

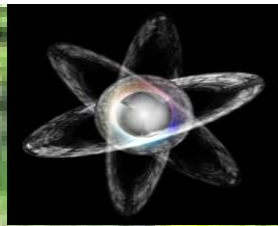
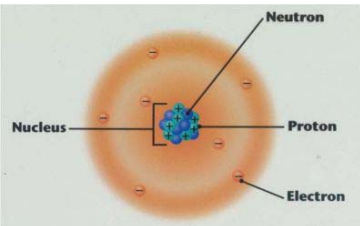


ЛЕСОТЕХНИЧЕСКИ УНИВЕРСИТЕТ

## ***2. СТРОЕЖ НА ЕЛЕКТРОННАТА ОБВИВКА.***

***Квантова теория на Бор. Вълнова  
функция. Квантови числа. Атомни  
орбитали***

***Проф. Надка Игнатова  
nadia\_ignatova@abv.bg***



# Енергия

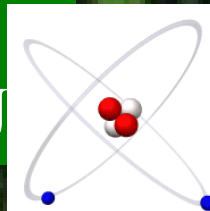


Моделът на Ръдърфорд за строежа на атома влиза в противоречие с класическата физика. Би трябвало да се излъчва енергия при движението на електрона и в даден момент той да падне върху ядрото.

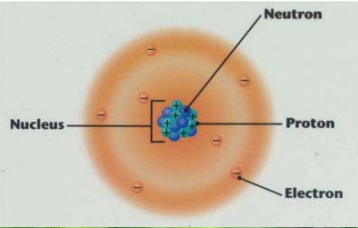
През 1900 г. Планк установил, че при излъчване или поглъщане на светлина, енергията се предава на определени порции (кванти, фотони) и че енергията на всеки квант е пропорционална на честотата на лъчението

$$E = h \gamma,$$

Където  $h$  е Планковата константа =  $6.626 \cdot 10^{-34}$  J



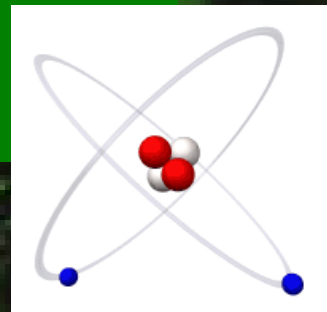
# Теория на Айнщайн



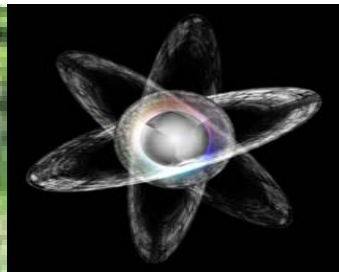
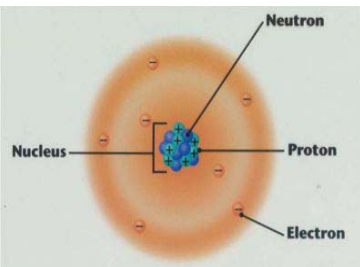
През 1905 г. Айнщайн възприема тази теория, допълвайки я с това, че електромагнитните лъчения са поток от частици, фотони, с енергия  $E = h \gamma$ , които се разпространяват в пространството със скоростта на светлината.

От това следва, че светлината има двойствена природа- частица с маса и импулс, от една страна, и вълна с честота и амплитуда, от друга.

$$E = m C^2 = h \gamma \rightarrow \gamma = m C^2 / h$$

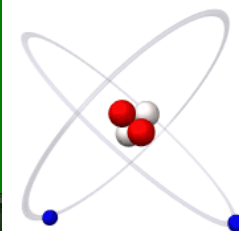


## Постулати на Бор

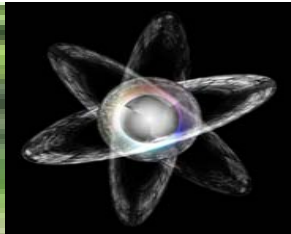
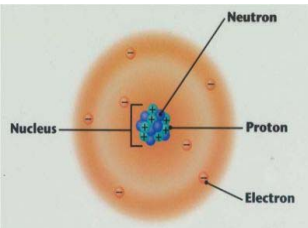


Въз основа на теориите на Ръдърфорд, Планк и Айнщайн, Бор създава квантовата теория за строежа на атома чрез следните постулати:

