

Полный механический момент
многоэлектронного атома. Правила Хунда.
Принцип Паули. Таблица Менделеева.

Момент импульса в квантовой механике

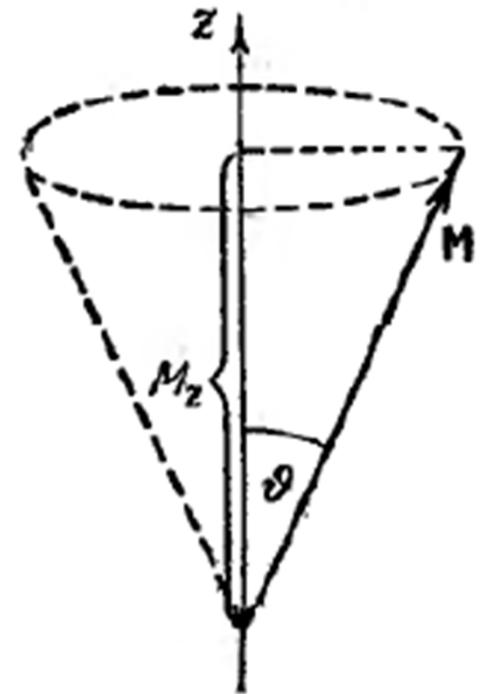
- Полный момент импульса:

$$M = \hbar \sqrt{l(l+1)}.$$

- Проекция момента на ось z:

$$M_z = m\hbar.$$

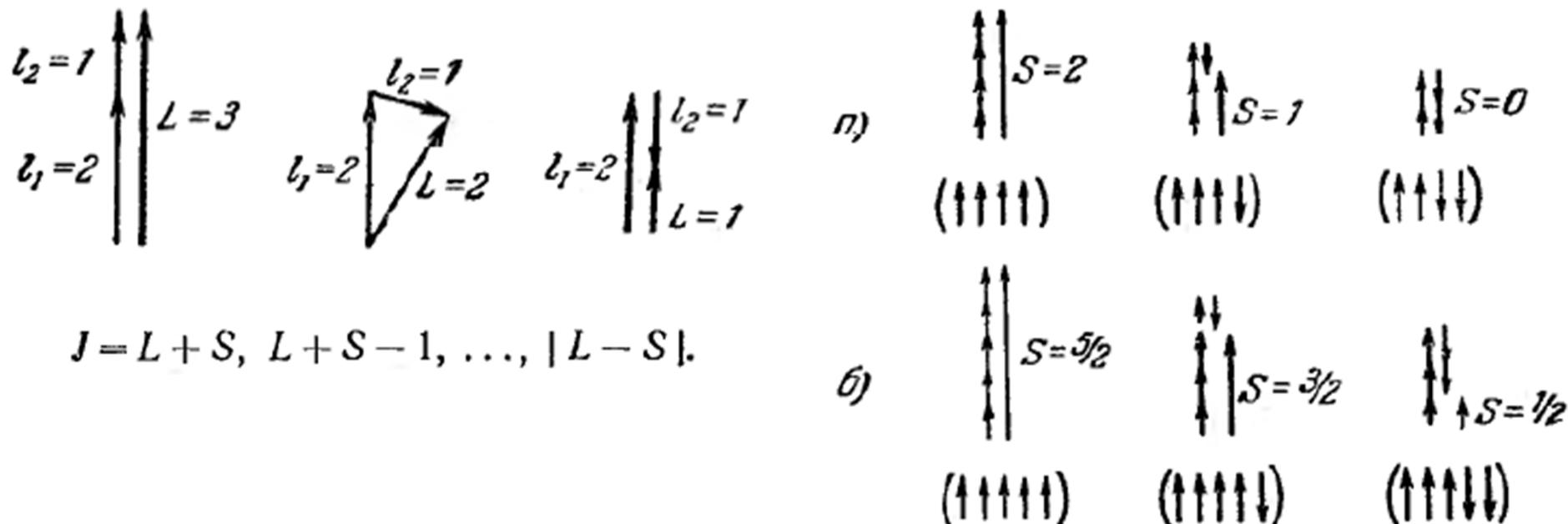
- Проекции момента на оси x и y не определены.



Результирующий момент атома

- Каждый электрон в атоме имеет орбитальный момент импульса M_l и собственный момент импульса M_s . Все моменты M_l и M_s складываются в результирующий момент атома M_J .
- Механические моменты электронов связаны с их магнитными моментами, и поэтому взаимодействуют.
- Варианты взаимодействия M_l и M_s :
 - Орбитальные моменты M_l взаимодействуют между собой сильнее, чем с собственными моментами M_s . Собственные моменты также взаимодействуют между собой сильнее, чем с орбитальными. Поэтому M_l складывают между собой в результирующий M_L , а M_s – в результирующий M_S , и уже они вместе в сумме дают результирующий момент атома M_J . – **Связь Рассель-Саундерса**
 - Каждая пара M_l и M_s взаимодействует между собой сильнее, чем с другими парами. В результате образуются M_j для каждого электрона, которые складываются в результирующий момент атома M_J . Такой вид связи называется **(j,j) -связью**.

