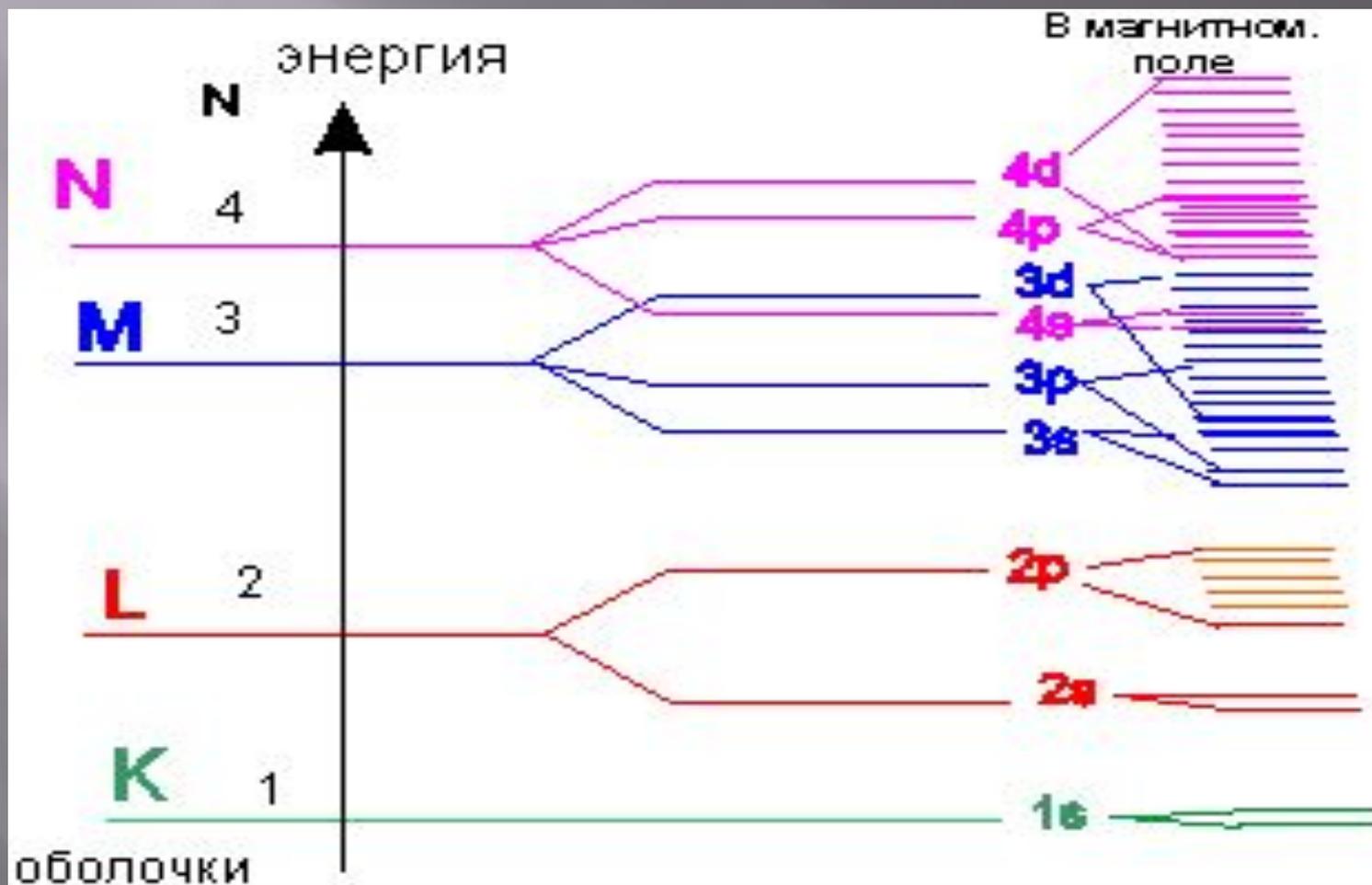
Главное квантовое число (n).

- ▣ Определяет:
 - ▣ - энергетический уровень электрона,
 - ▣ - удаленность уровня от ядра, размер электронного облака.
- ▣ Принимает:
 - ▣ целые значения ($n = 1, 2, 3 \dots \infty$) и соответствует номеру периода.
 - ▣ Из периодической системы для любого элемента по номеру периода можно определить число энергетических уровней атома и какой энергетический уровень является внешним.
- ▣

Строение атома железа.