1. Електроните се движат около ядрото по точно определени, стационарни орбити, без да излъчват енергия, с което се обяснява стабилността на частиците;
2. Енергия се излъчва само при преход на електрона от енергетично по-богата на енергетично по-бедна електронна орбита



# Електронна орбита



Параметрите на орбитите, по които се движат електроните се описват от уравнението:

$$2 \pi r m u = n h,$$

където  $m$  е масата на електрона;

$u$  - скоростта на движение на електрона;

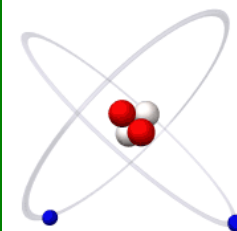
$r$  - радиуса на електронната орбита;

$n$  - цяло число 1, 2, 3 ...

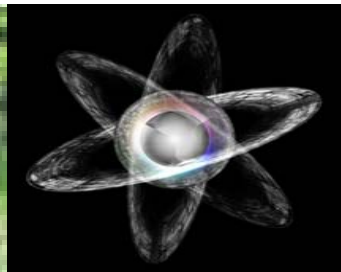
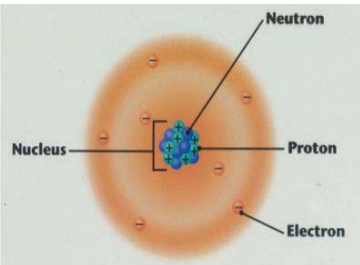
$$R_1 : R_2 : R_3 = 1^2 : 2^2 : 3^2$$

Енергията на електрона в атома има отрицателен знак и определени, дискретни стойности, пропорционални на  $n^2$ .

$n$  е главно квантово число



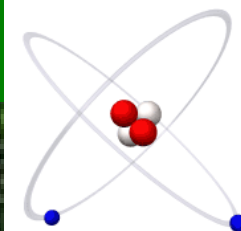
## Електронни преход

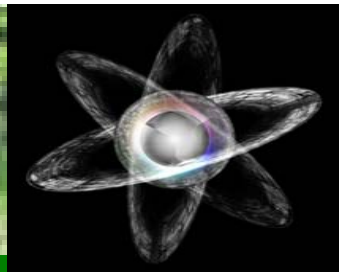
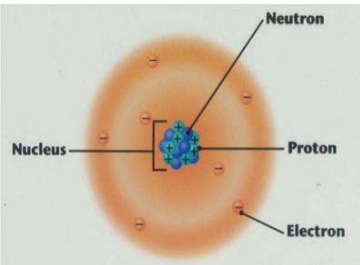


Получаването на различни линии в емисионните спектри на атомите е резултат от прехода на електрони от енергетично по-богата стационарна орбита на друга, с по-ниска енергия.

При  $n = 1$  атомът има най-ниско енергетично стабилно състояние.

С нарастването на  $n$ , енергетичните нива се сгъстяват и при  $n \rightarrow \infty$  енергията клони към 0





## Де Бройл

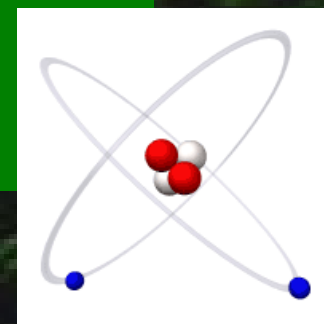


Де Бройл развива идеята за двойствения характер на светлината и я прилага за всички материални обекти, отнасящи се както като частици, така и като вълни.

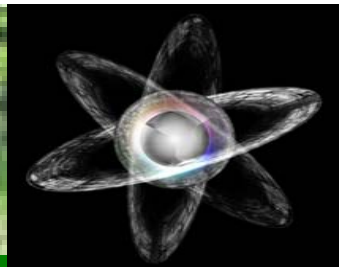
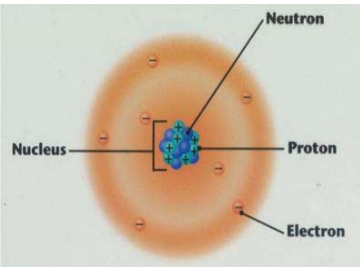
Обединявайки двете уравнения

$$m c^2 = h \gamma \text{ и } \gamma \lambda = c \rightarrow \gamma = c / \lambda$$
$$\gamma = m c^2 / h = c / \lambda \rightarrow \lambda = h / m c^2$$
$$\rightarrow \lambda = h / m u,$$