Полный момент на примере связи Рассель-Саундерса



$$J = L + S, L + S - 1, \dots, |L - S|.$$

• Если S – чётное, то и J будет чётный. Если нечётное, то и J будет нечётный.

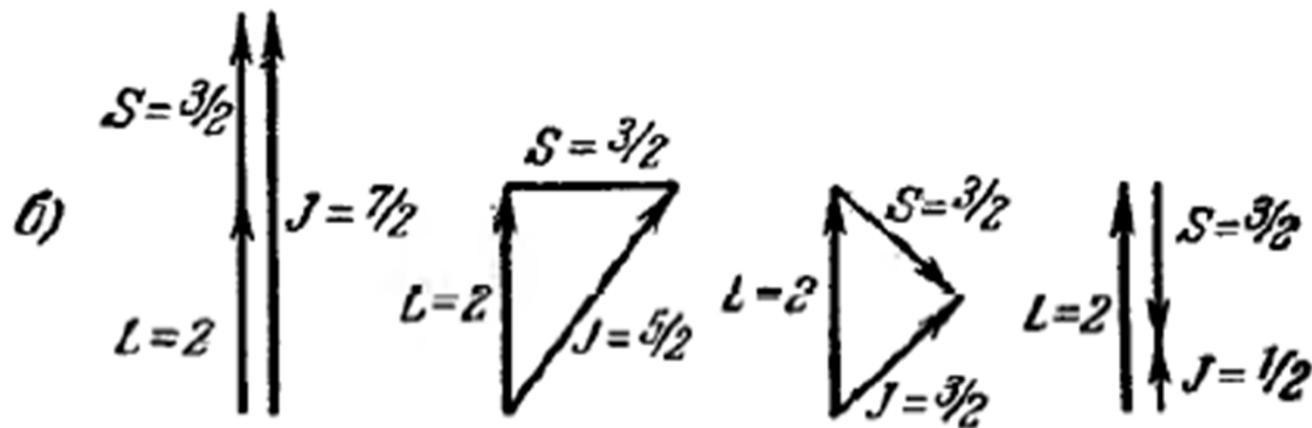
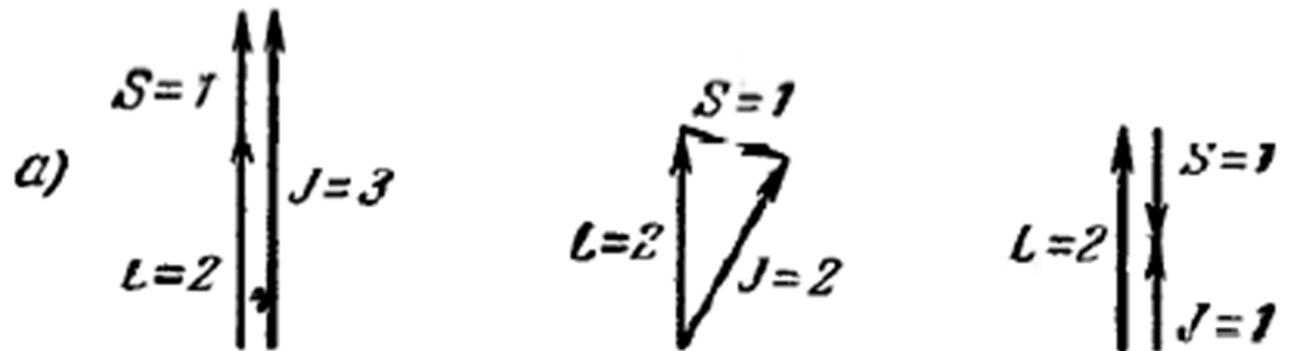
• Запись терма атома:

$$2S+1 L_J,$$

где под L подразумевается одна из букв S, P, D, F

• Число $2S+1$ даёт мультиплетность терма, то есть число подуровней. Но это верно только для $S < L$, когда $S > L$, число подуровней равно $2L+1$.

