

1 Atoma orbitālēs — s, p, d, f elektrona svārstību stāvvilnis.

Elektroniem atomos stāvviļņa enerģijas vērtību. nosaka frekvence sareizināta ar planka konstanti $\nu \cdot h = E$. Elektrons ir negatīvi lādēts (–) stāvvilnis, kuru apzīmē par **elektronu orbitāli**, dēļ centrālās simetrijas elektrona aizpildītā atoma telpā attiecībā pret centrālo pozitīvo lādiņu (+) kodolā.

Elementu periodiskajā tabulā ir septiņi **periodi** 1,2,3,4,5,6,7 ar septiņām pamat toņu **orbitālēm** $s_1, s_2, s_3, s_4, s_5, s_6, s_7$. Atbilstoši septiņiem galvenajiem kvantu skaitļiem $n = 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7$ līdzīgi kā muzikālie pamata toņi **do, re, mi, fa, sol, la, si** oktāvā. Elektronu stāvviļņu 7 pamattoņiem **s** ir trīs virstoņi – apakš līmeņu **p, d, f orbitāles**:

p – apakš līmeņa **orbitāle** – *Grieķu* protos – pirmais, viena mezglu plakne 1,

d – apakš līmeņa **orbitāle** – *Grieķu* deitos – otrs, divas mezglu plaknes 2,

f – apakš līmeņa **orbitāle** – *Latīņu* finēre, beidzamais, pēdējais trīs mezglu plaknes 3.

Elektronu viļņu daba (mikro objekts) ir pilnīgi atšķirīgi no ķermeņiem (makro objektiem). Makro objekts atoma ķermenī ir kodols, kurā ir koncentrēta visa atoma masa. Elektrona masa ir 1 vienība attiecībā pret 7294 reizes lielāku-protona masu. Tas ir daudz mazāk kā spalva piestiprināta pie putna. Kodola $0.00001 \text{ \AA} = 10^{-15} \text{ m}$ izmērs ir 100000 reizes mazāks par atomu mērāmu angstrēmās ($1 \text{ \AA} = 10^{-10} \text{ m}$). Atoma izmērs veido elektrons, kura stāvvilnis aizņem visu atoma telpu ar lielāko atrašanās varbūtību ārējā slāņa virsmā, kura ir atoma ārējā mala. Elektrons veido atoma tilpumu 10^{15} reizes (Peta reizes) lielāku par kodola tilpumu. Koordināšu centrs atrodas atoma centrā ar precizitāti 0.00001 \AA . Elektrona **orbitāle** ir trīs dimensionāla ar kodola lokalizāciju centrā. Kodola pozitīvais lādiņš (+) saista negatīvi lādēto (–) elektrona **orbitāli**. Trīs dimensionals stāvvilnis izveidojas pamatojoties uz fundamentālām 3D svārstībām elektronā līdzīgi kā lineārs stāvvilnis uz stīgas muzikālam instrumentam ģitārai, kontrabasam, klavierēm utt.. 1.attēls, kurš ir lineāra veida analogs elektrona trīs dimensionālajam 3D stāvvilnim atomā. Stāvviļņa veidošanos matemātiski apraksta fizikas likumi, reizinot ar kvantu skaitli $k=1$ svārstību frekvenci ν_1 pamattonim **s** orbitālei, lai **p, d, f** virstoņiem aprēķinātu frekvences daudzkārsošanos $k \cdot \nu_1$ divas reizes $2 \cdot \nu_1$ orbitālei **p**, trīs reizes $3 \cdot \nu_1$ orbitālei **d** un četras reizes $4 \cdot \nu_1$ orbitālei **f**. Uzsitot klavierēm pa 1.**do** taustiņu ieskanas pamattonis **do**. Klavieru stīga ir nostiprināta starp diviem galapunktiem pa kreisi un pa labi.

pa kreisi \leftarrow **D** ir stīgas garums pa labi \rightarrow

1.**do** stīgas virstonis **trešās oktāvas do** – ar trim mezglu punktiem **4**.

1.**do** stīgas virstonis **otrās oktāvas sol** – ar diviem mezglu punktiem **3**.