Където  $c$  е скоростта на светлината;  
 $u$  - скоростта на материална частица





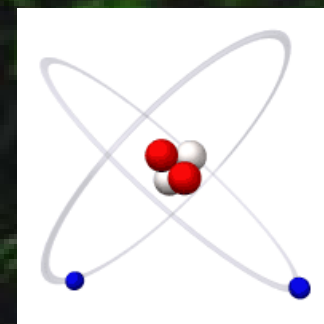
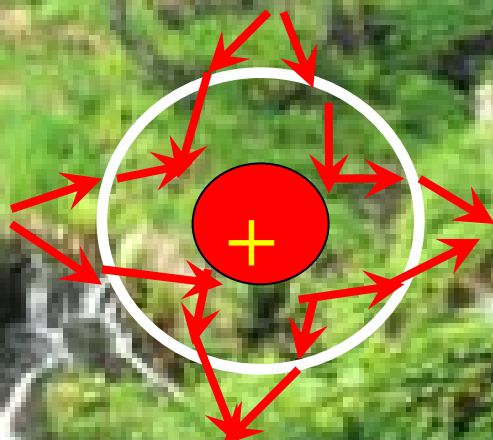


## Бор

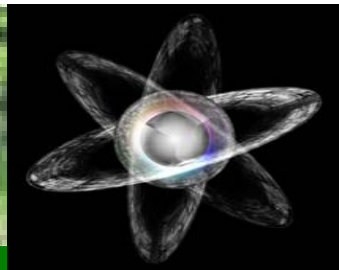
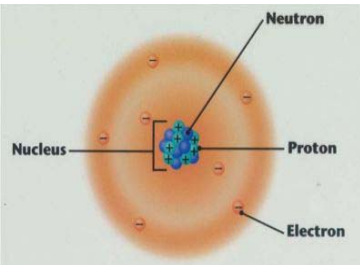


$$\text{Но } 2\pi r m u = n h, \rightarrow 2\pi r = n h / m u = n \lambda$$

Следователно, ако  $2\pi r$  е дължината на стационарната орбита, съгласно Бор, то електронът се проявява като стояща вълна, чиято дължина се нанася цяло число броя пъти, а това доказва първия постулат на Бор







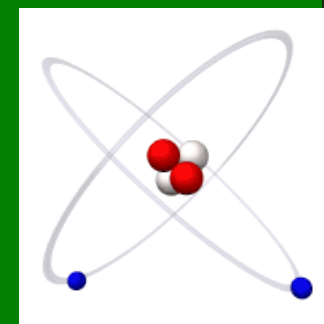
## Хайзенберг

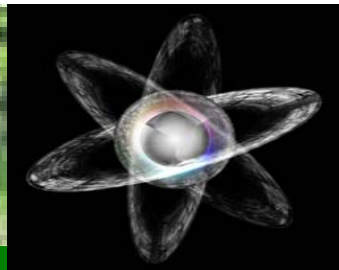
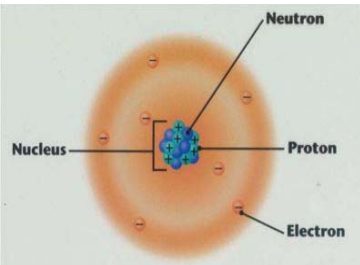


Двойственият характер на електрона води до известна неточност при определяне на координатите му в пространството и импулса на вълновото му движение.

**Хайзенберг** е установил в 1927 г., че колкото по-точно са определени координатите за местоположение  $\Delta x$ , толкова по-неточно се определя импулса  $\Delta P$  и обратно:

$$\Delta x \cdot \Delta P \geq h / 2\pi$$



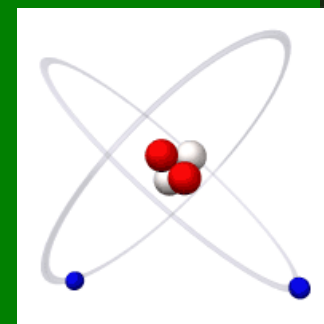
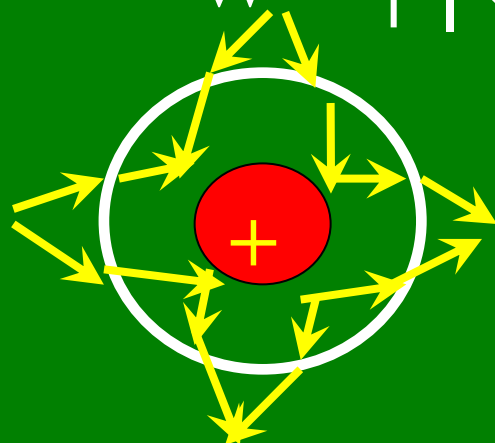


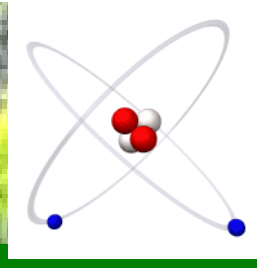
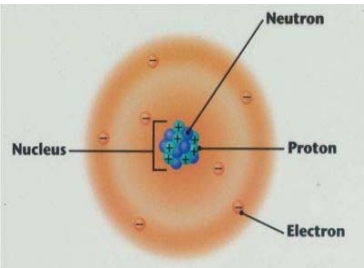
## Шрьодингер



Шрьодингер предлага атомната структура да се представя чрез вълнова функция, като диференциално уравнение, в което независимите променливи са пространствените координати и времето. Квадратът на вълновата функция на електрона ( $\psi$ ) е пропорционален на вероятността ( $W$ ) за намиране на електрона в даден елементарен обем ( $dV$ ) от пространството около ядрото:

$$W = \int |\psi|^2 dV$$





## Шрьодингер



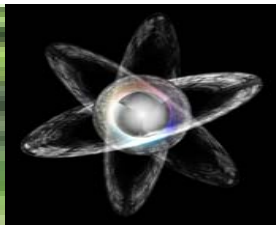
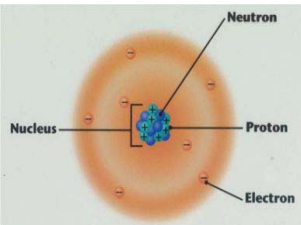
При решаване на това уравнение  $\psi$  може да е по-голямо или по-малко от нула число, но неговият квадрат  $|\psi|^2$  е винаги положително число.

Когато  $\psi = 0$ , вероятността електронът да се намира в обема около ядрото е нулева.

Тъй като не може да се говори за точно място на електрона около ядрото, понятието “електронна орбита”, по която електронът се движи по конкретна траектория губи смисъл, се въвежда ново понятие “атомна орбитала “ АО, която е решение на уравнението на Шрьодингер чрез определена вълнова функция  $\psi_1$ ,  $\psi_2$ ,  $\psi_3$  и т.н.

Броят на атомните орбитали не се отъждествява с броя на електроните.

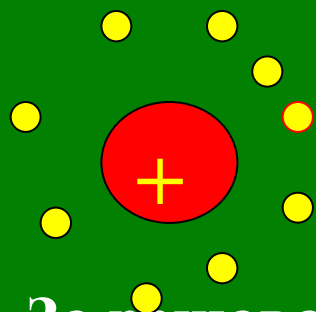
Атомните орбитали са допустими решения на уравнението на Шрьодингер и възможни състояния на електрона.



# Шрьодингер



Става дума за електронен облак около ядрото



## Водород

За решаване на уравнението на вълновата функция се въвеждат следните параметри:

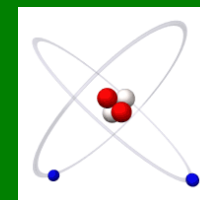
1. Аналог на главното квантово число  $n$  със стойности цели числа 1, 2, 3...безкрайност;
2. Орбитално квантово число  $l$  (азимутно) със стойности от 0 до  $n - 1$

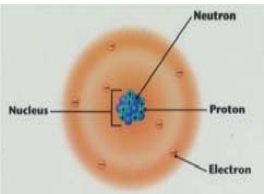
$l = 0$  s (sharp)

$l = 1$  p (principal)

$l = 2$  d (diffuse)