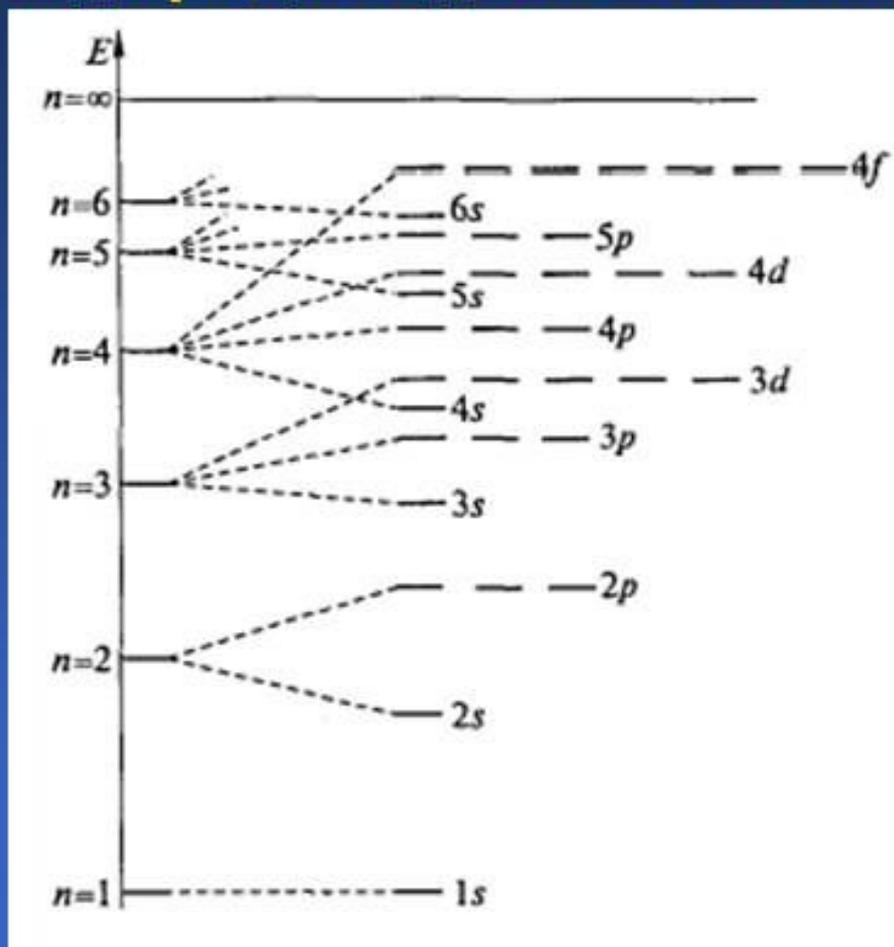


Каждый энергетический уровень делится на подуровни, число которых равно n , но не превышает четырех.



Тема 3. Электронное строение атома

Энергетические уровни водородоподобного атома



Число подуровней, на которые расщепляется энергетический уровень равно номеру уровня. Например,

n	l	Обозначение подуровня
1	0 (одно значение)	1s
2	0;1 (два)	2s; 2p
3	0;1;2 (три)	3s; 3p; 3d

Т.о., *энергетический подуровень* – это совокупность электронных состояний, характеризующихся определенным *набором квантовых чисел n и l* .

**На подуровнях
располагаются орбитали,
которые характеризуются
орбитальным (побочным)
квантовым числом.**

Орбитальное (побочное) квантовое число (L).

- ▣ Оно принимает все значения от 0 до $(n-1)$.
- ▣ Характеризует энергию энергетического подуровня.
- ▣ Характеризует форму орбитали, находящуюся на энергетическом подуровне.

Взаимосвязь главного и орбитального квантовых чисел.

n	L	Обозначение подуровня
1	0	s
2	0,1	s,p
3	0,1,2	s,p,d
4	0,1,2,3	s,p,d,f
5	0,1,2,3,	s,p,d,f

Побочное (орбитальное) квантовое число

l – определяет ...

Характеризует...

Принимает целочисленные знач. от 0 до (n-1)

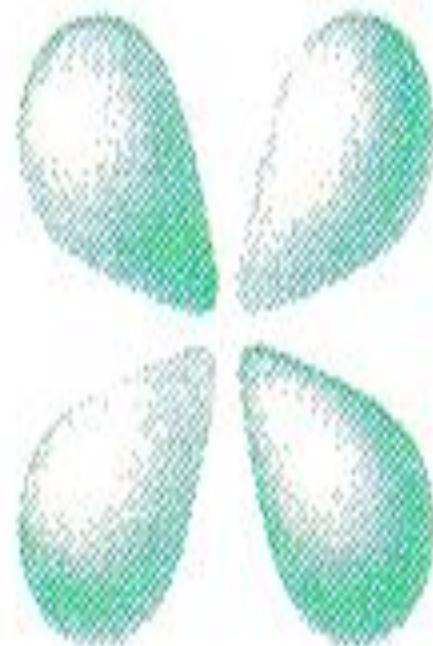
<i>l</i>	0	1	2	3	4
Буквенное обозначение подуровня	s	p	d	f	g
Форма орбитали				СЛОЖН.	СЛОЖН.