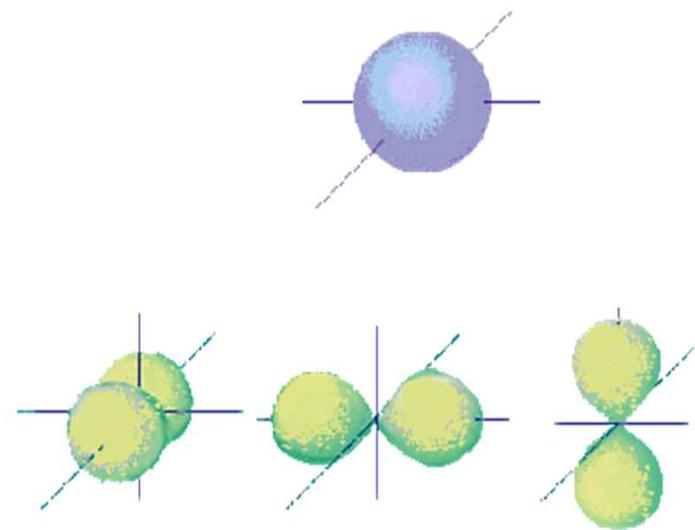
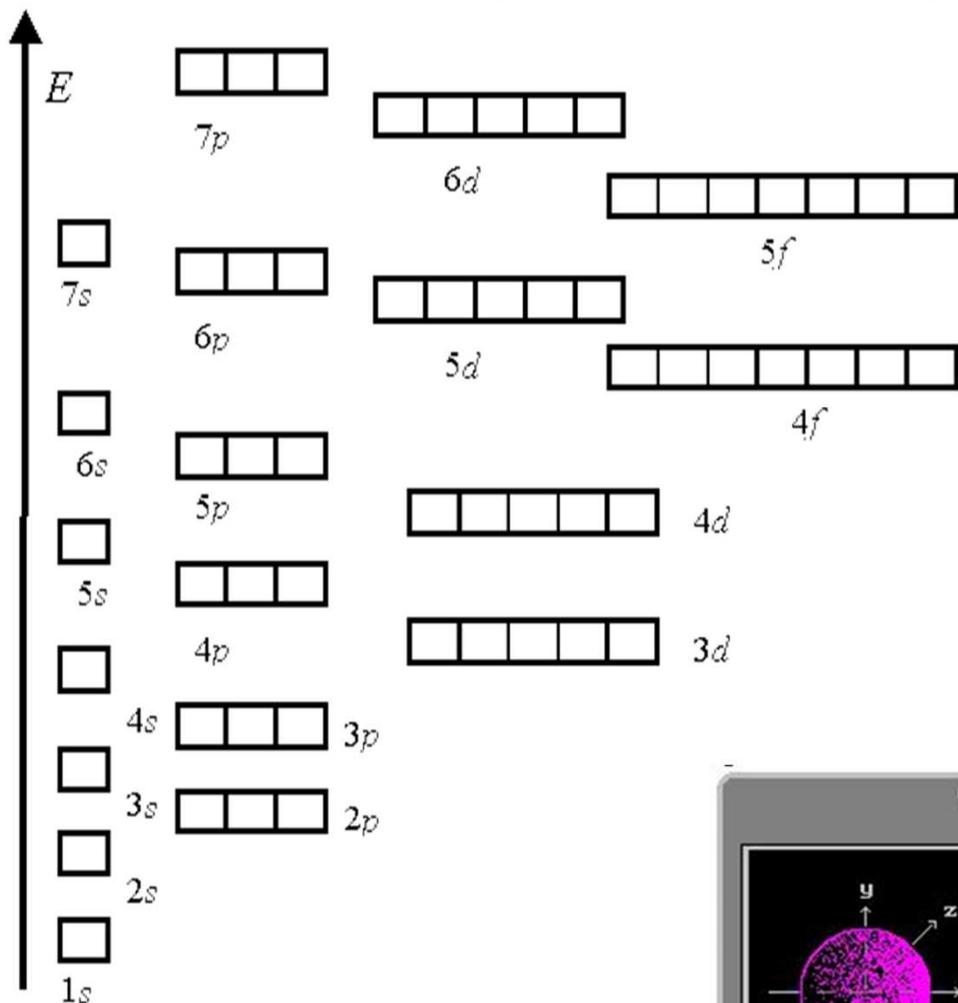
Полный момент на примере связи Рассель-Саундерса



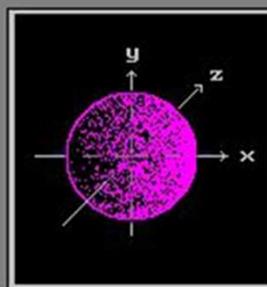
«Заселение» атомных орбиталей

- Заселение атомных орбиталей электронами определяется **правилом минимума энергии, принципом Паули и правилом Хунда**.
- Электроны заселяют атомные орбитали, начиная с подуровня с меньшей энергией. В этом состоит **правило минимума энергии**. Последовательность в нарастании энергии подуровней акова: $1s < 2s < 2p < 3s < 3p < 4s \leq 3d < 4p < 5s$ и так далее ...
 - Согласно расчетам, электрон движется не по какой-то определенной траектории, а может находиться в любой части околоядерного пространства - т.е. можно говорить лишь о вероятности (возможности) его нахождения на определенном расстоянии от ядра.
 - Электроны в атоме занимают самые энергетически выгодные атомные орбитали (*орбитали с минимальной энергией*), образуя электронные облака определенной формы.
- В каждой атомной орбитали может размещаться максимально **два** электрона (**принцип Паули**).
- При наличии орбиталей с одинаковой энергией (например, трех p -орбиталей одного подуровня) каждая орбиталь заполняется вначале **наполовину** (и поэтому на p -подуровне не может быть более трех неспаренных электронов), а затем уже полностью, с образованием **электронных пар (правило Хунда)**.