$l = 3$  f (fondamental) Следващите букви са в алфавитен ред

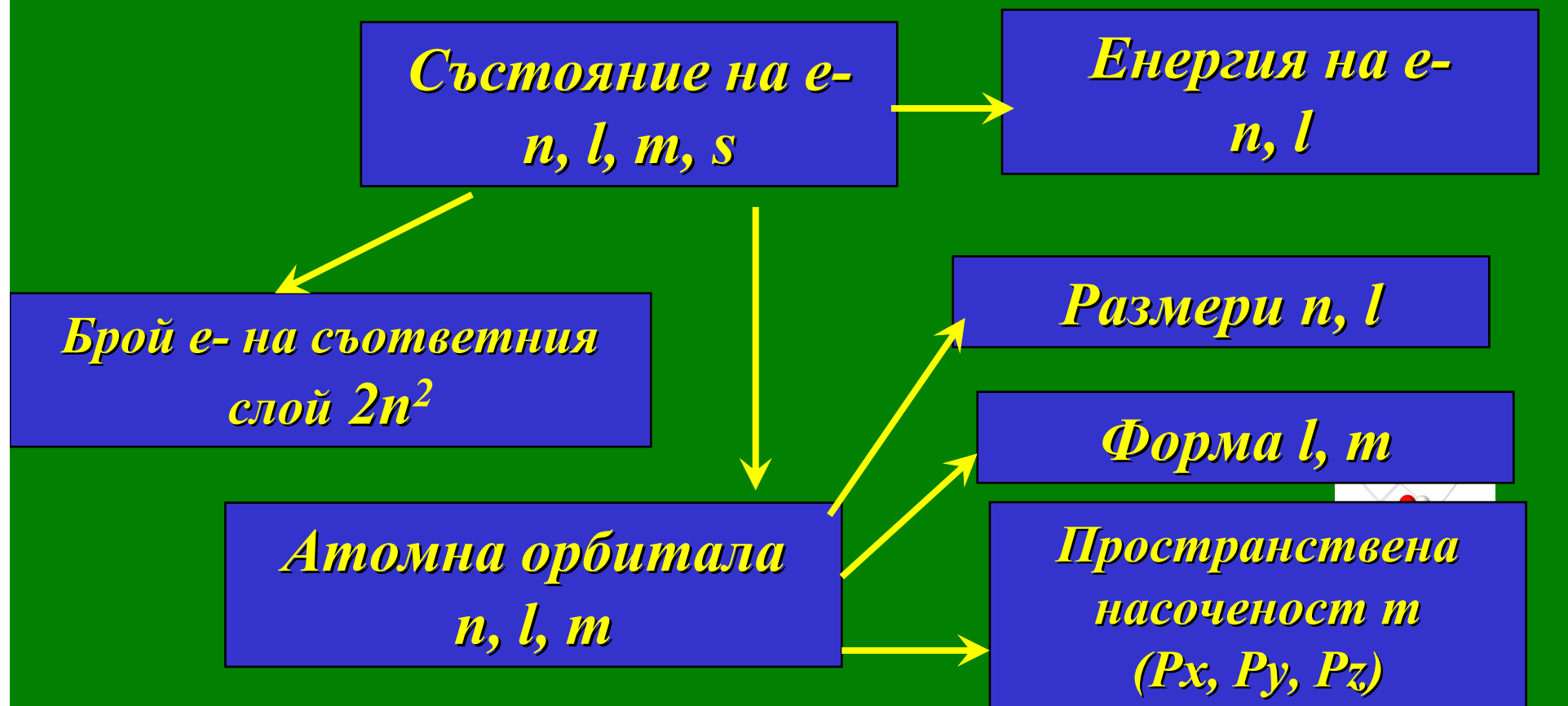


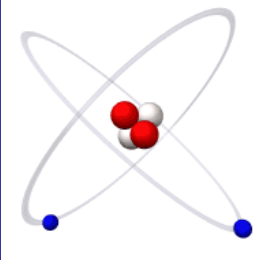


# Шрьодингер



- 3. Магнитно квантово число  $m$ , със стойности  $\pm l$ ;
- 4. Спиново квантово число  $s$ , със стойности  $\pm \frac{1}{2}$ , описващо движението на електрона около орбиталната му ос





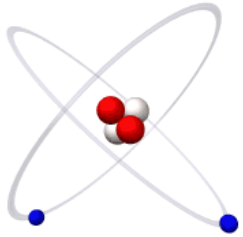
## Примери за електронната конфигурация

Например водорода - H, който се състои от един електрон и ядро има електронна конфигурация  $1s^2S_{1/2}$ . Където  $1=n$ , се нарича главно квантово число. С  $s$  и  $S$  се бележи орбитално квантово число равно на 0. Означението  $2S_{1/2}$  се нарича още спектрален терм. Тук числото 2 се нарича мултиплетност (равна на два пъти спиново квантово число (пълно за атома) плюс единица) а  $1/2$  е пълният орбитален момент на водородния атом.

