

3.4 Liczby kwantowe

Funkcja falowa Ψ , jest wyrażeniem matematycznym, które opisuje elektron jako cząstkę o właściwościach falowych a to oznacza, że każdemu z elektronów w atomie możemy przyporządkować jedną funkcję falową. Funkcje falowe są trójwymiarowe i zawierają trzy liczby kwantowe; n, l, m , mające wartości całkowite. Występowanie różnych wartości co najmniej jednej z trzech liczb kwantowych w każdej odrębnej funkcji powoduje, że dana funkcja różni się od innych. Szczegółowe badania struktury poszczególnych linii widmowych wielu atomów wykazały że istnieje czwarta liczba kwantowa nazwana *spinową*.

3.4.1 Główna liczba kwantowa

Główną liczbę kwantową oznacza się za pomocą litery n ; może ona przyjmować wartości całkowitych liczb dodatnich, $n = 1, 2, 3, \dots$ i jest dokładnie tą samą literą n , którą wykorzystaliśmy do wyznaczenia długości fali λ i energii cząstki E w poprzednim rozdziale (wzór 4.6 i 4.7). A jeżeli tak jest, to możemy stwierdzić, że główna liczba kwantowa opisuje nam energię cząstki. Dla atomu wodoru rozwiązując równania Schrodingera otrzymamy wzór 4.10.

$$E = - \frac{hR_H}{n^2}, n = 1, 2, \dots \quad (3.13)$$

gdzie: R_H - stała Rydberga z którą zapoznaliśmy się podczas analizy linii widma atomu wodoru. Znak ujemny w równaniu (4.10) oznacza po prostu, że energia elektronu jest tym większa, im dalej znajduje się on od jądra.

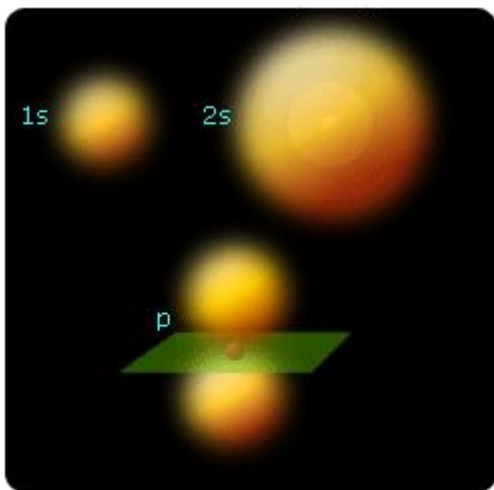
Liczba kwantowa n określa nam jednocześnie numer powłoki elektronową do której należy elektron. Powłoki często oprócz oznaczeń liczbowych, oznacza się również za pomocą kolejnych dużych liter wziętych z badań widm emisyjnych lub absorbcyjnych promieniowania rentgenowskiego.

Wartość n	1	2	3	4	5	6
Symbol literowy	K	L	M	N	O	P

3.4.2 Poboczna (dodatkowa, orbitalna, azymutalna) liczba kwantowa

Poboczna (orbitalna) liczba kwantowa, l , określa kształt orbitalu a jej wartości wynikają z rozwiązania funkcji radialnej, która jak wiemy opisuje gęstość prawdopodobieństwa znalezienia się elektronu w określonej odległości od jądra. Poboczną liczbą kwantową może przyjmować n wartości: $n = od 0, 1, 2, \dots do (n-1)$

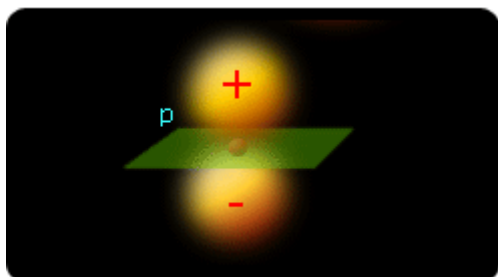
A jaki wywierają wpływ wartości pobocznej liczby kwantowej na kształt orbitalu?



Rys.3.10 Powierzchnie graniczne orbitali.

Otóż okazuje się że, jeżeli wartość liczby pobocznej wynosi $l = 0$ to orbital jest chmurą kulistą (sferyczną), której gęstość maleje, gdy wzrasta odległość od jądra. Kształt takiego orbitalu oznacza się **literą s** i mówimy wtedy, że mamy do czynienia z orbitalami typu s. Dla liczby pobocznej o wartości $l = 1$, kształt orbitalu nie jest kulisty a jest chmurą elektronową, która składa się z dwóch płatów rozmieszczonych po przeciwnych stronach jądra. Płaty te są rozdzielone płaszczyzną węzłową, przecinającą jądro. Elektron tego orbitalu nigdy nie znajduje się na tej płaszczyźnie oraz nigdy nie znajduje się przy jądrze. Ten typ orbitalu oznaczony jest **literą p**. Dla liczby pobocznej $l = 2$, kształt orbitalu ma budowę bardziej skomplikowaną od orbitalu typu p. Orbital ten oznacza się literą d. Odpowiednio dla wartości liczby pobocznej $l = 3$ otrzymujemy orbital **typu f**.