1.**do** stīgas virstonis **otrās oktāvas do** – ar vienu mezglu punktu vidū **2**.

1.**do** stīgas **pirmās oktāvas pamattonis do** - stāvvilnis lineārā kastē **1**.
ar stīgas garumu **D**



1.attēls. Skaņu radošs stāvvilnis uz vienas nostieptas stīgas pirmās oktāvas **do** un trīs virstoņi **2, 3** un **4**.

1. **pamattonis** viļņa garums $\lambda_1 = \frac{2}{1} \cdot D$ un pamattona frekvence ν_1 ir **pirmās oktāvas do** stīgai veidojot amplitūdas virsotni augšā un apakšā stīgas vidū bez mezglu punktiem:

2. **pirmais virstonis** par oktāvu augstāks (**otrās oktāvas do**) ar viļņa garums $\lambda_2 = \frac{\lambda_1}{2}$ un frekvenci $\nu_2 = 2 \cdot \nu_1$, ar vienu mezglu punktu stīgas vidū un divām amplitūdu virsotnēm simetriski abās pusēs mezglu punktam;

3. **otrais virstonis** - piektais no **otrās oktāvas** toņiem **sol** ir viļņa garums $\lambda_3 = \frac{\lambda_1}{3}$ un frekvence $\nu_3 = 3 \cdot \nu_1$, ar diviem mezglu punktiem sadalot stīgu trīs vienādās daļās ar amplitūdu virsotnēm stīgas nodalīto daļu vidū;

4. **trešais virstonis** par divām oktāvām augstāks (**trešās oktāvas do**) ir viļņa garums $\lambda_4 = \frac{\lambda_1}{4}$ un frekvence $\nu_4 = 4 \cdot \nu_1$, ar trim mezglu punktiem stīgu sadalot četros vienādos amplitūdu garumos uz stīgas.

Kvantu skaitļi k ir **1, 2, 3** un **4**. sadala stīgas garumu **D** un frekvenci ν_1 kvantētās daļās **1, 2, 3** un **4**. Mezglu punkti pie stīgas līnijas ir klusējošas miera stāvokļa vietas bez svārstībām norobežo atsevišķas stāvviļņa sastāvdaļu virsotņu skaitu **1, 2, 3** un **4**. Mezglu punktu skaits \mathcal{L} ir **kvantu skaitlis k** mīnus **viens (-1)** tātad:

1- $\mathcal{L} = 0$ **nav** mezglu punkta pirmās oktāvas **do** pamattonis.

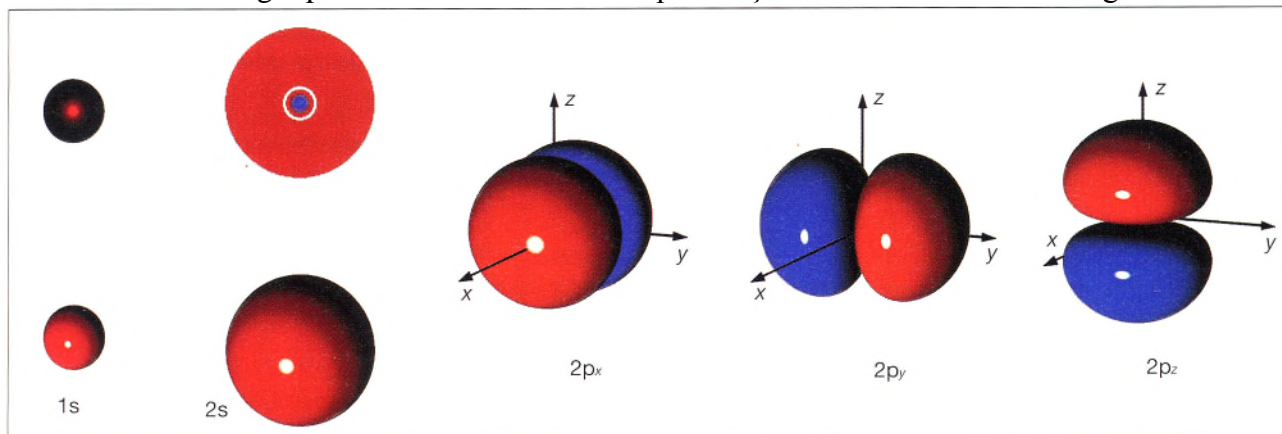
2- $\mathcal{L} = 1$ **viens** mezglu punkts otrās oktāvas **do**,