$\ell = 0$
s



$\ell = 1$
p

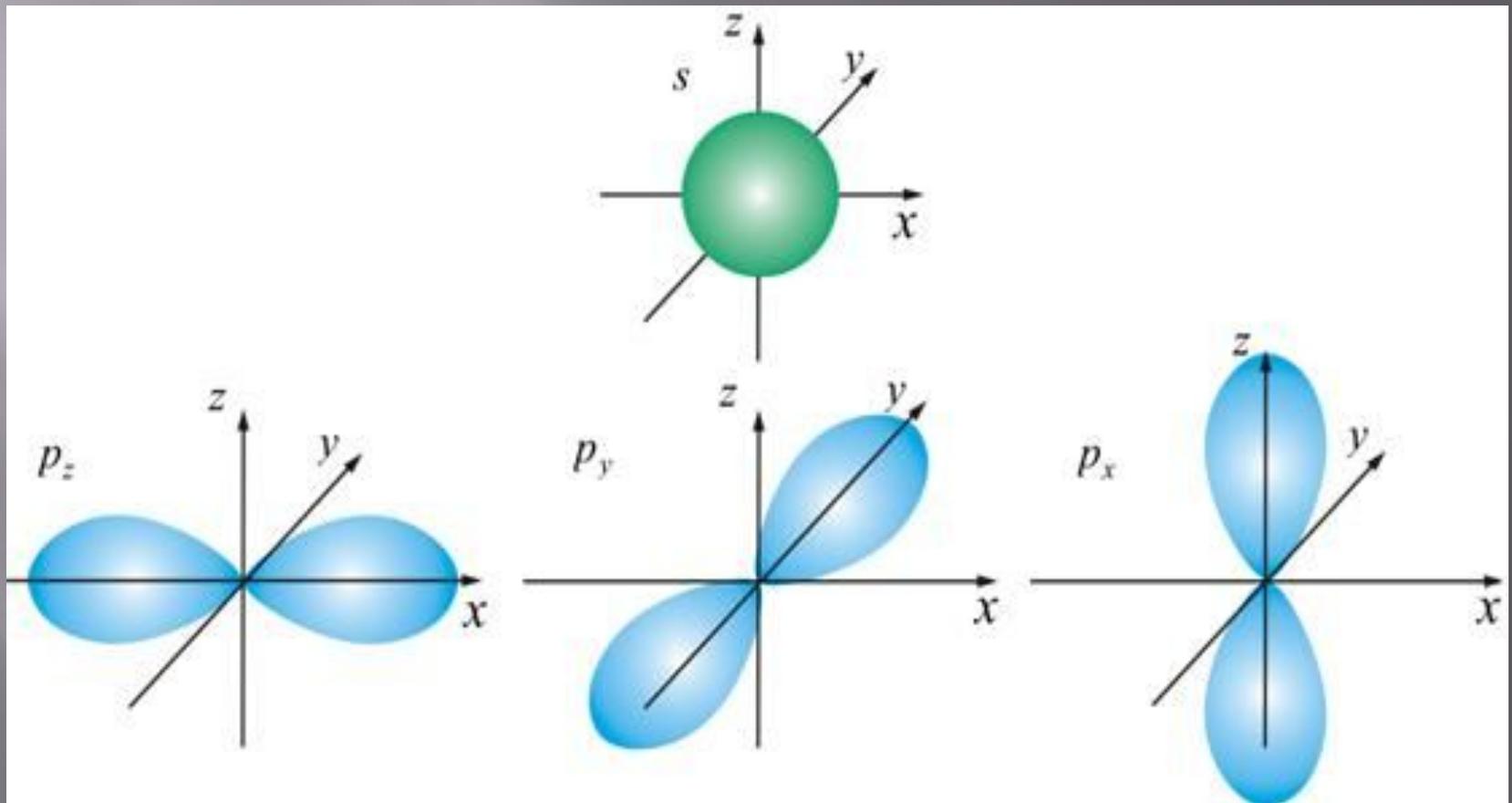


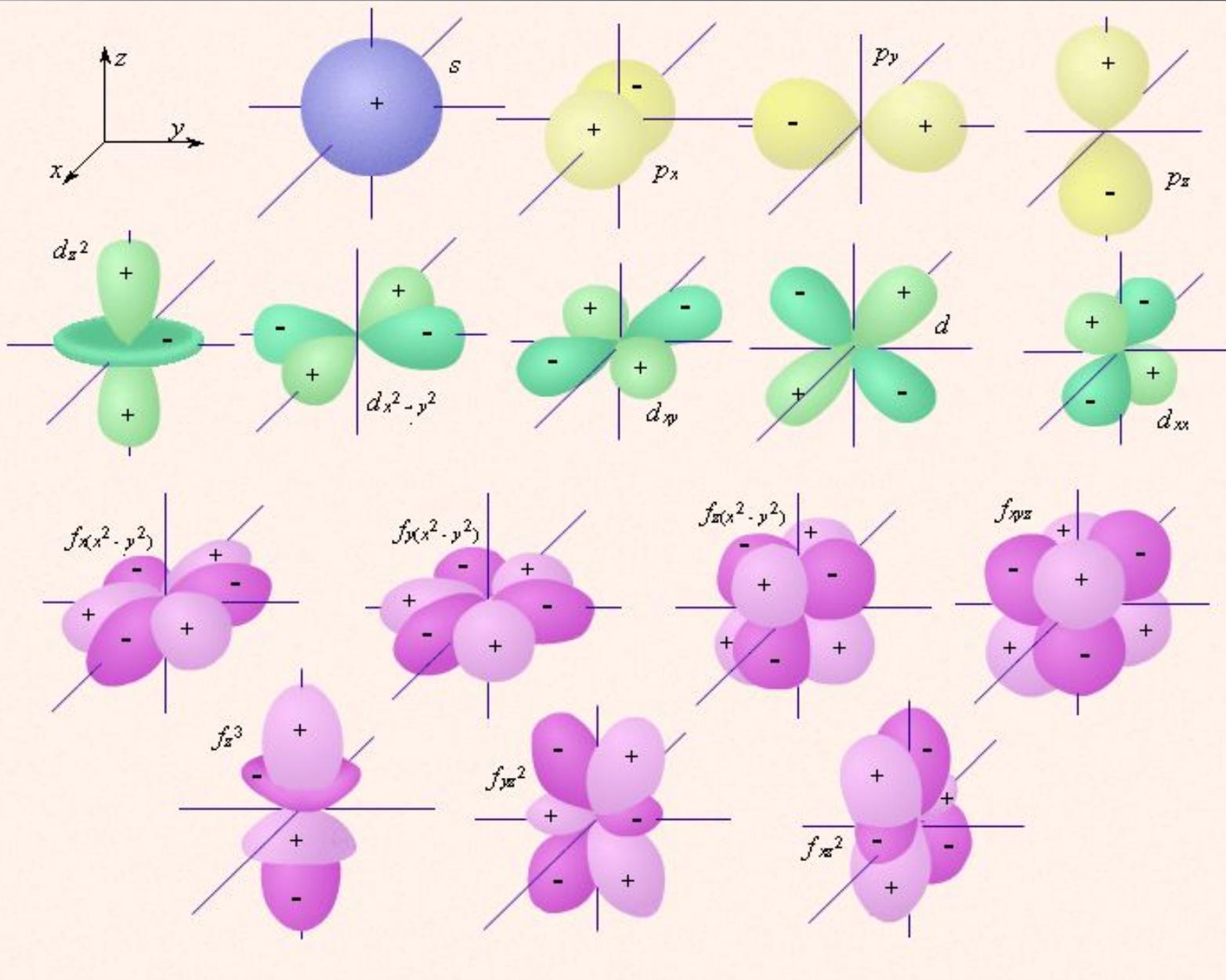
$\ell = 2$
d

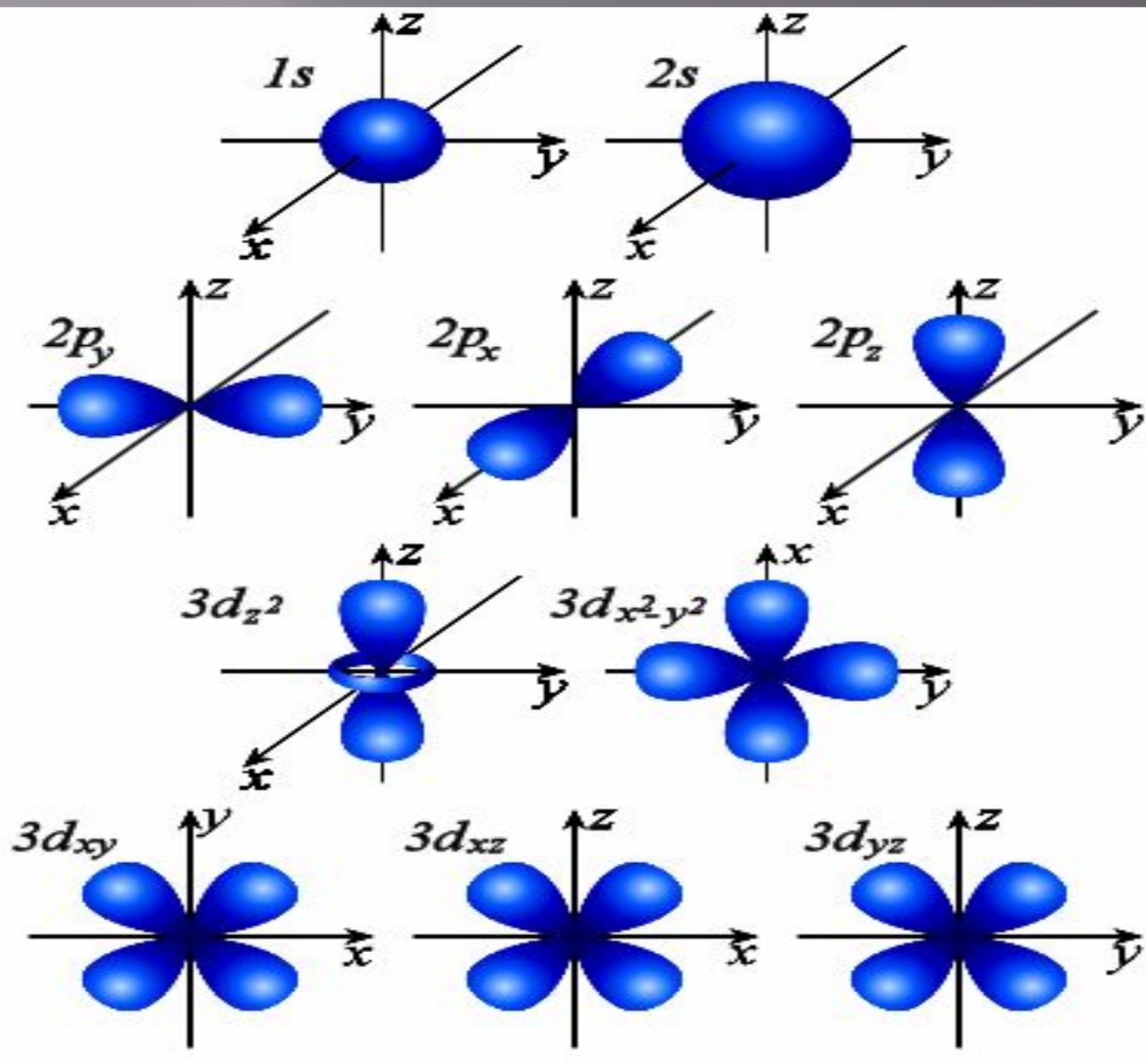
Магнитное квантовое число m

- Электроны, двигаясь по замкнутой орбитали, создают магнитное поле, в котором орбиталь может принимать самые различные направления, что определяется магнитным квантовым числом.

Магнитное квантовое число определяет ориентацию орбитали в пространстве







- Магнитное квантовое число принимает все значения от
- $(-1, 0, +1)$.
- Число значений m соответствует числу орбиталей на подуровне.

l	m	Число орбиталей
0, s	0	1
1, p	-1, 0, 1	3
2, d	-2, -1, 0, 1, 2	5
3, f	-3, -2, -1, 0, 1, 2, 3	7

Следовательно, можно сказать, что число значений m_l указывает на число орбиталей с данным значением l .

s -состоянию соответствует одна орбиталь,

p -состоянию – три,

d -состоянию – пять,

f -состоянию – семь и т.д.