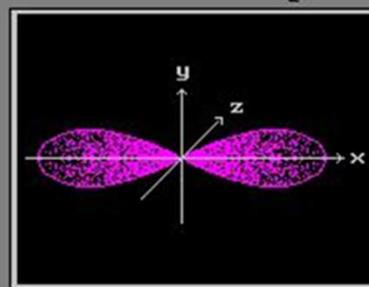
Правило Гунда (Хунда)



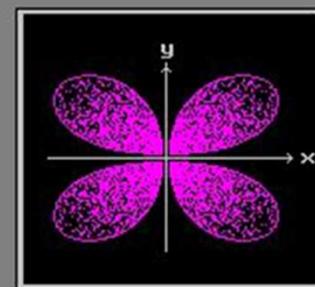
Типы атомных орбиталей



s -орбиталь



p_x -орбиталь

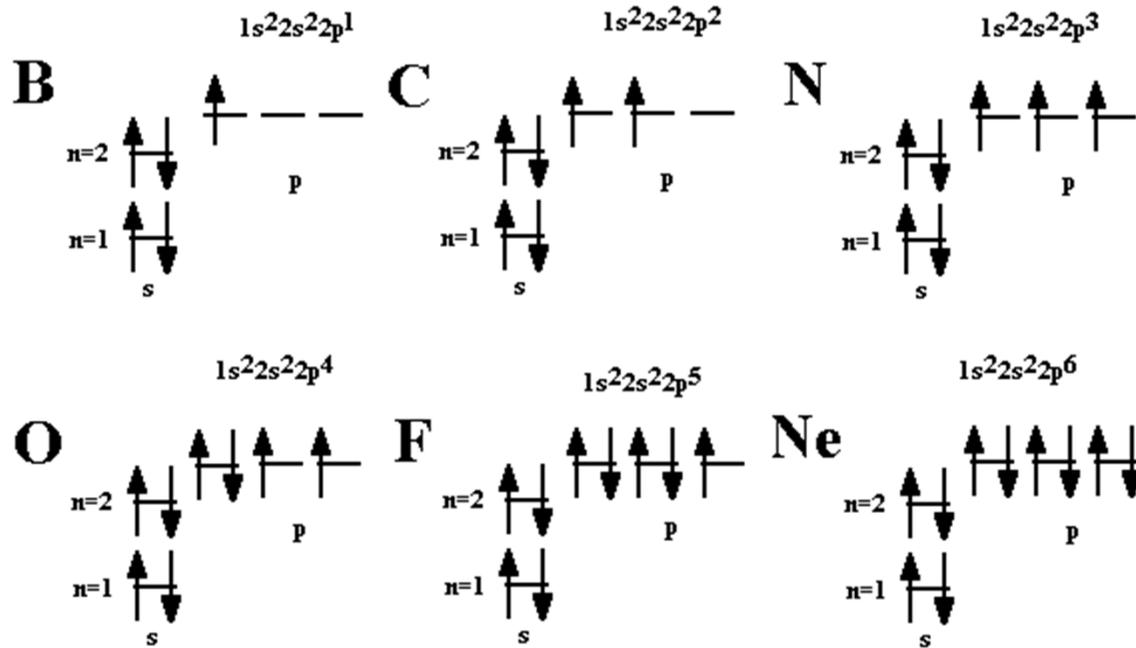


d_{xy} -орбиталь

Правило Гунда (Хунда)

- **Правило Хунда (Гунда)** определяет порядок заполнения орбиталей определённого подслоя и формулируется следующим образом:
суммарное значение спинового квантового числа электронов данного подслоя должно быть максимальным.
 - Это означает, что в каждой из орбиталей подслоя заполняется сначала один электрон, а только после исчерпания незаполненных орбиталей на эту орбиталь добавляется второй электрон. При этом на одной орбитали находятся два электрона с полуцелыми спинами противоположного знака, которые спариваются (образуют двухэлектронное облако) и, в результате, суммарный спин орбитали становится равным нулю.
 - **Другая формулировка:** Ниже по энергии лежит тот атомный терм, для которого выполняются два условия:
 - Мультиплетность максимальна
 - При совпадении мультиплетностей суммарный орбитальный момент L максимален.

Правило Гунда (Хунда)