Orbital na rysunku przedstawia się zwykle za pomocą **powierzchni granicznych**, wewnątrz których istnieje prawdopodobieństwo wynoszące 90 % znalezienia elektronu. Na rys.3.10 przedstawiono powierzchnie graniczne orbitali s i p.



Rys.3.11 Znaki funkcji.

Powierzchnie graniczne można oczywiście wykreślić nie tylko dla kwadratów funkcji falowej, ale również dla samych funkcji. Kształty konturów w obu wypadkach są takie same. Istotna różnica polega na tym, że funkcja falowa w pewnych obszarach może być dodatnia, a w innych ujemna, podczas gdy gęstość prawdopodobieństwa jest zawsze wielkością dodatnią. Stąd na wielu rysunkach przedstawiających kontury orbitali zamieszcza się znaki (+) oraz (-). Znak (+) oznacza dodatnią wartość funkcji a znak (-) ujemną wartość funkcji.

Oprócz kształtów poboczna liczba kwantowa uściśla wartość energii elektronu.

Przykład obliczenia wartości kwantowej liczby pobocznej (l)

*Dla pierwszej powłoki gdzie $n = 1$ liczba poboczna l przyjmie wartość $l = n - 1 = 1 - 1 = 0$
 Dla drugiej powłoki gdzie $n = 2$ liczba poboczna l będzie miała wartości 0 oraz $n - 1 = 2 - 1 = 1$, czyli otrzymany dwie wartości liczby pobocznej $l = 0, 1$.
 Odpowiednio dla $n = 3$ wartości liczby pobocznej wyniosą $l = 0, 1, 2$*

W poniższej tabeli zestawiono wartości liczb pobocznych i odpowiadających im oznaczeń orbitali.

Poboczna liczba kwantowa l	0	1	2	3	4	5
Oznaczenie orbitalu	s	p	d	f	g	h

3.4.3 Magnetyczna liczba kwantowa

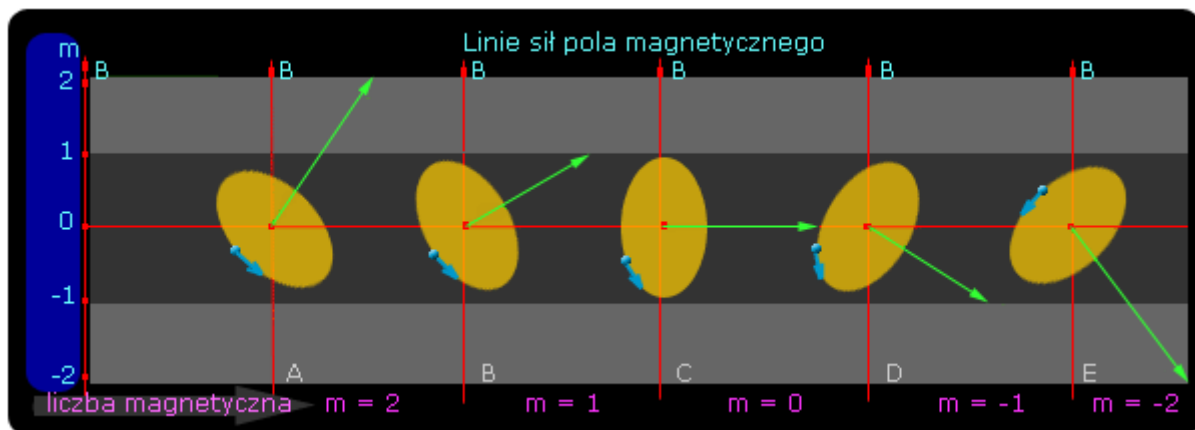
Magnetyczna liczba kwantowa

Już w 1896 roku **Pieter Zeeman** stwierdził, że częstość promieniowania świetlnego wysyłanego przez atom sodu, zmieniała się w polu magnetycznym. Wy tłumaczenie tego zjawiska stało się możliwe dopiero po wprowadzeniu teorii kwantów i słynnego równania Schrodningera.

Z punktu widzenia teorii kwantów, dzieje się tak wskutek rozszczepienia zdegenerowanych stanów energetycznych atomów w wyniku czego powstają nowe stany różniące się nieco poziomem energetycznym.

Przypadek kiedy różne stany elektronu w atomie, posiadają taką samą energię, nazywa się degeneracją stanu energetycznego.

Degeneracja wszystkich poziomów energetycznych, jest prostą konsekwencją faktu nie wyróżnienia w atomie żadnego kierunku. I tak stany; *p są trzykrotnie, stany d - pięciokrotnie, a stany f - siedmiokrotnie zdegenerowane*. Dopiero w obecności pola magnetycznego sytuacja zmienia się zasadniczo. Pojawia się teraz wyróżniony kierunek: kierunek linii sił pola magnetycznego. Przyłożone pole magnetyczne wpływa na energię atomu, ponieważ krążący elektron można rozpatrywać jako prąd, a energia oddziaływania tego prądu z zewnętrznym polem magnetycznym zależy od relacji między kierunkiem tego prądu i kierunkiem linii sił pola. Zewnętrzne pole magnetyczne zmienia wzajemne ustawienie się orbitali w przestrzeni. Tę zmianę wzajemnego ustawienia się orbitali w przestrzeni opisuje nam *magnetyczna liczba kwantowa m*. I tak jeżeli mamy do czynienia z potrójnie zdegenerowanym stanem p, to w polu magnetycznym nastąpi rozszczepienie na trzy podpoziomy; pięciokrotnie zdegenerowany poziom d rozszczepia się na pięć podpoziomów, itd. Na rysunku 3.12 przedstawione zostało rozszczepienie na pięć podpoziomów poziomu d.