3- $\mathcal{L} = 2$ **divi** mezglu punkti otrās oktāvas **sol** un

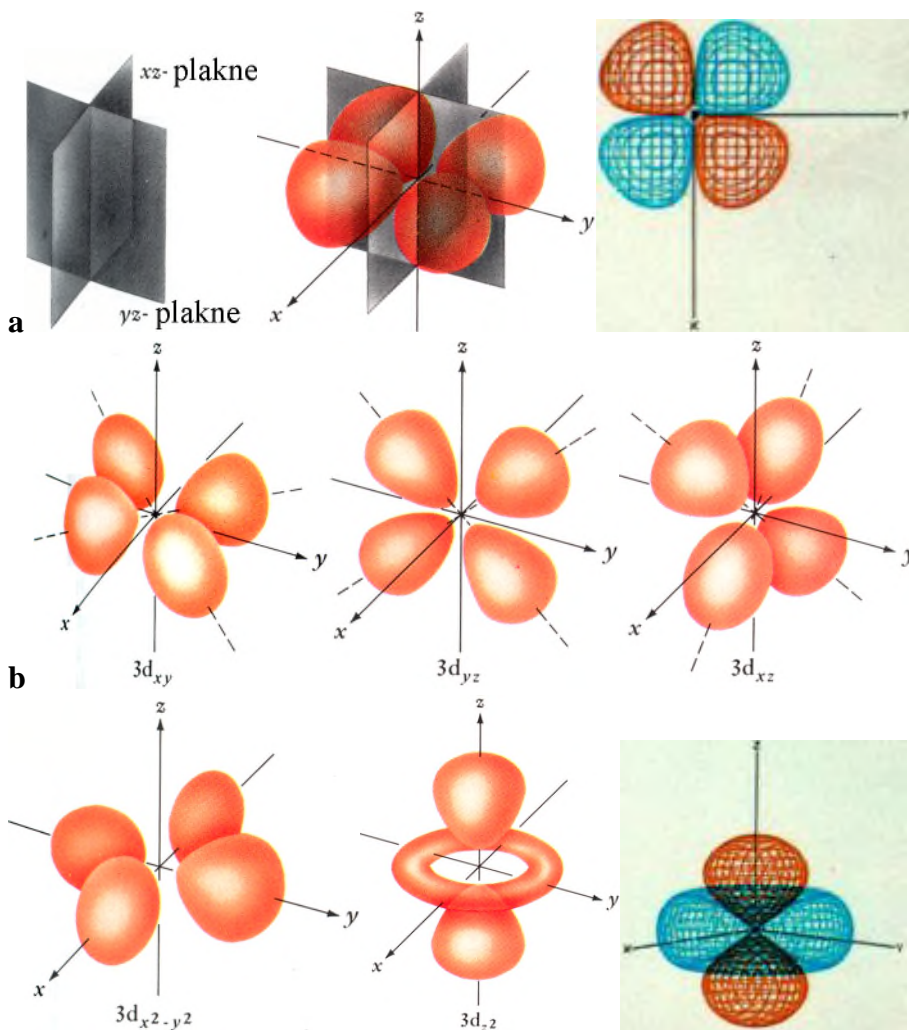
4- $\mathcal{L} = 3$ **trīs** mezglu punkti trešās oktāvas **do**.