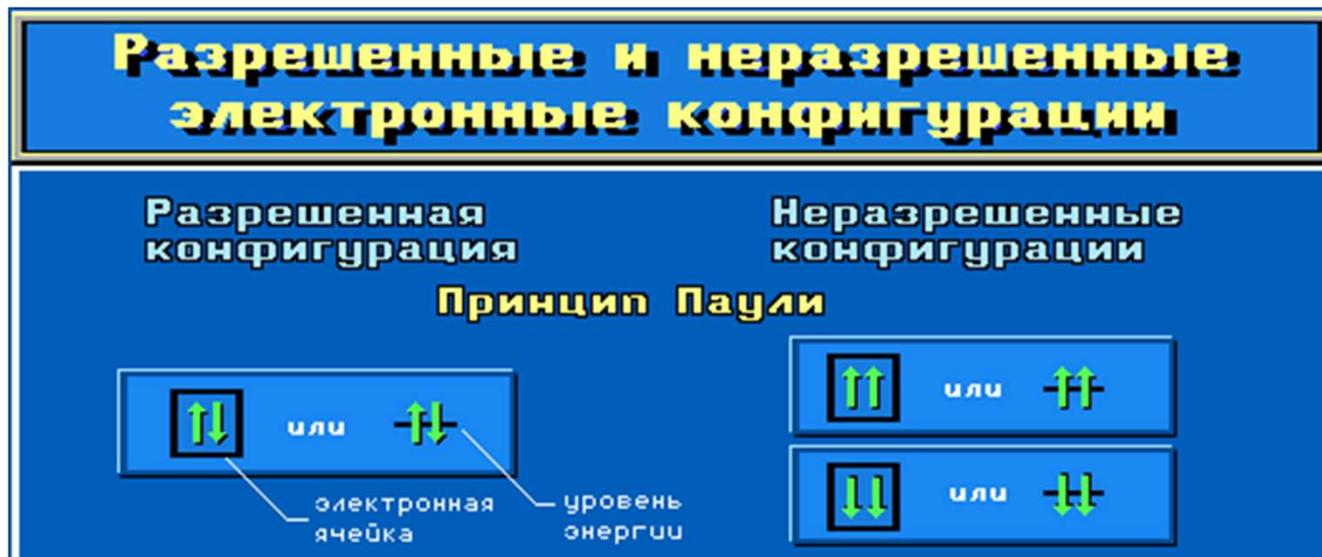


Мнемоническое правило для запоминания правила Гунда:

*Ты приглядишь, решив присесть,
 К местам трамвайного вагона:
 Когда ряды пустые есть,
 Подсаживаться нет резона.*

