

Mühazirə 8. 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: $2s^1, 2p^5, 3d^7$. Aydındır 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 araşdıraq.

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	$\ell = 0, 1, 2, 3, 4$	Laylardakı elektronların sayı
		$s \ p \ d \ f \ g$	
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 təcrübi faktlar əsasında müəyyən edib ki, dolmaqda davam edən təbəqələrdə elektronlar elə 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 müddəadan 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).

Determinant dalğa funksiyasının qurulmasına aid misallar. Atomun elektron konfigurasiyaları məlum olduqda onun determinant dalğa funksiyasını qurmaq mümkün olur. Əgər elektron konfigurasiyası yalnız dolmuş təbəqələrdən ibarətdirsə, onda bu konfigurasiyaya yalnız bir determinant dalğa funksiyası uyğun gəlir və konfigurasiya cırlaşmamış olur. Əgər elektron konfigurasiyasında dolmamış təbəqə varsa, onda atomun halı bir-birindən xətti asılı olmayan bir neçə determinant dalğa funksiyası ilə təsvir olunur. Aydındır ki, belə konfigurasiya cırlaşmışdır. Verilmiş konfigurasiyaya uyğun determinant dalğa funksiyalarının sayı aşağıdakı düsturla müəyyən olunur:

$$f = \frac{N!}{m!(N-m)!}$$

Burada N - dolmamış təbəqədə yerləşə biləcək elektronların maksimum sayı, m isə həmin təbəqədəki elektronların faktiki saydır:

$$0! = 1$$

$$Be: 1s^2 2s^2 \quad f = \frac{2!}{2!(2-2)!} = 1$$

$$C: 1s^2 2s^2 2p^2 \quad f = \frac{6!}{2!(6-2)!} = 15$$

Beləliklə, C atomunun əsas halının elektron konfigurasiyası 15 tərtibdən cırlaşmış olur:

$$N: 1s^2 2s^2 2p^3 \quad f = \frac{6!}{3!(6-3)!} = \frac{1 \cdot 2 \cdot 3 \cdot 4 \cdot 5 \cdot 6 \cdot 7}{1 \cdot 2 \cdot 3 \cdot 1 \cdot 2 \cdot 3 \cdot 4} = 20$$

Beləliklə, azot atomunun əsas halının elektron konfigurasiyası 20 tərtibdən cırlaşmış

olur. İndi də bəzi konfigurasiyalara uyğun determinant dalğa funksiyasını quraq:

$$B: 1s^2 2s^2 2p_x^\uparrow$$

$n_1 = \left(100 \frac{1}{2}\right)$	$U_{100 \frac{1}{2}}(x_1) U_{100 \frac{1}{2}}(x_2) U_{200 \frac{1}{2}}(x_1) U_{200 \frac{1}{2}}(x_1) U_{211 \frac{1}{2}}(x_1)$
$n_2 = \left(100 - \frac{1}{2}\right) U = \frac{1}{\sqrt{5!}}$	<hr style="border-top: 1px dashed black;"/>
$n_3 = \left(200 \frac{1}{2}\right)$	<hr style="border-top: 1px dashed black;"/>
$n_4 = \left(200 - \frac{1}{2}\right)$	<hr style="border-top: 1px dashed black;"/>
$n_5 = \left(211 \frac{1}{2}\right)$	<hr style="border-top: 1px dashed black;"/>

$$C: 1s^2 2s^2 2p_x^\uparrow 2p_y^\uparrow$$

$n_1 = \left(100 \frac{1}{2}\right)$	$U_{100 \frac{1}{2}}(x_1) U_{100 \frac{1}{2}}(x_2) U_{200 \frac{1}{2}}(x_1) U_{200 \frac{1}{2}}(x_1) U_{21 \frac{1}{2}}(x_1) U_{21 \frac{1}{2}}(x_1)$
$n_2 = \left(100 - \frac{1}{2}\right)$	<hr style="border-top: 1px dashed black;"/>
$n_3 = \left(200 \frac{1}{2}\right) U = \frac{1}{\sqrt{6!}}$	<hr style="border-top: 1px dashed black;"/>
$n_4 = \left(200 - \frac{1}{2}\right)$	<hr style="border-top: 1px dashed black;"/>
$n_5 = \left(21 \frac{1}{2}\right)$	<hr style="border-top: 1px dashed black;"/>
$n_6 = \left(211 - \frac{1}{2}\right)$	<hr style="border-top: 1px dashed black;"/>