Rys. 3.12 Rozszczepienie w polu magnetycznym pięciokrotnie zdegenerowanego poziomu d.

Różnice energetyczne między rozszczepionymi poziomami odpowiadają różnym energiom oddziaływania między pętłami prądu skierowanymi pod różnymi kątami, z zewnętrznym polem. Tak więc, wprowadzenie zewnętrznego pola magnetycznego kładzie kres symetrii między różnymi kierunkami w przestrzeni.

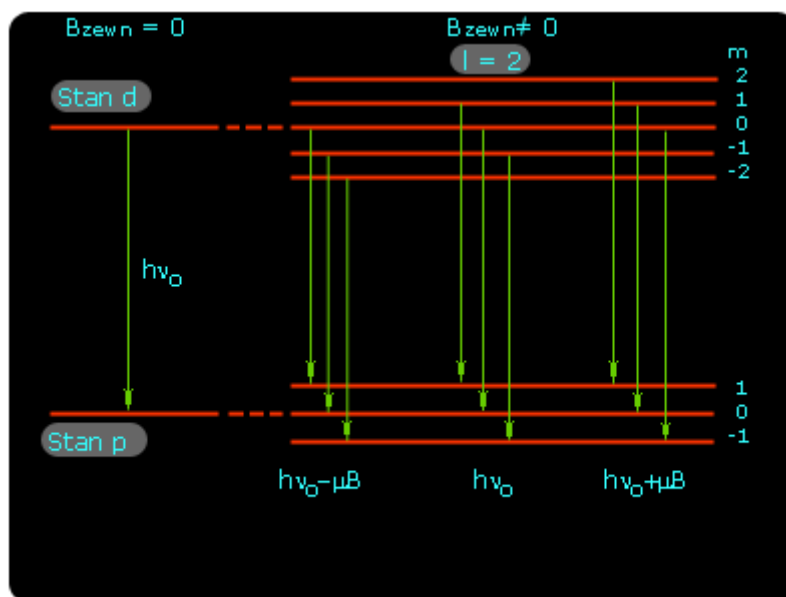
Liczba m może przyjmować $(2l + 1)$ wartości.

$$m = -l, -(l-1), \dots, -1, 0, +1, \dots, +(l-1), +l$$

Przykład:

dla $l = 2$ liczba magnetyczna m przyjmie wartości $-2, -(2-1), 0, +(2-1), +2$
 $m = -2, -1, 0, +1, +2$

Magnetyczna liczba kwantowa m pozwoliła na wyjaśnienie tzw. Zjawiska Zeemana, polegającego na dalszym rozszczepieniu składników subtelnej budowy prążków widmowych w polu magnetycznym, co ilustruje rys. 3.13.



Rys. 3.13 Zjawisko Zeemana. W nieobecności zewnętrznego pola magnetycznego w wyniku przejścia ze stanu d do stanu p powstaje tylko jedna linia widmowa. Gdy przyłożone zostanie zewnętrzne pole magnetyczne, wtedy możliwych jest sześć przejść, chociaż będą występować jedynie trzy rozróżnialne energie.

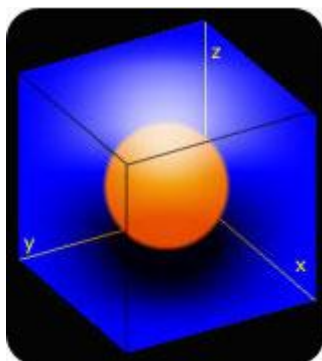
Zjawisko Zeemana jest jednym z najbardziej bezpośrednich potwierdzeń koncepcji *kwantyzacji momentu pędu*.

Jak wpływa pole magnetyczne na orientację orbitali w przestrzeni?

Otóż okazuje się, że orbital typu s z uwagi na swój kulisty charakter nie zmienia swojego ukierunkowania pod wpływem pola magnetycznego. Ten wpływ zaznacza się dopiero dla orbitali typu p, d i f.

I tak orbital typu p w polu magnetycznym ma wyróżnione trzy prostopadłe kierunki, co oznacza, że istnieją trzy orbitale p o danej energii. Podobnie zachowują się orbitale d i f. W orbitalu d możemy wyróżnić pięć różnych kierunków a w orbitalu f siedem różnych kierunków. Wynikiem tego oddziaływania jest istnienie pięciu orbitali typu d i siedmiu orbitali typu f. Na rysunkach 3.14, 3.15 i 3.16 przedstawiono orientację i kształty orbitali s, p i d. Określenie "kształt orbitalu" oznacza powierzchnię graniczną obejmującą większą część gęstości prawdopodobieństwa znalezienia elektronu.

