

Mühazirə 3. ATOM ORBİTALLARININ ELEKTRON BULUDU ŞƏKLİNDƏ GÖSTƏRİLMƏSİ

Kvant mexanikasına görə sistemin halı koordinatlardan və zamandan asılı müəyyən funksiya ilə təsvir olunur. Bu funksiya sistemin hal funksiyası və ya dalğa funksiyası deyilir. Dalğa funksiyası kompleks funksiya da ola bilər. Onun özünün fiziki mənası yoxdur. Lakin dalğa funksiyasının modulunun kvadratı zərrəciyin müəyyən həcm elementində olması ehtimalını verir:

$$dW_{nlml} = |\psi_{nlml}(r\theta\varphi)|^2 dV \quad (1)$$

Bəzən dalğa funksiyasının elektron buludu şəklində göstərilməsindən də danışılır. Tutaq ki, elektronun nüvə ətrafında hərəkətini öyrənirik və elektronun fəzada vəziyyətini hər hansı bir üsulla qeyd etmək mümkün olub. Bu vəziyyəti nöqtə ilə işarə edək. Təcrübə zamanın sonrakı anlarında aparılsa nüvə ətrafında müəyyən nöqtələr yığılır. Bu nöqtələr çoxluğu buludu xatırladır. Elektron buludu anlayışı da bu mənada yaranıb. Aydındır ki, nöqtələrin sıx olduğu yerlərdə elektron tez-tez, seyrək olduğu yerlərdə gec olur. Elektron buludunun nüvədən olan məsafəyə görə, eləcə də sferik bucaqlara görə paylanmalarından danışmaq olar. Bu paylanmaları müəyyən edək. Atom orbitallarının

$$U_{nlml}(r\theta\varphi) = R_{nl}(r)S_{lm}(\theta\varphi) \quad (2)$$

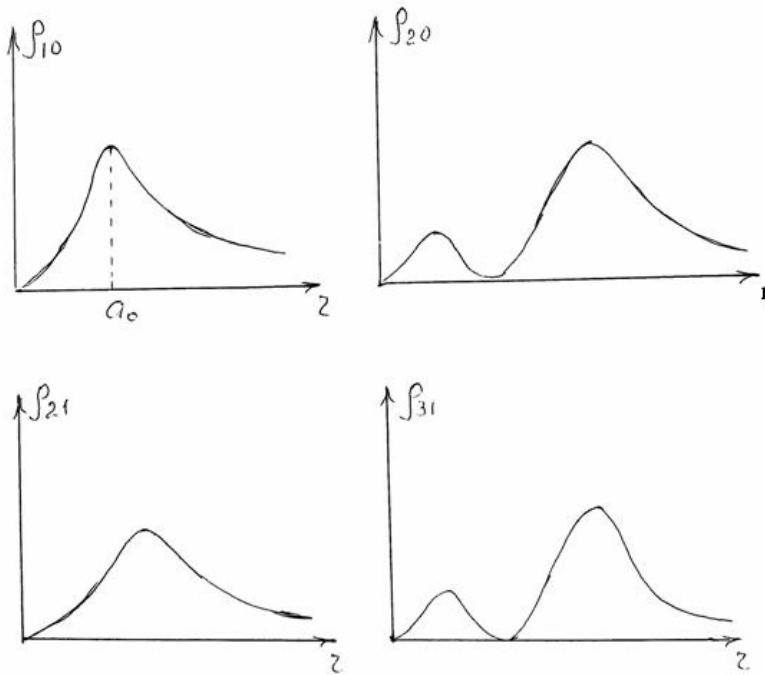
İfadəsini (1)-də nəzərə alaq. Alınmış ifadəni θ və φ sferik bucaqlarına görə inteqrallasaq elektron buludunun radial paylanmasını, yəni buludun nüvədən olan məsafəyə görə paylanmasını alarıq:

$$\begin{aligned} dW_{nl}(r) &= \int_0^{\pi} \int_0^{2\pi} R_{nl}^2(r) S_{lm}^2(\theta\varphi) r^2 dr \sin\theta d\theta d\varphi = \\ &= R_{nl}^2(r) r^2 dr \int_0^{\pi} \int_0^{2\pi} S_{lm}^2(\theta\varphi) S_{lm}^2(\theta\varphi) \sin\theta d\theta d\varphi = R_{nl}^2(r) r^2 dr \end{aligned} \quad (3)$$