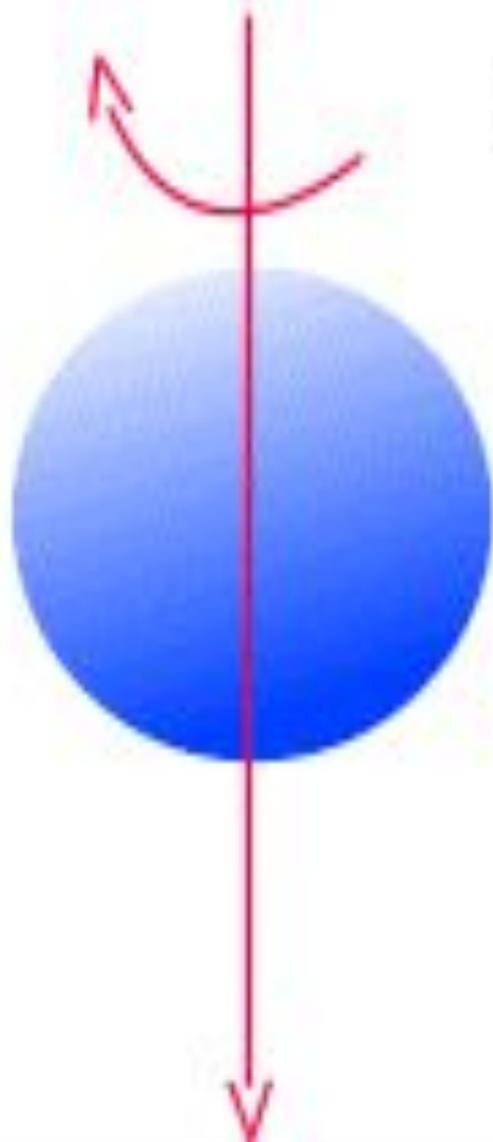
Число орбиталей на подуровне равно $(2l+1)$, а общее число орбиталей на энергетическом уровне равно n^2 .

Все орбитали, принадлежащие одному подуровню данного энергетического уровня, имеют одинаковую энергию в отсутствии магнитного поля (вырожденные).

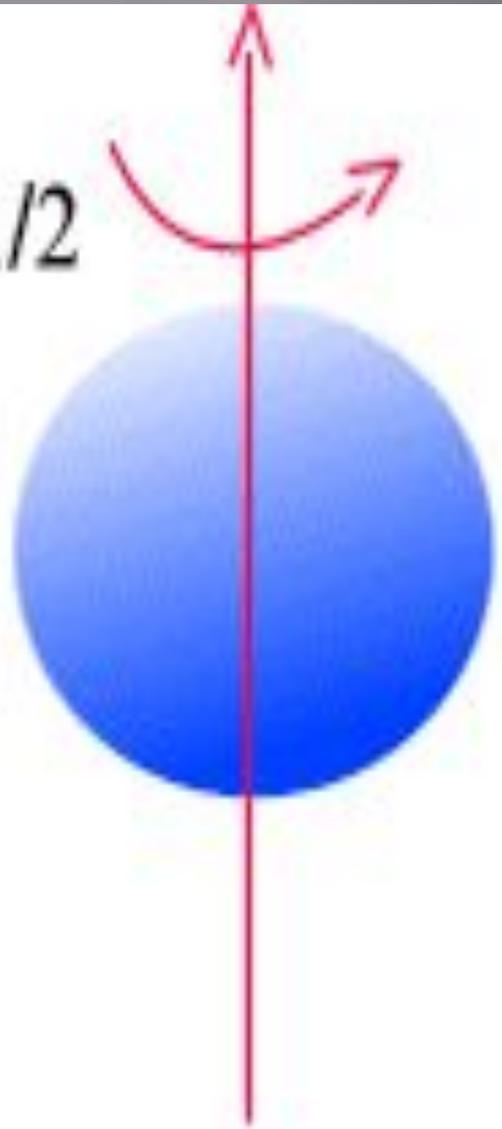
Магнитное спиновое квантовое число m

- Электрон может вращаться вокруг своей оси как по часовой стрелке, так и против.
- Такое вращение электрона характеризуется магнитным спиновым квантовым числом.
- Оно принимает только два значения: $\pm 1/2$.

$S = -1/2$



$S = +1/2$



Тема 3. Электронное строение атома

Квантовые числа

Уравнение Шредингера

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} + \frac{8\pi^2 m}{h} (E - U) \psi = 0$$

Квантовое число	Принимаемые значения	Характеризуемое свойство	Примечание
Главное (n)	1, 2, 3, ..., ∞	Энергия (E) уровня. Среднее расстояние (r) от ядра	$n = \infty$ — отсутствие взаимодействия с ядром.
Орбитальное (l)	0, 1, ..., ($n - 1$) всего n значений для данного n	Орбитальный момент количества движения – расположение орбитали в пространстве	Обычно используют буквенные символы: L: 0 1 2 3 4 s p d f g
Магнитное (m)	– данногo n / всего $2l + 1$ значений для данного l	Ориентация собственного магнитного момента	При помещении в магнитное поле орбитали с различными m_l имеют разную энергию
Спиновое (m_s)	$\pm 1/2$ не зависит от свойств орбитали	Проекция собственного момента количества движения	Обозначают \uparrow и \downarrow