Orbital typu s

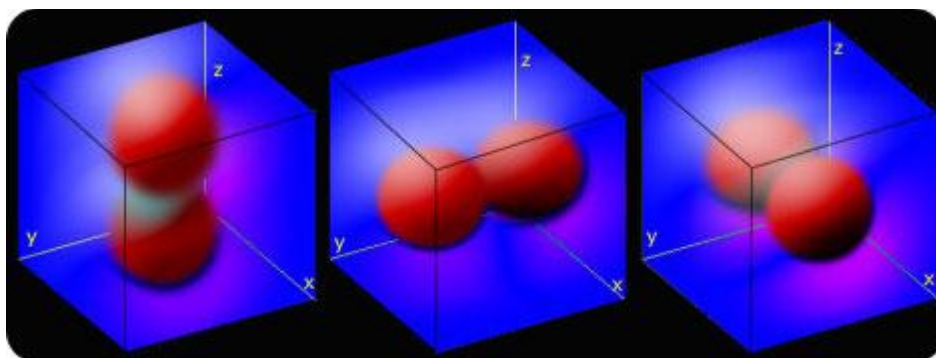


Rys. 3.14 Powierzchnia graniczna orbitali s

Wiemy że, powłoka o głównej liczbie kwantowej $n = 1$ składa się z jednego tylko orbitalu 1s, tworzącego kulistą powłokę. Z uwagi na swoją kulistość, orbital 1s ma zatem charakter bezkierunkowy. Podobnie i wyższe orbitale 2s, 3s, itd. tworzą powłoki kuliste, co przedstawia rys. 3.14. Ruch elektronu w obrębie orbitali s prawdopodobnie odbywa się wzdłuż promienia w kierunku od i dośrodkowym.

Orbital typu p

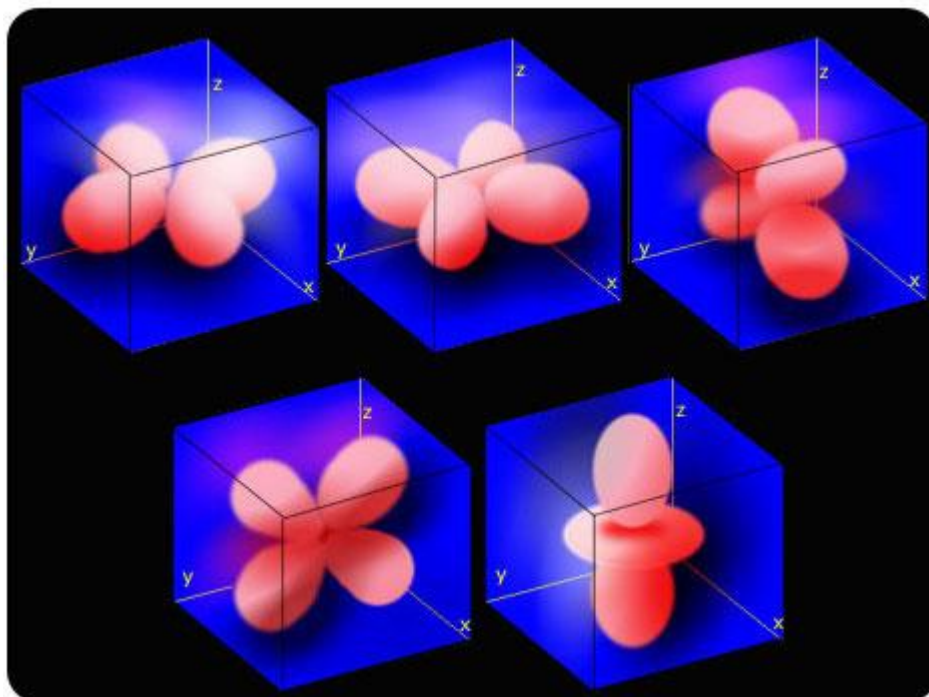
Elektrony w powłoce $n = 2$ mogą mieć wartość liczby pobocznej $l = 0$ i 1 tzn. oprócz orbitalu s pojawiają się orbitale p. Trzy zdegenerowane (tzn. o jednakowej energii) orbitale p mają w przybliżeniu kształt figur powstałych przez obrót ósemki dookoła podłużnej osi i w polu magnetycznym są ustawione względem siebie w przestrzeni pod kątem prostym. Prawdopodobieństwo znalezienia się elektronu w środkowej części jest równe zero. Orbitale p są przedstawione na rys. 3.15.



Rys. 3.15 Powierzchnia graniczna orbitali p

Orbital typu d i f

Poziom $n = 3$ obejmuje podpoziomy s, p, d. Pięć równoważnych (zdegenerowanych) orbitali typu d przedstawia rys. 3.16. Orbitale typu f mają również symetryczny rozkład w przestrzeni, ale jeszcze bardziej złożony kształt.