Принцип запрета Паули

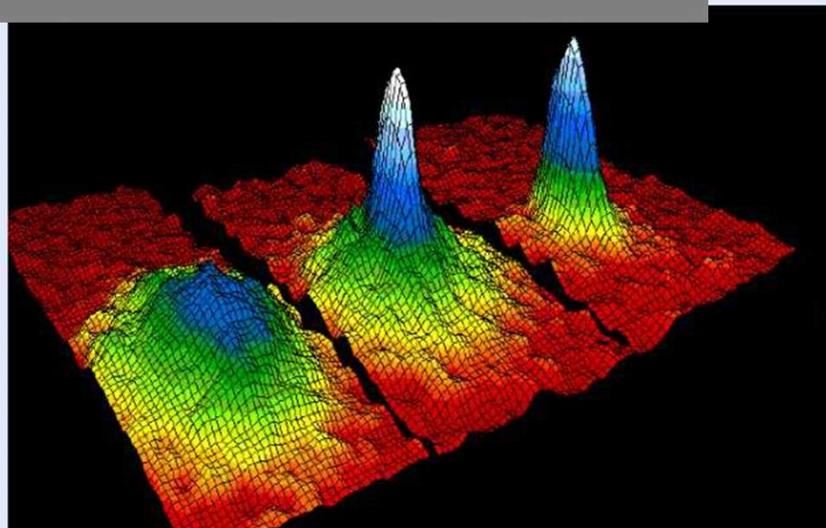
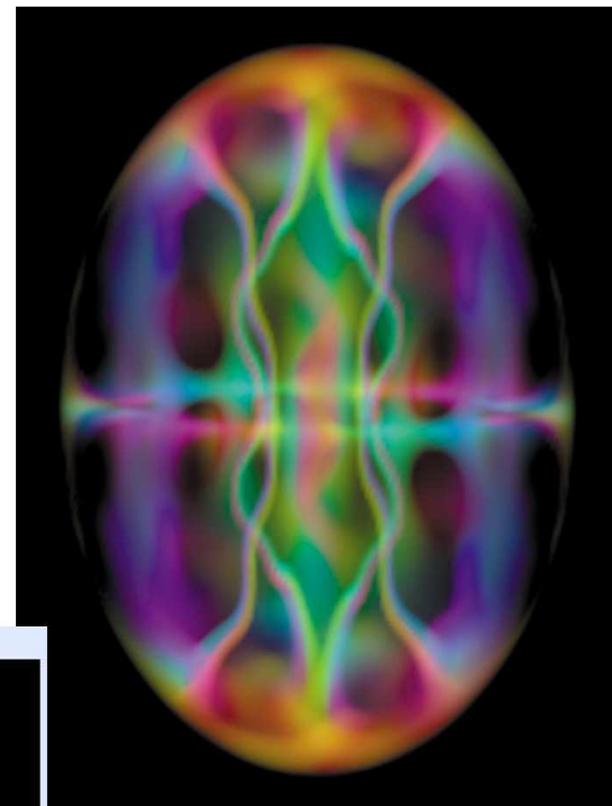
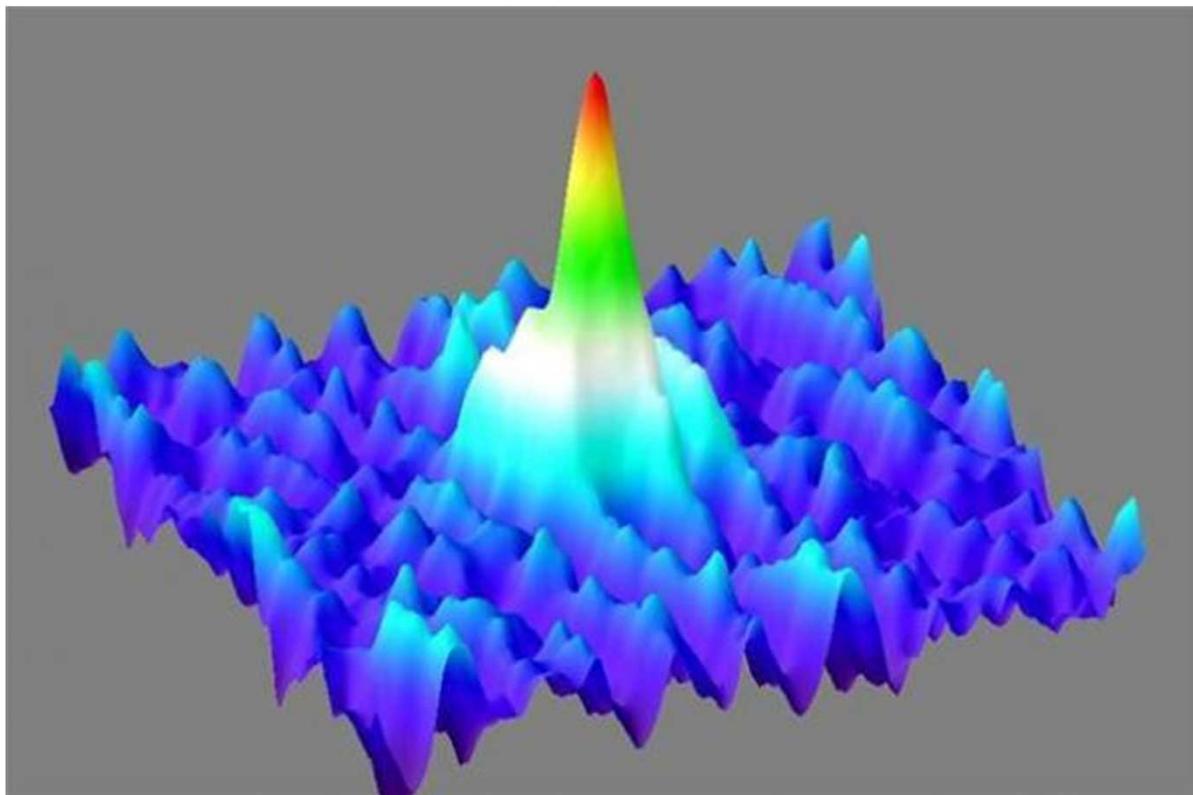
- В каждой атомной орбитали может размещаться максимально **два** электрона (**принцип Паули**).
- Принцип Паули выполняется для фермионов – частиц с полуцелым спином (электроны, позитроны, мюоны и т.п.), и неверен для бозонов – частиц с целым спином (протоны, нейтроны, фотоны, бозон Хиггса и др.).



Конденсат Бозе-Эйнштейна

- **Конденсат Бозе — Эйнштейна** — агрегатное состояние материи, основу которой составляют бозоны, охлаждённые до температур, близких к абсолютному нулю (меньше миллионной доли градуса выше абсолютного нуля). В таком сильно охлаждённом состоянии достаточно большое число атомов оказывается в своих минимально возможных квантовых состояниях и квантовые эффекты начинают проявляться на макроскопическом уровне. *В частности, такой конденсат ведёт себя как одна большая элементарная частица.*
- Теоретически предсказан как следствие из законов квантовой механики Альбертом Эйнштейном на основе работ **Шатъендраната Бозе** в 1925 году. 70 лет спустя, в **1995 году**, первый бозе-конденсат был получен в Объединённом институте лабораторной астрофизики (JILA) (относящемся к Университету штата Колорадо в Боулдере и Национальному институту стандартов) Эриком Корнеллом и Карлом Виманом.
- Учёные использовали газ из атомов **рубидия**, охлаждённый до **5,9 пикокельвин (пК)** ($5,9 \times 10^{-12}$ Кельвин). За эту работу им, совместно с Вольфгангом Кеттерле из Массачусетского технологического института, была присуждена Нобелевская премия по физике 2001 года.