Характеристика \ Квантовые числа	Главное	Орбитальное	Магнитное	Спиновое
1. Обозначение	n	l	m_l	m_s
2. Значения	1, 2, ..., 7, ..., ∞	От 0 до $(n-1)$	$-l, 0, +l$	$\pm 1/2$
3. Физический смысл	<p><i>Характеризует:</i></p> <ol style="list-style-type: none"> Запас энергии электрона на энергетическом уровне. Размер электронного облака (т.е. радиус атома) Совпадает с номером периода в П.С. 	<p><i>Характеризует:</i></p> <ol style="list-style-type: none"> Запас энергии электрона на подуровне Форму электронного облака: S – облако – сфера P – облако – гантели 	<p><i>Определяет:</i></p> <p>ориентацию атомной орбитали в пространстве относительно внешнего магнитного или электрического поля</p>	<p><i>Определяет:</i></p> <p>собственное состояние электрона, не связанное с движением вокруг ядра. Спин – это кручение, вращение электрона вокруг своей оси</p>
<p>Состояние электрона в атоме, характеризующееся определёнными значениями l, n, m_l, т.е. определёнными размерами формой и ориентацией в пространстве электронного облака, называется <i>атомной электронной орбиталью (АО)</i></p>				

Квантовый				Магнитное квантовое число m_l	Число квантовых состояний (орбиталей)		Максимальное число электронов	
уровень		подуровень			В подуровне $(2l+1)$	В уровне на n^2	В подуровне $2 \cdot (2l+1)$	В уровне на $2n^2$
обозначение	Главное квантовое число n	обозначение	Орбитальное квантовое число l					
K	1	s	0		1	1	2	2
L	2	s	0		1	4	2	8
		p	1	-1; 0; +1	3		6	
M	3	s	0		1		2	
		p	1	-1; 0; +1	3	9	6	18
		d	2	-2; -1; 0; +1; +2	5		10	
N	4	s	0		1		2	
		p	1	-1; 0; +1	3		6	
		d	2	-2; -1; 0; +1; +2	5	16	10	32
		f	3	-3; -2; -1; 0; +1; +2; +3	7		14	