За хелий - He електронната конфигурация е  $1s^2 1S^0$ . Където степента на  $s$  - 2 е броят на електроните в  $s$  в подобвивката.

За литий - Li -  $1s^2 2s^2S_{1/2}$

За берилий - Be -  $1s^2 2s^2 1S^0$



## Примери за електронната конфигурация

$$n = 1$$

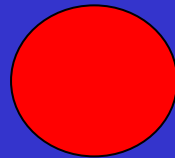
$$l = 0$$

$$m = 0$$

$$S = \pm 1/2$$

*Има 1 АО с 2 електрона*

*Сфера*



*S*



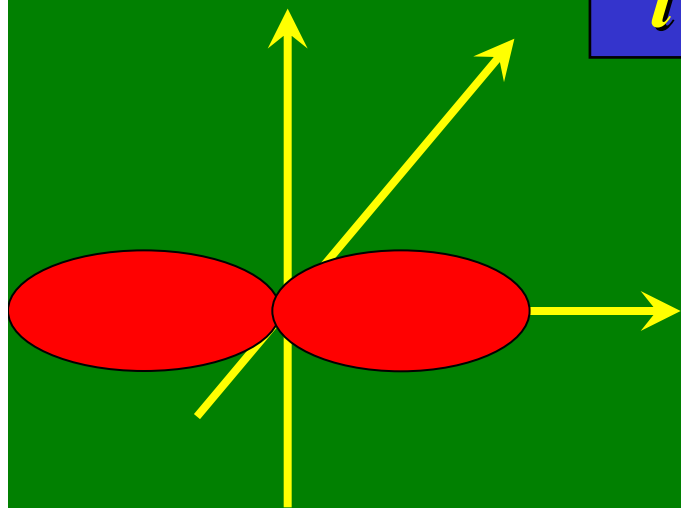