(3) düsturundan istifadə etməklə elektron buludunun radial paylanma sıxlığını da tapa bilərik:

$$\rho_{ln}(r) = \frac{dW_{nl}(r)}{dr} = R_{nl}^2(r)r^2 \quad (4)$$

Göründüyü kimi elektron buludunun radial paylanma sıxlığı radial funksiyların kvadratı ilə mütənasıbdır. Radial paylanma sıxlıqlarının r -dən asılılıq qrafiklərinə radial paylanma əyriləri deyilir. Bu əyriləri qurmaq üçün radial funksiyların analitik ifadəsi məlum olmalıdır. Bildiyimiz kimi radial funksiylar üçün Şredinger tənliyi yalnız H atomu və hidrogenəbənzər ionlar üçün dəqiq həll olunur. Ona görə də radial paylanma əyriləri ancaq qeyd olunan atomlar üçün qurula bilər. Aşağıda hidrogen atomu üçün bəzi radial paylanma əyriləri verilmişdir.



Şəkil

İndi də elektron buludunun sferik bucaqlara görə paylanmasını müəyyən edək. Bu məqsədlə (1)-də r -ə görə inteqrallama apararaq:

$$dW_{nl}(\theta\varphi) = \int_0^\infty R_{nl}^2(r)r^2 dr \cdot S_{lm}^2(\theta\varphi)\sin\theta d\theta d\varphi = S_{lm}^2(\theta\varphi)d\Omega \quad (5)$$

$d\Omega = \sin\theta d\theta d\varphi$ - elementar cism bucağıdır.

(5)-dən istifadə etməklə elektron buludunun bucaqlara görə paylanma sıxlığı üçün aşağıdakı ifadəni alırıq:

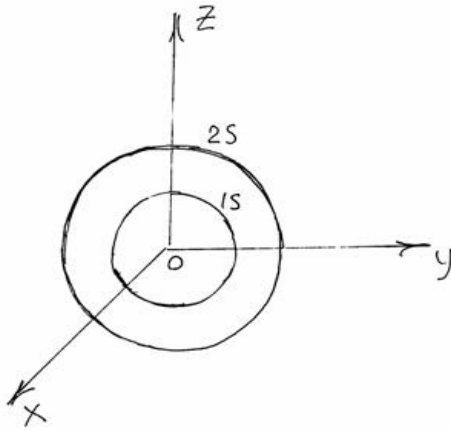
$$\rho_{lm}(\theta\varphi) = \frac{dW_{nm}(\theta\varphi)}{d\Omega} = S_{lm}^2(\theta\varphi) \quad (6)$$

Göründüyü kimi, elektron buludunun bucaqlara görə paylanma sıxlığı həqiqi sferik funksiyaların kvadratı ilə mütənasib olur. Bu paylanmanı qurmaq üçün polyar dioqramlar metodundan istifadə olunur. Metodun mahiyyəti aşağıdakı kimidir:

Nüvəni koordinat başlanğıcında yerləşdirirlər və nüvədən bütün istiqamətlərdə uzunluqları $S_{\ell m}^2$ ilə mütənasib olan düz xətt parçaları çəkirlər. Bu düz xətt parçalarının uc nöqtələrini birləşdirdikdə müəyyən bir səth forması alınır. Bu formaya da atom orbitallarına uyğun elektron buludu deyilir. İndi də bəzi xüsusi hallar üçün elektron buludunun formasını quraq:

1. ns orbitallar.

$$\ell = 0, m = 0: S_{00}^2(\theta\varphi) = \frac{1}{4\pi} = const$$



Şəkil

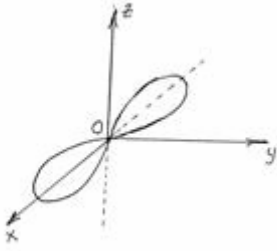
S_{00} kəmiyyəti sabit olduğundan nüvədən bütün istiqamətlərdə eyni uzunluqlu düz xətt parçaları çəkilir. Bu parçaların uc nöqtələri birləşdirilərsə sfera forması alınır. Deməli bütün s orbitallar sfera formasındadır. Baş kvant ədədinin qiyməti artdıqca sferanın ölçüsü də artır. Deməli, $2s$ orbitalına uyğun sferanın radiusu $1s$ orbitalına uyğun sferanın radiusundan böyük olmalıdır.

