Mühazirə 6. ATOM ORBİTALLARININ ELEKTRON BULUDU ŞƏKLİNDƏ GÖSTƏRİLMƏSİ

Kvant mexanikasına görə sistemin halı koordinatlardan və zamandan asılı müəyyən funksiya ilə təsvir olunur. Bu funksiyaya 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:

$$dW_{n\ell m\ell} = \left|\psi_{n\ell m\ell}(r\theta\varphi)\right|^2 dV$$

(1)

Bəzən dalğa funksiyasının elektron buludu şəklində göstərilməsindən də danışırlar. 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 yığımı alınar. 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

$$U_{n\ell m\ell}(r\theta\varphi) = R_{n\ell}(r)S_{\ell m}(\theta\varphi)$$

(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:

$$dW_{n\ell}(r) = \int_o^{\pi}\int_o^{2\pi} R_{n\ell}^2(r)S_{\ell m}^2(\theta\varphi)r^2 dr \sin\theta\, d\theta\, d\varphi =$$

$$= R_{n\ell}^2(r)r^2 dr \int_o^{\pi}\int_o^{2\pi} S_{\ell m}^2(\theta\varphi)S_{\ell m}^2(\theta\varphi)\sin\theta\, d\theta\, d\varphi = R_{n\ell}^2(r)r^2 dr$$

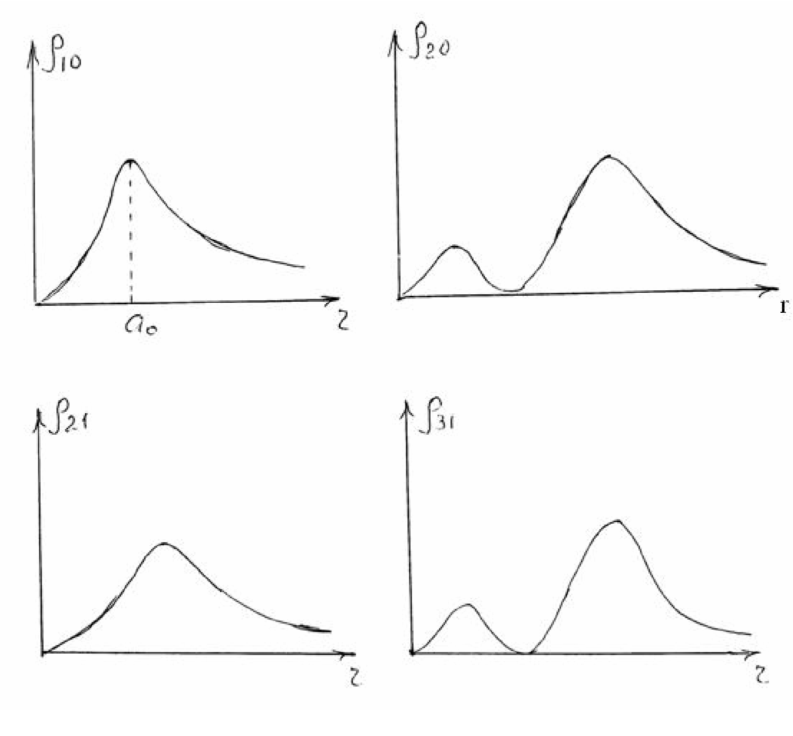
(3)

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

$$\rho_{\ell n}(r) = \frac{dW_{n\ell}(r)}{dr} = R_{n\ell}^2(r) r^2$$

(4)

Göründüyü kimi elektron buludunun radial paylanma sıxlığı radial funksiyaların kvadratı ilə mütənasibdir. Radial paylanma sıxlıqlarının r -dən asılılıq qrafiklərinə radial paylanma əyriləri deyilir. Bu əyriləri qurmaq üçün radial funksiyaların analitik ifadəsi məlum olmalıdır. Bildiyimiz kimi radial funksiyalar 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 aparaq:

$$dW_{n\ell}(\theta\varphi) = \int_{o}^{\infty} R_{n\ell}^2(r) r^2 dr \cdot S_{\ell m}^2(\theta\varphi) \sin\theta \, d\theta \, d\varphi = S_{\ell m}^2(\theta\varphi) d\Omega$$

(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 alarıq:

$$\rho_{\ell m}(\theta\varphi) = \frac{dW_{nm}(\theta\varphi)}{d\Omega} = S^2_{\ell m}(\theta\varphi)$$

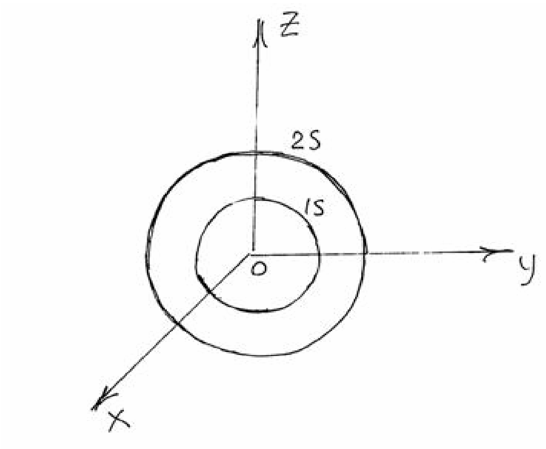
(6)

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 $S^2_{\ell m}$ 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.**

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



Şəkil

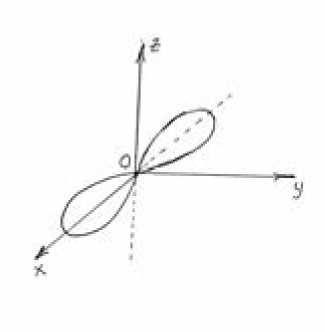
S_{00} kəmiyyəti sabit olduğundan nüvədən bütün istiqamətlərdə eyni uzunluqlu düz xətt parçaları çəkilir. Bu parçaların uc nöqtələri birləşdirilərsə sfera forması alınar. Deməli bütün s orbitallar sfera formasındadır. Baş kvant ədədinin qiyməti artdıqca sferanın ölçüsü də artır. Deməli, $2s$ orbitalına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

orbitalına uyğun sferanın radiusundan böyük olmalıdır.

2. np_x orbitalları.

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

Axırıncı ifadənin x və r-dən asılılıq qrafikini qurduqda məlum olur ki, atom orbitalı x oxu boyunca yönəlmiş qantel formasındadır.



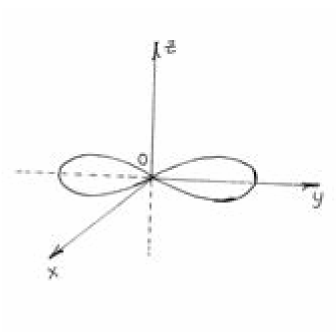
Şəkil

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

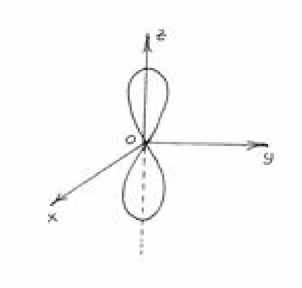
3. np_y orbitalı.

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



Şəkil

Düyün müstəvisi ZOX müstəvisidir. Eyni qayda ilə np_z orbitallarına uyğun elektron buludunun z oxu boyunca yönəlmiş qantel formasında olduğun 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.