Конденсат Бозе-Эйнштейна



«Заселение» атомных орбиталей

- Заселение атомных орбиталей электронами определяется **правилом минимума энергии, принципом Паули и правилом Хунда**.
- Электроны заселяют атомные орбитали, начиная с подуровня с меньшей энергией. В этом состоит **правило минимума энергии**. Последовательность в нарастании энергии подуровней атома: $1s < 2s < 2p < 3s < 3p < 4s \leq 3d < 4p < 5s$ и так далее ...
 - Согласно расчетам, электрон движется не по какой-то определенной траектории, а может находиться в любой части околоядерного пространства - т.е. можно говорить лишь о вероятности (возможности) его нахождения на определенном расстоянии от ядра.
 - Электроны в атоме занимают самые энергетически выгодные атомные орбитали (*орбитали с минимальной энергией*), образуя электронные облака определенной формы.
- В каждой атомной орбитали может размещаться максимально **два** электрона (**принцип Паули**).
- При наличии орбиталей с одинаковой энергией (например, трех *p*-орбиталей одного подуровня) каждая орбиталь заполняется вначале **наполовину** (и поэтому на *p*-подуровне не может быть более трех неспаренных электронов), а затем уже полностью, с образованием **электронных пар (правило Хунда)**.

ПЕРИОДИЧЕСКАЯ СИСТЕМА ЭЛЕМЕНТОВ Д.И.МЕНДЕЛЕЕВА
(учебное пособие для школьников)

группы →

1 IA	2 IIA
---------	----------

КЛЮЧ

- Атомный номер
- Атомная масса *
- Символ элемента **
- Характерные степени окисления элемента в соединениях и соответствующий им характер оксидов ***
- Относительный размер орбитального радиуса элемента
- Название элемента

Нумерация групп

По рекомендации ИЮПАК, 1989 г.
Традиционная (вариант CAS)

3 IIIB	4 IVB	5 VB	6 VIB	7 VIIB	8	9	10	11 IB	12 IIB
-----------	----------	---------	----------	-----------	---	---	----	----------	-----------

* В скобках - масса наиболее стабильного изотопа

** Цветом символа отражены

- 5-элементы
- p-элементы
- d-элементы
- f-элементы

*** Характер оксидов элемента:

- а - основной
- б - амфотерный
- в - кислый

	13 IIIA	14 IVA	15 VA	16 VIA	17 VIIA	18 VIIIA
5	6	7	8	9	10	20.2
B	C	N	O	F	Ne	
БОР	УГЛЕРОД	АЗОТ	КИСЛОРОД	ФТОР	НЕОН	
13	14	15	16	17	18	39.9
Al	Si	P	S	Cl	Ar	
АЛЮМИНИЙ	КРЕМНИЙ	ФОСФОР	СЕРА	ХЛОР	АРГОН	

ПЕРИОДЫ ↓

1	2
---	---

	26 ¹	55.8
1	2	3
H	He	Fe
ВОДОРОД	ГЕЛИЙ	ЖЕЛЕЗО

11	12
----	----

19	20
----	----

37	38
----	----

55	56
----	----

87	88
----	----

103	104
-----	-----

Лантаниды

	57	58	59	60	61	62	63	64	65	66	67	68	69	70
	La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb
	ЛАНАНОИДЫ	ЦЕРИЙ	ПРАЗЕОДИЙ	НЕОДИМ	ПРОМЕТИЙ	САМАРИЙ	ЕВРОПИЙ	ГАДОЛИНИЙ	ТЕРБИЙ	ДИСПРОЗИЙ	ГОЛЬМИЙ	ЭРБИЙ	ТУЛЬИЙ	ИТТЕРБИЙ