2. np_x orbitalları.

$$\ell = 1, m = 1: S_{11}^2(\theta\varphi) = \frac{3}{4\pi} \sin^2 \theta \cos^2 \varphi = \frac{3}{4\pi} \frac{x^2}{r^2}$$

Axırıncı ifadənin x və r -dən asılılıq qrafikini qurduqda məlum olur ki, atom orbitalı

x oxu boyunca yönəlmiş qantel formasındadır.



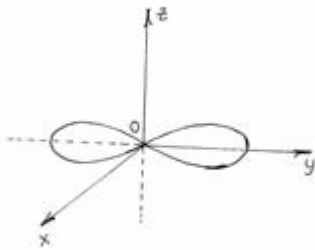
Şəkil

Baş kvant ədədinin qiyməti artdıqca orbitalın ölçüsü də artır. Yəni, $2p_x$ orbitalına uyğun qantelin ölçüsü $3p_x$ orbitalına uyğun qantelin ölçüsündən kiçik olur.

Şəkildən göründüyü kimi ZOY müstəvisində elektron buludu 0-a qədər azalır. Bu müstəviyə düyün müstəvisi deyilir. Düyün müstəvisini keçərkən atom orbitalı işarəsini dəyişir.

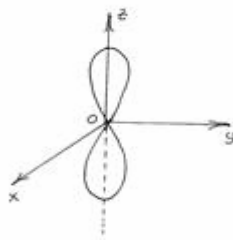
3. np_y orbitalı.

$$\ell = 1, m = -1: S_{1-1}^2 = \frac{3}{4\pi} \frac{y^2}{r^2}$$



Şəkil

Düyün müstəvisi ZOX müstəvisidir. Eyni qayda ilə np_z orbitallarına uyğun elektron buludunun z oxu boyunca yönəlmiş qantel formasında olduğu müəyyən edərik. Düyün müstəvisi isə XOY müstəvisi olacaqdır.



Şəkil

Polyar diaqramlar metodundan istifadə etməklə digər orbitallara uyğun elektron buludunu qurmaq olar. Məs: bəzi d orbitalları üçün elektron buludu 4 ləçəkli gül formasında olacaqdır.

ATOMDA ELEKTRONUN HALLARI.

ATOM ORBITALLARININ İŞARƏLƏNMƏSİ

Mərkəzi sahə yaxınlaşmasına əsasən atomda elektronun halı $n\ell m_\ell m_s$ kimi 4 kvant ədədi ilə təsvir edilir. Atom orbitallarını işarə etmək üçün də bu kvant ədədlərindən istifadə olunur. Atom orbitalları $(n\ell)_{m_\ell}$ kimi işarə olunur. Bu yazılışda baş kvant ədədi və maqnit kvant ədədi rəqəmlərlə yazılır, orbital kvant ədədi isə hərflərlə işarə olunur. ℓ -in aldığı qiymətlərə əsasən atom orbitalları aşağıdakı kimi hərflərlə işarə edilir:

$$\begin{array}{cccccc} \ell = & 0 & 1 & 2 & 3 & 4 \dots \\ & s & p & d & f & g \dots \end{array} \quad (1)$$