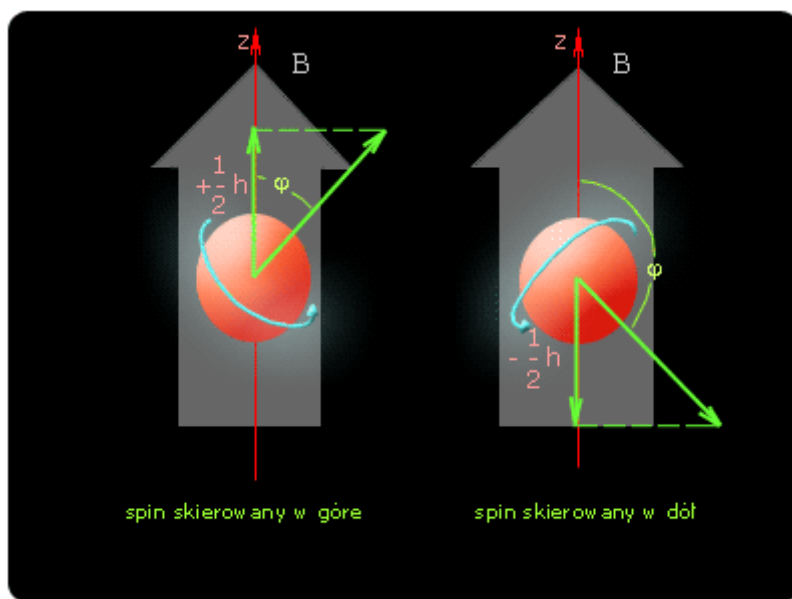


Rys. 3.16 Powierzchnia graniczna orbitali d

3.4.4 Spinowa liczba kwantowa

Bardziej szczegółowe badania struktury poszczególnych linii widmowych dość prędko ujawniły, że rozszczepiają się one w bardziej skomplikowany sposób, niż wynikałoby to z efektu Zeemana. Zjawisko to nazwano *anormalnym zjawiskiem Zeemana*. W szczególności okazało się, że niekiedy następuje rozdwojenie linii, co wskazuje na rozdwojenie poziomów energetycznych. Był to problem szczególnie zagadkowy, gdyż zdawał się wskazywać na istnienie nowej liczby kwantowej, która mogła przybierać tylko dwie wartości. Lecz sens tej liczby był całkowicie nieuchwytny. Wydawało się, że wszystko, co niezbędne dla scharakteryzowania układu kwantowego uwzględniono.

W końcu rozdwojenie linii widmowych wyjaśnili *Goudsmit i Uhlenbeck*, wyjaśnienie to było jednym z największych osiągnięć ówczesnej epoki. Zasugerowali oni, że elektron oprócz takich właściwości jak ładunek i masa ma jeszcze inną, immanentną własność, a mianowicie *spinowy moment pędu* nazywany krótko *spinem*. Jest on wynikiem ruchu obrotowego elektronu wokół własnej osi (rys. 3.14).



Rys. 3.17 Spinowy moment pędu elektronu przestrzennie skwantowany (względem pola magnetycznego \mathbf{B} ma tylko dwa dozwolone ustawienia.)

Liczbę s nazywamy liczbą kwantową, ale nie używamy jej na równi z innymi liczbami kwantowymi, ponieważ ma ona wyłącznie wartość $1/2$ i wobec tego nie wprowadza dodatkowego rozróżnienia stanów energetycznych. Dopiero kiedy przyłożymy zewnętrzne pole magnetyczne (\mathbf{B}), to pojawiają się zauważalne różnice w stanach energetycznych. I te stany opisuje *spinowa liczba kwantowa m_s* . Spinowej liczbie kwantowej $m_s = +1/2$ odpowiada spin skierowany w górę, a $m_s = -1/2$ odpowiada spin skierowany w dół.

Chociaż w początkowym okresie trudno było wytłumaczyć pochodzenie spinu elektronu i chociaż upłynęło nieco czasu, zanim włączono tę wielkość fizyczną w sposób spójny do mechaniki kwantowej, wkrótce stało się rzeczą jasną, że zaproponowana przez Goudsmitha i Uhlenbecka hipoteza bardzo dobrze wyjaśnia obserwowaną strukturę linii widmowych.

Jak zobaczymy w dalszej części podręcznika, podwojenie poziomów energetycznych w atomach wskutek występowania spinu elektronowego odgrywa decydującą rolę w konstrukcji *układu okresowego pierwiastków*.

W tabeli 3.1 zestawiono wszystkie liczby kwantowe. Ponieważ s jest zawsze równe $1/2$ stan układu może być całkowicie opisany za pomocą liczb kwantowych n, l, m, m_s . Zauważmy, że dla każdego l istnieje $2l + 1$ wartości m , a dla każdego s mamy $2s + 1 = 2$ możliwych wartości m_s .

