

Лекция №2
Квантовые числа.

Волновая функция ψ зависит от трех переменных величин.

$$\psi_{xyz} = (n, \ell, m_\ell)$$

n, ℓ, m_ℓ называются квантовыми числами, которые описывают атомную орбиталь (АО), m, ℓ . Определяют совокупность положений электрона в атоме. Каждому набору квантовых чисел соответствует определенное значение волновой функции и энергии электрона.

Всего квантовых чисел 4:

n – главное, ℓ - орбитальное, m_ℓ - магнитное, m_s - спиновое.

2.1 Главное квантовое число n .

Главное квантовое число n определяет основной запас энергии электрона E_n , иными словами, степень его удаления от ядра или размер электронного облака r_n . Состояние электрона, характеризующееся определенным значением n , называется энергетическим уровнем электрона в атоме.

n принимает значения: 1, 2, 3, 4, 5 ... ∞
буквенно: K, L, M, N, O, ...

n обозначает N энергетического уровня.

$$\begin{aligned} \text{Для } n = 1: \quad E_1 &= -13,6 \text{ эВ;} \\ r_1 &= 0,53 \text{ \AA}^0; \\ V_1 &= 2,2 * 10^6 \text{ \AA} / \tilde{n}. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{Для любого } n: \quad E_n &= -13,6 \frac{1}{n^2} \text{ эВ,} \\ r_n &= 0,53 n^2 \text{ \AA}^0, \\ V_n &= 2,2 * 10^6 \frac{1}{n} \text{ \AA} / \tilde{n}. \end{aligned}$$

Квантовое состояние атома с наименьшим значением энергии E_1 , называется нормальным или основным. Остальные квантовые состояния с более высокими уровнями энергии $E_2, E_3, E_4 \dots$ называются возбужденными.

Экспериментально квантование энергии атомов, т.е. факт, что энергия поглощается и испускается определенными порциями или квантами обнаруживается в их спектрах поглощения и испускания, которые имеют линейчатый характер.

2.2 Орбитальное (побочное или азимутальное) квантовое число ℓ определяет орбитальный момент количества движения электрона

$M = \frac{h}{2\pi} \sqrt{\ell(\ell+1)}$ и характеризует форму электронного облака. Оно принимает все целочисленные значения от 0 до (n-1).

Каждому n соответствует определенное число значений ℓ , т.е. энергетический уровень расщепляется на подуровни. Число подуровней равно номеру уровня, т.е. численному значению n. Эти подуровни имеют следующие буквенные обозначения:

Орбитальное квантовое число ℓ : 0 1 2 3 ...
 Подуровень s p d ...
 $E_{\bar{a}} \uparrow$ s p d ...

Для каждого значения n орбитальное квантовое ℓ принимает значение, заключенные между собой 0 и (n-1).

n	ℓ	число подуровней	обозначения подуровня
1	0	1	1s
2	0,1	2	2s,2p
3	0,1,2	3	3s,3p,3d
4	0,1,2,3	4	4s, 4p,4d,4

Таким образом, энергетический подуровень – это состояние определенным набором квантовых чисел n и ℓ

Формы орбиталей (электронных облаков), соответствующие различным значениям ℓ :

s – орбиталь – шар, $\ell=0$
 p – орбиталь – гантель, $\ell=1$
 d – орбиталь – лепесток, $\ell=2$.

орбиталь имеет более сложную форму.

2.3 Магнитное квантовое число m_{ℓ} :

Определяет значение проекции орбитального момента количества движения электрона M на произвольно выделенную z:

$M_z = \frac{h}{2\pi} m_{\ell}$, т.е. характеризует пространственную ориентацию

электронного облака. Оно принимает все целочисленные значения от - ℓ до + ℓ , включая 0, т.е. всего $(2\ell+1)$ значений.

Таким образом, энергетические подуровни в магнитном поле расщепляются на атомные орбитали.

подуровень	ℓ	$m_\ell = -\ell, 0, +\ell$	Число АО в подуровне
s	0	0	1 -
p	1	-1, 0, +1	3 - - -
d	2	-2, -1, 0, +1, +2	5 - - - - -
	3	-3, -2, -1, 0, +1, +2, +3	7 - - - - - - -

- обозначение АО – атомных орбиталей.

Все орбитали, соответствующие какому-либо состоянию, имеют одинаковую энергию и называются вырожденными.

По характеру ориентации в пространстве p – орбитали обозначаются p_x, p_y, p_z .

$2p_x, 2p_y, 2p_z$ - электроны, у которых $n=2, \ell=1$, а m_ℓ соответственно 0, +1, -1.

Общее число АО в энергетическом уровне равно n^2 , а в подуровне $(2\ell+1)$.

Число АО в уровне и подуровне.

n – N эн. уровень	ℓ	подуровень	m_ℓ	Число АО	
				обозначения	
1	0	s	0	- 1s	1
2	0	s	0	- 2s	1 } 3 } 4
	1	p	-1, 0, +1	- - - 2p	
3	0	s	0	- 3s	1 } 3 } 5 } 9
	1	p	-1, 0, +1	- - - 3p	
	2		-2, -1, 0, +1, +2	- - - - - 3d	
4	0	s	0	- 4s	1 } 3 } 5 } 7 } 16
	1	p	0, ± 1	- - - 4p	
	2	d	0, $\pm 1, \pm 2$	- - - - - 4d	
	3	f	0, $\pm 1, \pm 2, \pm 3$	- - - - - - - 4f	

Спин и спиновое квантовое число m_s .

Спины электрона – это собственный механический момент количества движения электрона, связанный с его вращением вокруг собственной оси.

Величину и ориентацию спина характеризует спиновое квантовое число m_s , которое может принимать 2 значения $+1/2$ и $-1/2$. Поскольку спин – величина векторная, то стрелками \uparrow или \downarrow обозначают электроны.

На АО:

$\uparrow \uparrow$ - параллельные или непарные

$\uparrow\downarrow$ - антипараллельные или спаренные

Схема строения электронной оболочки атома по 4-м квантовым числам.