Применение квантовых чисел

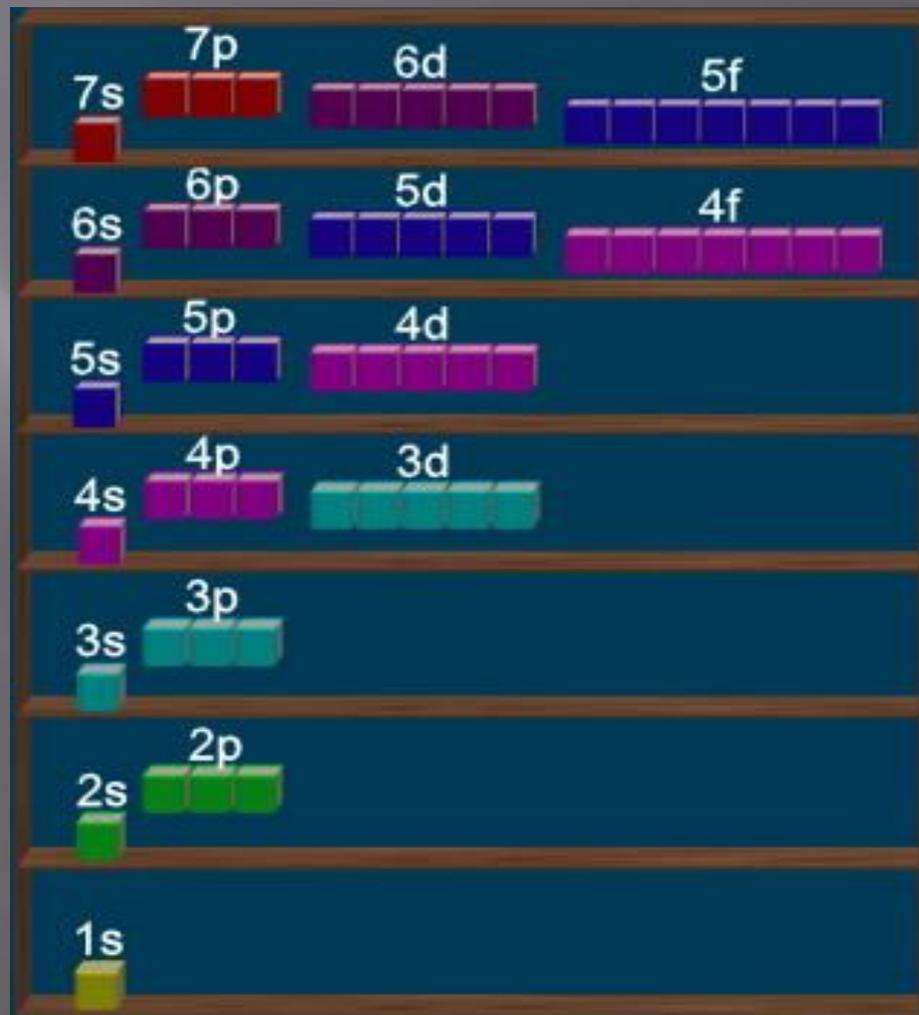


Принципы распределения электронов в многоэлектронном атоме.

1. Принцип наименьшей энергии.
2. Принцип Паули.
3. Правило Хунда.

Принцип наименьшей энергии

- В соответствии с принципом наименьшей энергии, наиболее устойчивым состоянием атома считается то, при котором суммарная энергия всех его электронов минимальна. Это значит, что при заполнении электронами орбиталей в многоэлектронном атоме в первую очередь заполняются все максимально возможные свободные орбитали с наименьшей энергией.



Российский ученый Всеволод Маврикеевич Клечковской высказал гипотезу, что энергия электронных орбиталей должна увеличиваться по мере увеличения суммы главного и орбитального квантовых чисел. При равенстве суммы $n+1$ в первую очередь заполняются орбитали с наименьшим значением главного квантового числа. В соответствии с правилом Клечковского распределение орбиталей по энергии выглядит

Ряд Клечковского

Состояние электрона

n1	1s	2s	2p	3s	3p	4s	3d	4p	5s	4d	5p	6s	4f	5d	6p	7s	5f	6d
n	1	2	2	3	3	4	3	4	5	4	5	6	4	5	6	7	5	6
1	0	0	1	0	1	0	2	1	0	2	1	0	3	2	1	0	3	2
n+1	1	2	3	3	4	4	5	5	5	6	6	6	7	7	7	7	8	8

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

Соотношение энергий орбиталей



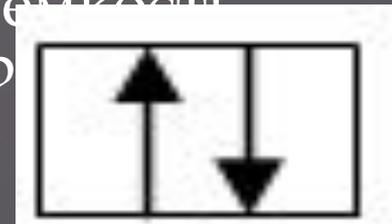
Увеличение энергии

Принцип Паули.

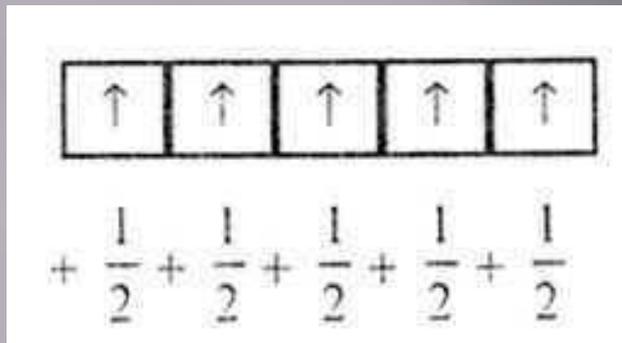
Максимальная емкость электронных уровней

N	$N_{орб} = n^2$	$N_e = 2n^2$
1	1	2
2	4	8
3	9	18
4	16	32
5	25	50

- Швейцарский ученый Вольфганг Паули сформулировал принцип заполнения электронных орбиталей. В атоме не может быть двух электронов с одинаковым значением всех четырех квантовых чисел. Это означает, что на каждой электронной орбитали может максимум находиться два электрона, имеющих различные значения спинового квантового числа (антипараллельные спины). Принцип Паули позволяет определить не только максимальную емкость электронной орбитали, но и емкость электронных уровней целом.



Правило Хунда



- Заполнение электронами орбиталей внутри подуровня происходит в соответствии с правилом, сформулированным немецким физиком Фридериком Хундом, чтобы алгебраическое значение суммарного спина было максимальным, т.е. внутри подуровней электроны заполняют все максимально возможные свободные орбитали.

Между положением элемента в периодической системе и строением его атома существует определенная взаимосвязь:

- . Порядковый номер элемента соответствует заряду атома и общему числу электронов.
- . Номер периода элемента соответствует числу электронных уровней атома.
- . У элементов главных подгрупп число электронов на внешнем электронном уровне равно номеру группы.