Tabela 3.1

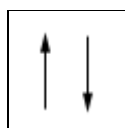
Wartości liczb kwantowych

Liczby kwantowe	Wartości	Liczba możliwych
-----------------	----------	------------------

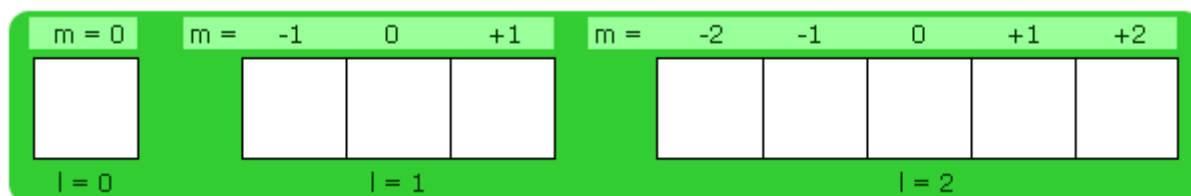
		wartości
Główna, n	1, 2, 3,	dowolna
Orbitalna, l	0, 1, 2, ..., (n - 1)	n
Magnetyczna, m	0, +/-1, +/-2, ..., +/-l	2l + 1
Spinowa, s	1/2	1
Magnetyczna spinowa, m _s	+/-1/2	2s + 1 = 2

3.4.5 Symboliczne przedstawianie orbitali atomowych

Pojedynczy orbital przedstawia się symbolicznie w postaci małego kwadratu wewnątrz którego rysujemy strzałki, które przedstawiają elektrony. *Aby przedstawić elektron odpowiadający danemu orbitalowi, wewnątrz klatki rysuje się strzałkę, której ostrze zwrócone jest do góry, jeżeli spin wynosi + 1/2 albo do dołu, jeśli s = - 1/2.*



Dla celów praktycznych często łączymy wszystkie kwadraty należące do tej samej podpowłoki.



Jeżeli $l = 0$, $m = 0$ i występuje tylko jeden orbital. Jeżeli $l = 1$ to m przyjmuje wartości $-1, 0, +1$. Przy trzech wartościach m występują trzy orbitale. Jeżeli $l = 2$, to orbitali jest 5, gdyż m przyjmuje pięć różnych wartości itd.

Zauważmy, że liczba orbitali zależy wyłącznie od wartości l . Jest ona niezależna od n , lecz l powinno spełniać warunek $0 < l < n$.

3.5 Zasada rozbudowy

Dotychczasową analizę budowy atomu ograniczyliśmy do wodoru, który jak wiemy posiada tylko jeden elektron. W analizie były rozpatrywane różne stany energetyczne elektronu a ten stan jak już wiemy zależy tylko od wartości głównej liczby kwantowej n . Przejście elektronu z jednego poziomu energetycznego na inny, niższy, towarzyszy emisja energii odpowiadającej różnicy poziomów, ΔE , w postaci kwantu promieniowania.

$$\Delta E = h\nu$$

I odwrotnie przeniesienie elektronu z poziomu niższego na wyższy wymaga dostarczenia energii w postaci kwantu promieniowania.



Obserwowane efekty zewnętrzne, to linie widma atomowego wodoru.

Elektrony przyjmując lub oddając energię będą zmieniały powłoki na których mogą zajmować różne orbitale, których kształty opisane są przez poboczną liczbę kwantową.

A jak będą zachowywały się elektrony w atomach w których jest ich więcej jak jeden?

Otóż obserwowane efekty zewnętrzne są podobne do tych jakie obserwujemy przy atomie wodoru. Różnica jest w długości i ilości emitowanych fal świetlnych. Przykładem jest widmo liniowe atomu sodu.



Widmo liniowe atomu sodu (Na)



Rys. 16 Próby płomieniowe.

Czyli na podstawie widm atomowych innych pierwiastków jak wodor możemy wnioskować, że elektrony w tych atomach mogą zmieniać swoją energię. Barwne efekty zmian energii elektronów możemy zaobserwować podczas próby płomieniowej, która polega na spalaniu (podgrzewaniu) w płomieniu palnika soli danego pierwiastka. Próby płomieniowe umożliwiają min. łatwe rozróżnianie pierwiastków i ta metoda ma praktyczne znaczenie w analizie jakościowej pierwiastków. W każdym przypadku, barwy płomienia pochodzą od wzbudzonych energetycznie atomów.

Atomy innych pierwiastków w odróżnieniu od atomu wodoru mają więcej jak jeden elektron. I tak atom helu ($Z=2$) ma dwa elektrony, atom wapnia ($Z=20$) ma dwadzieścia elektronów, a obojętny atom pierwiastka o liczbie atomowej Z ma Z elektronów. Wszystkie wymienione atomy są przykładami *atomów wieloelektronowych*.

W atomie wodoru, w którym nie występuje odpychanie między elektronami, wszystkie orbitale z danej powłoki mają identyczną energię. Oznacza to, że elektron przeniesiony z powłoki $n=1$ na powłokę $n=2$, niezależnie od tego jakiego typu obsadzi orbital ($2s$ lub $2p$), zawsze będzie miał jednakową wartość energii. To samo dotyczy elektronu przeniesionego z powłoki $n=1$ na powłokę $n=3$ na której elektron może znaleźć się na orbitalu $3s$, trzech orbitali $3p$ lub pięciu orbitali $3d$ ale zawsze będzie miał taką samą energię.