Beləliklə atom orbitalları $1s_0, 2s_0, 3s_0, \dots, 2p_1, 2p_{-1}, 2p_0, 3p_1, 3p_{-1}, 3p_0, 3d_2, 3d_1, 3d_0, 3d_{-1}, 3d_{-2}, 3d_2$ kimi yazıla bilər. Bütün s orbitallar üçün maqnit kvant ədədi sıfıra bərabər olduğundan bu orbitalları işarələyərkən aşağıdakı 0 indeksini yazmırlar. Yəni s orbitalları $1s, 2s, 3s \dots$ kimi işarə olunurlar. Atom orbitallarını işarələyərkən bəzən $2p_x, 2p_y, 2p_z, 3d_{x^2-y^2}, 3d_{z^2} \dots$ kimi işarələmələrdən istifadə olunur. Bu işarələmələrin necə yarandığını başa düşmək üçün atom orbitalının bucaqdan asılı hissəsini Dekart koordinatları ilə ifadə etmək lazımdır:

$$np_1; \ell = 1; m = 1$$

$$S_{11}(\theta\varphi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \sin \theta \cos \varphi = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \frac{r \cdot \sin \theta \cos \varphi}{r} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \frac{x}{r} \approx np_x$$

Beləliklə, orbital kvant ədədi və maqnit kvant ədədi bir olan bütün orbitallar np_x şəklində işarə olunur:

$$np_{-1}; \ell = 1; m = -1$$

$$S_{1-1}(\theta\varphi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \sin \theta \sin \varphi = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \frac{r \cdot \sin \theta \sin \varphi}{r} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \frac{y}{r} \approx np_y$$

$$np_0; \ell = 1; m = 0$$

$$S_{10}(\theta\varphi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \frac{r \cdot \cos \theta}{r} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \frac{z}{r} \approx np_z$$

$$nd_2; \ell = 2; m = 2$$

$$\begin{aligned} S_{22}(\theta\varphi) &= \sqrt{\frac{15}{16\pi}} \sin^2 \theta \cos 2\varphi = \sqrt{\frac{15}{16\pi}} \sin^2 \theta (\cos^2 \varphi - \sin^2 \varphi) = \\ &= \sqrt{\frac{15}{16\pi}} \sin^2 \theta \cos^2 \varphi - \sin^2 \theta \sin^2 \varphi = \sqrt{\frac{15}{16\pi}} \left[\frac{x^2 - y^2}{r^2} \right] \approx nd_{x^2 - y^2} \end{aligned}$$

Beləliklə, orbital kvant ədədi 2, maqnit kvant ədədi 2 olan orbitallar $nd_{x^2 - y^2}$

kimi işarə olunur. Eyni qaydadan istifadə etməklə digər atom orbitallarının da Dekart koordinatlar ilə işarələnməsini ala bilərik.

Atomun elektron təbəqələri.

Mərkəzi sahə yaxınlaşmasına əsasən atomda elektronun halı 4 kvant ədədi ilə təsvir olunur: $n\ell m_\ell m_s$. Bu kvant ədədlərinin hər biri müəyyən saxlanma qanunları ilə əlaqədar yaranır. n - enerjinin saxlanması ilə əlaqədar yaranır və aşağıdakı kimi tam qiymətlər alır: $n = 1, 2, 3, \dots, n$.

ℓ - mərkəzi sahədə hərəkət edən zərrəciyin impuls momentinin saxlanması ilə əlaqədar yaranır. Baş kvant ədədinin verilmiş qiymətində $\ell = 1, 2, 3, \dots, n - 1$ kimi tam qiymətlər alır.

m_ℓ - zərrəciyin impuls momentinin üstün istiqamət üzrə proyeksiyasının

saxlanması ilə əlaqədar yaranır və ℓ -in verilmiş qiymətində $m_\ell = -\ell, -\ell + 1, \dots, 0, 1, \dots, \ell$ qədər $2\ell + 1$ sayda qiymətlər alır.

m_s - elektronun məxsusi mexaniki momentinin, spininin saxlanması ilə əlaqədar yaranır və yalnız 2 qiymət alır:

$$m_s = +\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$$

Bu deyilənlərdən aydın olur ki, atomda $n\ell m_\ell$ kvant ədədlərinin verilmiş qiymətində bir-birindən m_s -lə fərqlənən 2 hal mövcud ola bilər. Bu faktı bəzən aşağıdakı kimi də ifadə edirlər:

Məlumdur ki, atomun n, ℓ və m_ℓ kvant ədədləri ilə verilən dalğa funksiyası onun atom orbitalı adlanır. Hər bir atom orbitalında spinləri ilə fərqlənən yalnız 2 elektron yerləşə bilər.