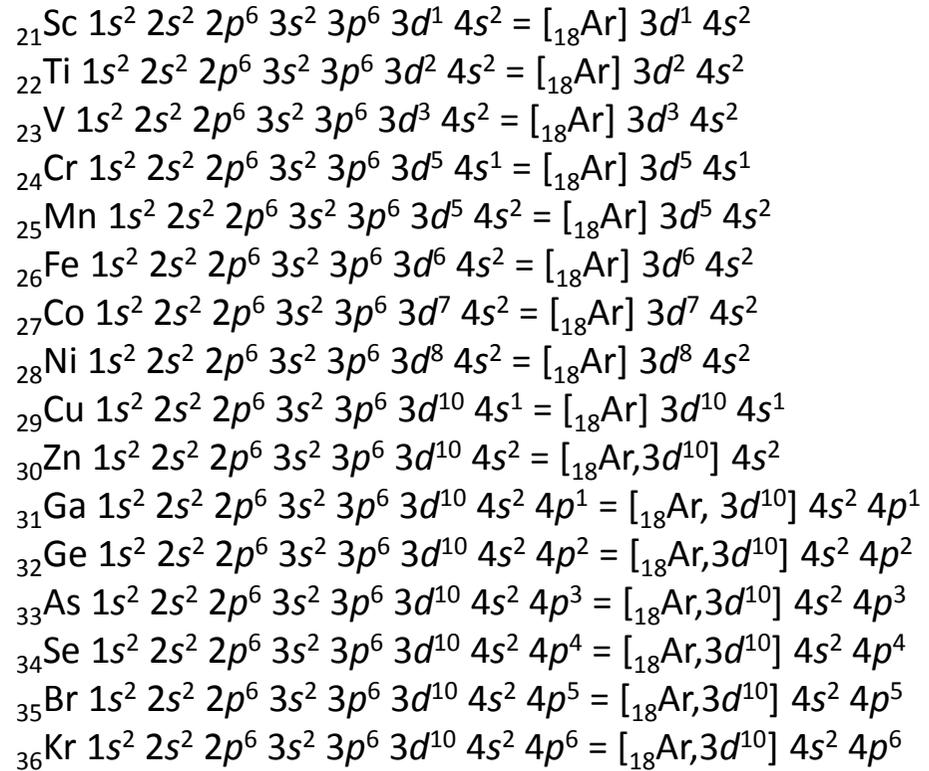
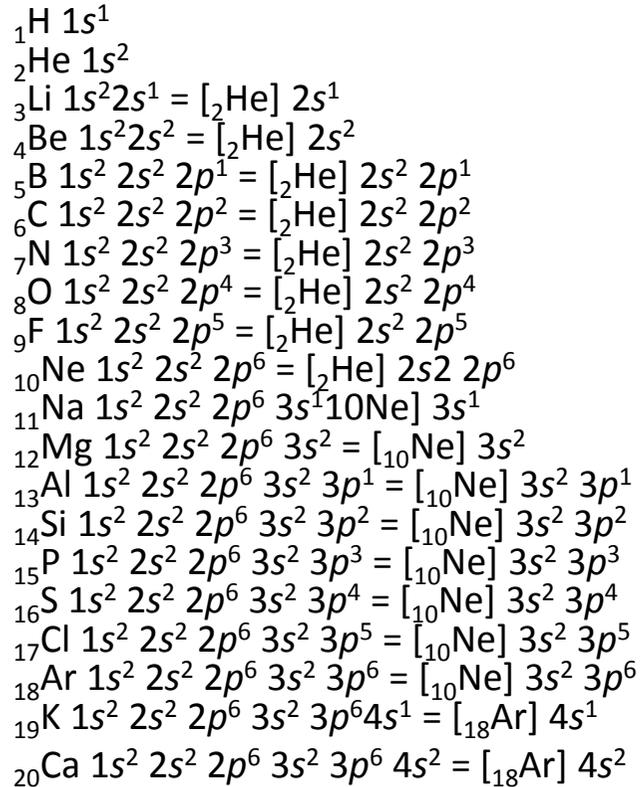
Актиниды

	89	90	91	92	93	94	95	96	97	98	99	100	101	102
	Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No
	АКТИНОИДЫ	ТОРИЙ	ПРОАКТИНИЙ	УРАН	НЕПУЧИЙ	ПЛУТОНИЙ	АМЕРИЦИЙ	КЮРИЙ	БЕРКЛИЙ	КАЛИФОРНИЙ	ЭЙНШТЕЙНИЙ	ФЕРМИЙ	МЕНДЕЛЕВИЙ	НОБЕЛИЙ

ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИЙ РЯД НАПРЯЖЕНИЙ МЕТАЛЛОВ
(ряд стандартных электродных потенциалов в водной среде при 25°C)

ЭЛЕКТРОД	ОКИСЛЕННАЯ ФОРМА	← УСИЛЕНИЕ ОКИСЛИТЕЛЬНЫХ СВОЙСТВ →																		← ЭЛЕКТРОДНАЯ РЕАКЦИЯ								
	E ⁰ , В	Li ⁺	Cs ⁺	Rb ⁺	K ⁺	Ba ²⁺	Sr ²⁺	Ca ²⁺	Na ⁺	Mg ²⁺	Be ²⁺	Al ³⁺	Mn ²⁺	Zn ²⁺	Cr ³⁺	Fe ²⁺	Cd ²⁺	Co ²⁺	Ni ²⁺		Sn ²⁺	Pb ²⁺	2H ⁺	Cu ²⁺	Hg ²⁺	Ag ⁺	Pt ²⁺	Au ³⁺
	ВОССТАНОВЛЕННАЯ ФОРМА	Li	Cs	Rb	K	Ba	Sr	Ca	Na	Mg	Be	Al	Mn	Zn	Cr	Fe	Cd	Co	Ni		Sn	Pb	H ₂	Cu	2Hg	Ag	Pt	Au
		← УСИЛЕНИЕ ВОССТАНОВИТЕЛЬНЫХ СВОЙСТВ →																										

Таблица Менделеева



Из рассмотрения электронных конфигураций атомов видно, что элементы VIIIA-группы (He, Ne, Ar и другие) имеют завершённые s - и p - подуровни ($s^2 p^6$). Такие конфигурации обладают **повышенной устойчивостью** и обеспечивают **химическую пассивность** благородных газов.

В атомах остальных элементов внешние s - и p - подуровни - **незавершённые**, например у хлора: ${}^{17}_{17}\text{Cl} = [{}^{10}_{10}\text{Ne}] 3s^2 3p^5$. Незавершённые подуровни и электроны на них называются также **валентными**, поскольку именно они могут участвовать в образовании химических связей между атомами.