Elektronu trīs dimensiju svārstībām atomā svārstību virstoņiem stāvviļņu klusēšanas vieta ir **mezglu plaknes virsma** elektronu orbitālēs **p**, **d** un **f**. **Mezglu plaknes** \mathcal{L} , kuras aprēķina kā galvenais kvantu skaitlis **n** mīnus **viens** (-1), sadala elektrona orbitāles **p**, **d** un **f** stāvviļņu reģionus vienādos apgabalos simetriski ap atoma kodolu. Atoma pozitīvi lādētais (+) kodols vienmēr atrodas vienlaicīgi visās **mezglu plaknēs** un veidojot centrālo simetriju saista-lokalizē negatīvi lādētās ($-$) elektrona orbitāles pie **mezglu plaknes virsmas**.

1s orbitālei atomā virstoņa nav \mathcal{L} ir **0**, otrajā periodā **2s** orbitālei ir pirmais virstonis **p** orbitāle \mathcal{L} ir **1**: \mathcal{L} ir **1 viena** mezglu plakne **p** orbitālei sadala telpu divos simetriskos svārstību reģionos, \mathcal{L} ir **2 divas** perpendikulāras mezglu plaknes **d** orbitālē sadala telpu četros simetriskos svārstību reģionos, \mathcal{L} ir **3 trīs** mezglu plaknes **f** orbitālē sadala telpu astoņos simetriskos svārstību reģionos.



2.attēls. **1s**, **2s** un **2p** elektrona orbitāles atomā. Pastāv trīs neatkarīgas **2p** orbitāles ar vienu mezglu plakni yz, xz un xy, kurās divi stāvviļņu reģioni **sarkanais** un **zilais**, līdzīgi, kā magnētam **ziemeļu** un **dienvidu** virziens.



3. attēls. Piecas **d** elektronu orbitāles:

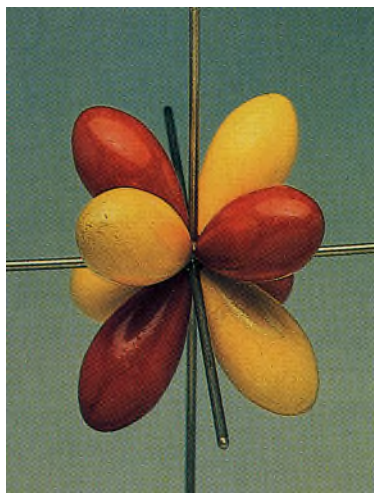
(a) xz un yz mezglu plaknes **d_{xy}** orbitālei. Apzīmējums **d** indeksā xy orbitālei nozīmē, ka četri orbitāles reģioni atdalītas ar mezglu plaknēm xz un yz atrodas xy plaknē.

(b) azimutālais kvantu skaitlis **L** visām piecām orbitālēm ir **L = 2** un katrai orbitālei ir divi perpendikulāras mezglu plaknes. Elektrona orbitālei **d_{z2}** ir koniskas klusējošās mezglu virsmas ar savstarpējo leņķi 90° uz kuras nav elektrona svārstību.

Planka konstante reiz frekvence $f = 540 \times 10^{12} \text{ Hz}$; ir viena mola zaļā fotona $\lambda = 555 \text{ nm}$ enerģija $E = h \times f = 540 \times 10^{12} \times 6.626070040 \times 10^{-34} = 3.58 \times 10^{-19} \text{ J/fotonu}$ Avogadro $N_A = 6.0223 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$ skaitlis vienam molam zaļās gaismas fotonu enerģija ir $E_{555\text{nm}} = 216 \text{ kJ/mol}$ vai vienam fotonam $E_{555\text{nm}} = 2,23 \text{ eV}$.

Masu attiecība $m_{\text{protons}}/m_e = 6,64476 \cdot 10^{-24} / 9,109534 \cdot 10^{-28} = 7294,3$ reizes


Planka konstante $h = 6.626070040(81) \times 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s}$ vai $h = 4.135667662(25) \times 10^{-15} \text{ eV}\cdot\text{s}$



4.attēls. Viena no septiņām **f** orbitālēm. Atzīmējamas ir trīs savstarpēji perpendikulāras mezglu plaknes (xy, yz un xz plakne), ko nosaka azimutālais kvantu skaitlis $\mathcal{L}=3$. Trīsdimensiju telpā elektronu orbitālei tas ir pēdējais iespējamais virstonis un latīņu vārda *finēre* (latviski *pēdējais*) pirmais burts **f** ir lietots kā pēdējais iespējamais azimutālais kvantu skaitlis $\mathcal{L}=3$ trīsdimensiju koordinātēs. Kopējais **f** orbitāļu skaits pēc magnētiskā kvantu skaitļa $m_{\mathcal{L}}$ variācijām