$n = 2$

$l = 0$

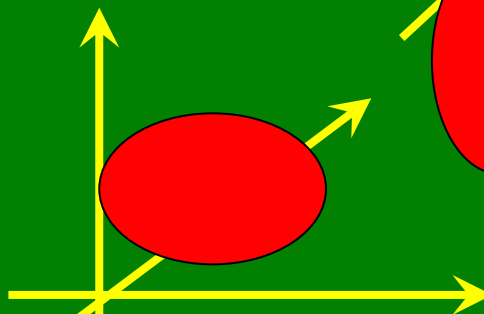
$m = 0$

$l = 1$

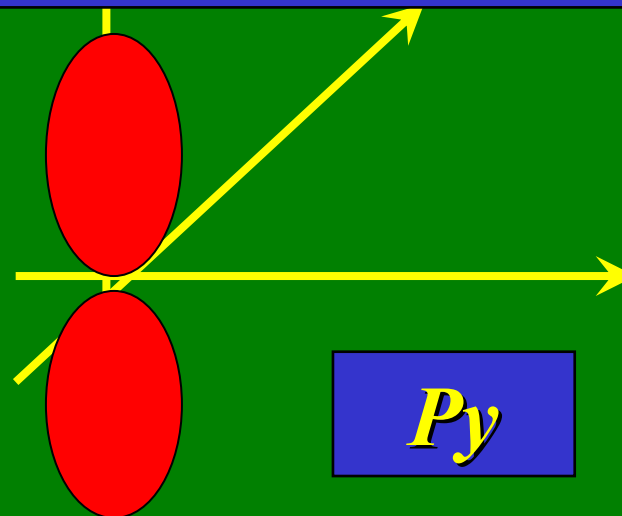
Три р АО елипси



$P_x$

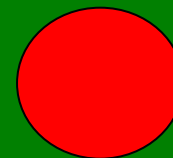


$P_z$



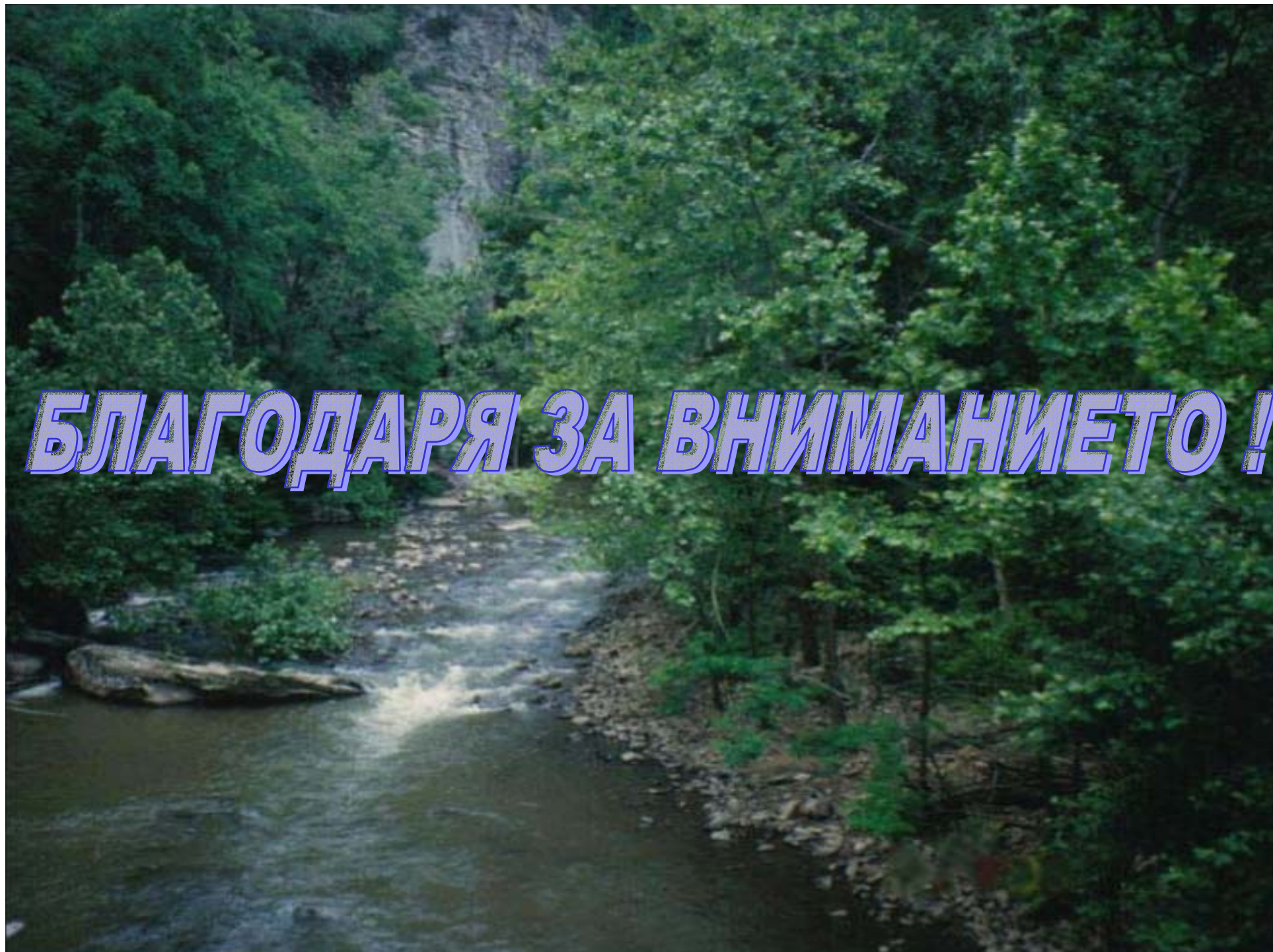
$P_y$

$l = 0$  сфера



1 S АО

$m = -1, 0, +1$  има общо 4 решения на уравнението на Шрьодингер- 1 S с 2 e- и 3 P с 6 e- (общо 8 e-)



***БЛАГОДАРЯ ЗА ВНИМАНИЕТО !***