Elektrony w atomie wieloelektronowym obsadzają orbitale podobnie jak w atomie wodoru. Różnica dotyczy energii orbitali, które w odróżnieniu od atomu wodoru podlegają silniejszemu oddziaływaniu jądra atomu i innych elektronów. Jądro silniej przyciąga elektrony co zmniejsza energię orbitalu, natomiast elektrony odpychają się wzajemnie, co zwiększa energię orbitalu. Działanie odpychające elektronów osłabia siłę przyciągania elektronu przez jądro, a samo zjawisko nazywamy *ekranowaniem*.

Dlatego w atomach wieloelektronowych w odróżnieniu od jednoelektronowego wodoru, daje się zauważyć różnicę energii pomiędzy orbitalami tej samej powłoki. I tak odpychanie się elektronów powoduje że, energia elektronu z orbitalu $2p$ jest większa od energii elektronu orbitalu $2s$. Podobnie i na trzeciej powłoce ($n=3$), największą wartość energii mają elektrony orbitali typu d , mniejszą orbitali typu p a najmniejszą orbitalu typu s .

O wartości energii elektronu decyduje również efekt tzw. *przenikania elektronów s*, które polega na tym że, elektron s dowolnej powłoki może znaleźć się blisko jądra. Wytlumaczenie tego zjawiska należy poszukiwać w rachunku prawdopodobieństwa z którego wynika, że elektron s może znaleźć się blisko jądra. Z tego względu elektron s nie jest dobrze ekranowany, jest silniej związany z jądrem, ma więc małą energię.

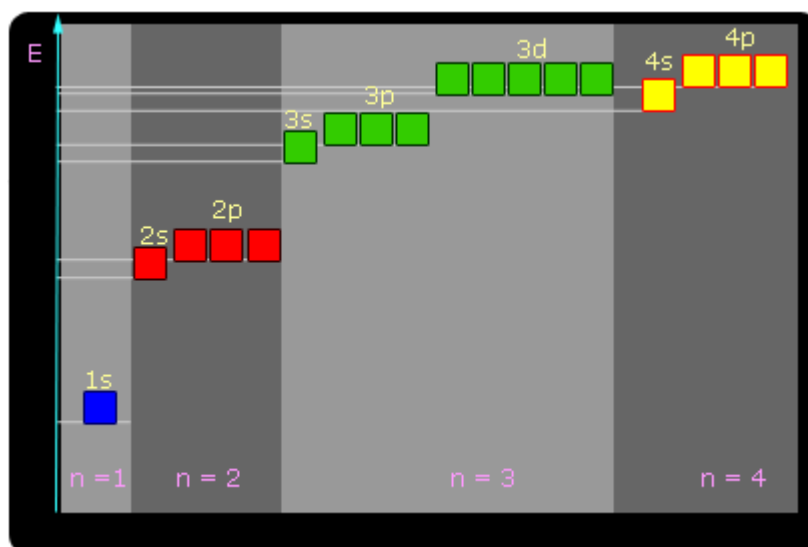
Ogólnie możemy stwierdzić, że o wartości energii elektronu w atomie decyduje jego położenie, tj. numer powłoki i rodzaj orbitalu.

W atomach wieloelektronowych, efekty przenikania i ekranowania elektronów powodują, że elektrony s mają mniejszą energię niż elektrony p tej samej powłoki. Wartość energii orbitali wzrasta w kolejności $s < p < d < f$.

Jeżeli już wiemy, że elektrony w atomach różnych pierwiastków posiadać mogą różne energie, to tym samym warunkują one różnice w widmach liniowych.

Różnice w wartościach energii poszczególnych orbitali decydują o kolejności obsadzania orbitali atomowych. A mianowicie kolejność tę określa **zasada rozbudowy powłok**.

Zasada ta mówi, że kolejne orbitale są zajmowane w porządku wzrastającej energii (rys. 17).



Rys. 17 Względne energie powłok, podpowłok i orbitali w atomie wieloelektronowym

A to oznacza, że obsadzanie orbitali elektronami odbywa się od orbitalu o najmniejszej energii, którym jest orbital 1s, następnie 2s i 2p. Od orbitali trzeciej powłoki, daje zauważyć się większy wpływ przenikania i ekranowania elektronów. I tak elektrony orbitalu 4s przenikają przez powłoki zewnętrzne tak skutecznie, że jego energia jest znacznie mniejsza od energii elektronu 4p i 4d, a nawet od energii elektronów rozmieszczonych na orbitalu 3d.

Opisany sposób obsadzania orbitali elektronami nie jest wystarczający. Pojawia się tutaj pytanie - **a w jaki sposób obsadzane są orbitale o takiej samej energii?** Otóż ten problem reguluje **zakaz Pauliego i reguła Hunda**.

Zakaz Pauliego

Dwa elektrony mogą zajmować ten sam orbital tylko wówczas, gdy ich spiny są przeciwne tj. zorientowane w przeciwnych kierunkach.

Oznacza to, że nie mogą istnieć dwa elektrony w identycznym stanie kwantowym, tzn. mające identyczne wartości czterech liczb kwantowych (n, l, m, m_s). Zdanie to stanowi sformułowanie zakazu Pauliego. Fizyk austriacki Wolfgang Pauli (1901 - 1959) pierwszy zauważył, że obecność jednego elektronu na orbitalu wyklucza możliwość znalezienia się na nim innego elektronu o tej samej orientacji spinu. Z zakazu Pauliego wynika, że żaden orbital na diagramie poziomów energetycznych nie może być obsadzony przez więcej niż dwa elektrony.