İndi də atomun n və ℓ -in verilmiş qiymətində neçə halı olduğunu araşdıraq.

n və ℓ verildikdə spin kvant ədədi ilə fərqlənən 2 hal, maqnit kvant ədədi ilə fərqlənən $2\ell + 1$ sayda hal mümkündür. Onda n və ℓ -in verilmiş qiymətinə cəmi $2 \cdot (2\ell + 1)$ sayda hal mövcud olur. Mərkəzi sahə yaxınlaşmasına əsasən atomdakı elektronun enerjisi n və ℓ kvant ədədlərindən asılı olub, m_ℓ və m_s ədədlərindən asılı deyildir. Onda aydın olur ki, elektronun n və ℓ -lə müəyyən olunan hər bir eyni enerjili hallarına bir-birindən m_ℓ və m_s kvant ədədləri ilə fərqlənən $2 \cdot (2\ell + 1)$ sayda dalğa funksiyası uyğun gələcəkdir. Başqa sözlə enerji səviyyələri cırlaşmış olur, cırlaşmanın tərtibi isə $2 \cdot (2\ell + 1)$ -ə bərabər olur. Atomun eyni enerjili hallarına onun ekvivalent halları deyilir. Ekvivalent halların çoxluğuna atomun elektron təbəqəsi deyilir. Atom orbitallarının işarələnmə qaydasına uyğun olaraq elektron təbəqələrini də aşağıdakı kimi işarə edə bilərik:

$$1s, 2s, 3s, \dots, 2p, 3p, \dots, 2d, 4f, \dots$$

Deyilənlərdən aydın olur ki, atomun hər bir elektron təbəqəsində maksimum $2 \cdot (2\ell + 1)$ sayda elektron yerləşə bilər. Məs: np təbəqələrində $\ell = 1$ olduğundan maksimum 6 elektron yerləşə bilər. Aşağıdakı cədvəldə müxtəlif təbəqələrdə yerləşə

biləcək elektronların maksimum sayı verilmişdir:

| Elektron təbəqəsi | ℓ | Təbəqədəki elektronların maksimum sayı $2 \cdot (2\ell + 1)$ |
|-------------------|--------|--|
| ns | 0 | 2 |
| np | 1 | 6 |
| nd | 2 | 10 |
| nf | 3 | 14 |
| ng | 4 | 18 |

Təbəqədəki elektronların sayı təbəqə işarəsinin yuxarisında sağda indeks kimi yazılır. Məs: $2s^1, 2p^5, 3d^7$. Aydınır ki, $2s^3, 2p^7, 3d^{12}$ işarələrinin mənası yoxdur. Əgər təbəqə elektronlar tərəfindən tamamilə tutulmuşsa o dolmuş təbəqə, qismən tutulmuşsa dolmamış və ya açıq təbəqə adlandırılır. Məs: $2p^6$ təbəqəsi dolmuş, $2p^5, 3p^3$ təbəqələri dolmamışdır.

İndi də baş kvant ədədinin verilmiş qiymətində mümkün olan halar çoxluğunu araşdıraraq.

n -nin verilmiş qiymətinə uyğun halların sayı aşağıdakı kimi hesablanı bilər:

$$\sum_{\ell=0}^{n-1} 2(2\ell + 1) = 2\{1 + 3 + 5 + \dots + \dots 2n - 1\} = 2n^2$$

Beləliklə, n -nin verilmiş qiymətində bir-birindən ℓ, m_ℓ, m_s kvant ədədləri fərqlənən $2n^2$ sayda hal mövcuddur. Bu hallar çoxluğuna atomun elektron layı deyilir. Baş kvant ədədinin aldığı qiymətlərə uyğun olaraq elektron layları aşağıdakı kimi işarə edilir:

$$n = 1, 2, 3, 4, 5, \dots$$

$$K L M N O, \dots$$

Hər bir elektron layında maksimum $2n^2$ sayda elektron yerləşə bilər. Aşağıdakı cədvəldə elektron laylarının hansı təbəqələrdən təşkil olunduğu və layda yerləşən elektronların maksimum sayı göstərilmişdir.