Zakaz Pauliego okazał się podstawową **zasadą budowy materii**, dotyczącą struktury wszystkich układów złożonych z cząstek jednakowego rodzaju. Jest on słuszny nie tylko dla budowy atomu, lecz także w przypadku wiązań chemicznych elektronów w ciałach stałych i budowy jądra atomowego. Na podstawie zakazu Pauliego łatwo można wyliczyć maksymalną liczbę elektronów jaka może pomieścić się na poszczególnych powłokach i podpowłokach atomu.

Maksymalna pojemność powłok wynosi:

Nr powłoki	Maksymalna ilość elektronów
1	2
2	8
3	18
4	32
5	50

Maksymalna liczba elektronów dla podpowłok wynosi: **s - 2, p - 6, d - 10, f - 14.**

Rozmieszczenie elektronów na orbitalach można przedstawić w dwojaki sposób, tj. za pomocą zapisu kwantowego i symboli orbitali.

Zapis kwantowy

Otrzymuje się go pisząc dla każdej podpowłoki grupę trzech symboli: pierwszy jest liczbą, która podaje wartość głównej liczby kwantowej; drugi jest literą s, p, d, f,itd., charakteryzującą podpowłokę elektronową; trzeci umieszczony jako wykładnik u góry na prawo wskazuje liczbę elektronów obecnych w danej podpowłoce.

Symbole te można grupować według powłok. Na przykład dla atomu tlenu zapis kwantowy ma postać $1s^2 2s^2 2p^4$. Tak pogrupowane symbole przedstawiają nam **konfigurację elektronową atomu**.

Zapis przy pomocy symboli orbitali

W zapisie tego rodzaju wykorzystujemy graficzne symbole orbitali, tj. rysowane kwadraty ze strzałkami symbolizującymi elektrony. Kierunek strzałki przedstawia spin elektronu.



Przedstawione opisy orbitali mają zastosowanie praktyczne do opisowego i graficznego przedstawienia konfiguracji elektronowych atomu i są często wykorzystywane do przedstawiania mechanizmów reakcji chemicznych.

Reguła Hunda

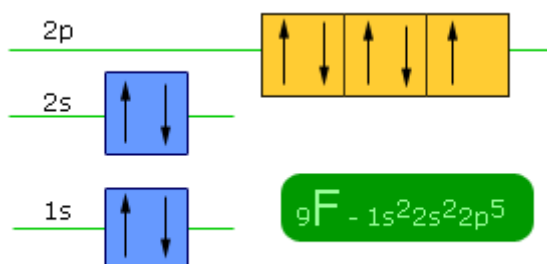
Elektrony obsadzają orbitale w taki sposób, aby liczba niesparowanych elektronów w danej podpowłoce była możliwie największa.

Oznacza to, że przy zapełnianiu kolejnych orbitali elektronami wszystkie orbitale odpowiadające (orbitale o tych samych liczbach kwantowych n i l) zostaną zapełnione najpierw po jednym elektronie o spinie równoległym, a dopiero potem drugim elektronem o spinie przeciwnym.

Przykładem jest atom tlenu o konfiguracji elektronowej $1s^2 2s^2 2p^4$, co odpowiada schematowi



Uwzględniając wszystkie założenia wynikające z zasady rozbudowy powłok elektronowych, jesteśmy w stanie przedstawić konfigurację elektronową każdego atomu. Ten sposób prezentacji budowy powłok elektronowych atomu, będzie wykorzystywany w kolejnych partiach materiału podręcznika. Poniżej przykład przedstawienia konfiguracji elektronowej dla atomu fluoru ($Z = 9$), gdzie został wykorzystany zapis kwantowy i graficzny.



Często kwantowy zapis konfiguracji elektronowej można uprościć, uwzględniając to, że po wypełnieniu orbitali zewnętrznej powłoki w każdym kolejnym atomie możemy wyróżnić *rdzeń atomowy*, który jest otoczony elektronami *powłoki walencyjnej*.

	Elektrony rdzeniowe	Powłoka walencyjna
${}^6\text{C}$	$1s^2$	$2s^2 2p^2$
${}^{16}\text{S}$	$1s^2 2s^2 2p^6$	$3s^2 3p^4$
${}^{19}\text{K}$	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$	$4s^1$

Elektrony rdzeniowe zawsze mają konfigurację helowca, co widoczne jest na podanych przykładach z węglem ($Z = 6$), siarką ($Z = 16$) i potasem ($Z = 19$). Dla atomu węgla rdzeniem jest atom helu ($Z = 2$), dla siarki atom neonu ($Z = 10$) a dla potasu atom argonu ($Z = 18$).

Uroszczenie zapisu kwantowego konfiguracji elektronowej atomu będzie polegało na podaniu w zapisie kwantowym, w nawiasie kwadratowym symbolu odpowiedniego helowca i pełnej konfiguracji powłok walencyjnych. Dla podanych przykładów, po uproszczeniu zapis konfiguracji elektronowej ma postać.