| Elektronların sayı | n | $\ell = 0, 1, 2, 3, 4$ $s \quad p \quad d \quad f \quad g$ | Laylardakı elektronların sayı |
|--------------------|-----|---|-------------------------------|
| K | 1 | 2 | 2 |
| L | 2 | 2+6 | 8 |
| M | 3 | 2+6+10 | 18 |
| N | 4 | 2+6+10+14 | 32 |
| O | 5 | 2+6+10+14+18 | 50 |

ATOMUN ELEKTRON KONFIGURASIYALARI

Atomda elektronlar yerləşən təbəqələr çoxluğu atomun elektron konfigurasiyasını təşkil edir. Hər bir atom üçün prinsipcə çoxlu sayda elektron konfigurasiyası qurmaq olar. Bu konfigurasiyalardan biri ən az enerjili olur və atomun əsas halının elektron konfigurasiyası adlanır. Digər konfigurasiyalar isə həyəcanlanmış halın elektron konfigurasiyaları adlanır. Elektron konfigurasiyasını qurarkən Pauli prinsipini və Hund tərəfindən müəyyən edilmiş qaydanı gözləmək lazımdır. Pauli prinsipinə əsasən hər bir atom orbitalında spinləri antiparalel olmaqla ən çox 2 elektron yerləşə bilər. Hund isə təcrübə faktları əsasında müəyyən edib ki, dolmaqda davam edən təbəqələrdə elektronlar eyni yerləşməlidir ki, atomun tam spini mümkün qədər maksimum olsun. Bu qaydalardan istifadə etməklə bəzi atomların elektron konfigurasiyasını quraq:

$$C: 1s^2 2s^2 2p_x^{\uparrow\downarrow} 2p_y 2p_z \quad S = 0$$

$$1s^2 2s^2 2p_x^{\uparrow} 2p_y^{\downarrow} 2p_z \quad S = 0$$

$$1s^2 2s^2 2p_x^{\uparrow} 2p_y^{\uparrow} 2p_z \quad S = 1$$

Hər 3 konfigurasiya Pauli prinsipinə görə mümkün konfigurasiyalardır. Hund qaydasına əsasən sonuncu konfigurasiyanın spini ən böyük olduğundan o əsas halın konfigurasiyasıdır:

$$N: 1s^2 2s^2 2p_x^{\uparrow\downarrow} 2p_y^{\uparrow} 2p_z \quad S = \frac{1}{2}$$

$$1s^2 2s^2 2p_x^{\uparrow} 2p_y^{\uparrow} 2p_z^{\downarrow} \quad S = \frac{1}{2}$$

$$1s^2 2s^2 2p_x^{\uparrow} 2p_y^{\uparrow} 2p_z^{\uparrow} \quad S = \frac{3}{2}$$

Hund qaydasına əsasən III konfigurasiya əsas halın elektron konfigurasiyasıdır.

$$O: 1s^2 2s^2 2p_x^{\uparrow\downarrow} 2p_y^{\uparrow} 2p_z^{\uparrow} \quad S = 1$$

Elektron konfigurasiyasını qurarkən qurma prinsipindən istifadə olunur. Bu prinsip aşağıdakı 3 müddədən ibarətdir:

1. Elektron təbəqələrinin elektron tərəfindən tutulması ən az enerjili təbəqədən başlayaraq enerjinin artması istiqamətində davam edir.
2. Pauli prinsipinə əsasən n, ℓ, m_ℓ kvant ədədləri ilə müəyyən olunan hər bir atom orbitalında ən çox 2 elektron yerləşə bilər.
3. Dolmaqda davam edən təbəqələrdə elektronlar elə yerləşir ki, atomun tam spini mümkün qədər maksimum olsun (Hund qaydası).