$-\mathcal{L}, \dots, 0, \dots, +\mathcal{L}$ ir septiņas **f** orbitāles ar septiņiem magnētiskiem kvantu skaitļiem: $m_{\mathcal{L}} = -3, m_{\mathcal{L}} = -2, m_{\mathcal{L}} = -1, m_{\mathcal{L}} = 0, m_{\mathcal{L}} = 1, m_{\mathcal{L}} = 2, m_{\mathcal{L}} = 3$.

Elektronam atomā ir septiņi pamattoņi ar galveniem kvantu skaitļiem $n = 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7$. Ķīmisko elementu atomu elektronu periodiskajā tabulā ir septiņi periodi septiņās rindās. Katrs periods sākas ar

metāliskā elementa atomu, kura ārējā enerģijas līmenī ir viens elektrons s  orbitālē **1s, 2s, 3s, 4s, 5s, 6s, 7s**, respektīvi, **H** ūdeņradi, **Li** litiju, **Na** nātriju, **K** kāliju, **Rb** rubīdiju, **Cs** cēziju, **Fr** franciju. Do mažora tonkārtas oktāvas tonkārtu veido septiņi pamattoņi **do, re, mi, fa, sol, la, si**, līdzīgi atomu uzbūvi dabā veido septiņi periodi ar septiņiem galveniem kvantu skaitļiem $n = 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7$.

Magnētiskais kvantu skaitlis $m_{\mathcal{L}}$ rāda iespējamo telpisko orientāciju skaitu. Katram zināmajam azimutālajam kvantu skaitlim \mathcal{L} magnētiskais kvantu skaitlis $m_{\mathcal{L}}$ var pieņemt vērtības intervālā $-\mathcal{L}, \dots, 0, \dots, +\mathcal{L}$.

Orbitālēm **s, p, d** un **f** ir zināmas telpiski orientētas orbitāles ar magnētiskajiem kvantu skaitļiem $m_{\mathcal{L}}$:
s, $\mathcal{L} = 0$: $m_{\mathcal{L}} = 0$ sfēriska orbitāle un pirmais burts **s** grieķu vārdā *sphaira* – *lode* latviski;

p, $\mathcal{L} = 1$: $m_{\mathcal{L}} = -1, m_{\mathcal{L}} = 0, m_{\mathcal{L}} = 1$ grieķu vārdā *prōtos* – latviski *pirmā* mezglu plakne daļa orbitāli uz divi;

d, $\mathcal{L} = 2$: $m_{\mathcal{L}} = -2, m_{\mathcal{L}} = -1, m_{\mathcal{L}} = 0, m_{\mathcal{L}} = 1, m_{\mathcal{L}} = 2$ grieķu vārdā *deuteros* – *otrais, divas* latviski 3.attēls.;

f, $\mathcal{L} = 3$: $m_{\mathcal{L}} = -3, m_{\mathcal{L}} = -2, m_{\mathcal{L}} = -1, m_{\mathcal{L}} = 0, m_{\mathcal{L}} = 1, m_{\mathcal{L}} = 2, m_{\mathcal{L}} = 3$ latīņu vārds *finēre* – *pēdējais* latviski.

d elektronu orbitālēm ir piecas telpiskas orientācijas ar azimutālo kvantu skaitli $\mathcal{L}=2$ fig.3. .

f elektronu orbitālēm ir septiņas telpiskas orientācijas ar azimutālo kvantu skaitli $\mathcal{L}=3$ fig.4. .

Galvenais kvantu skaitlis n raksturo elektrona enerģijas daudzumu atomā un atoma izmēru. Ja lielāks ir galvenais kvantu skaitlis, tad augstāka ir elektrona enerģija atomā un lielāks ir elektrona orbitāles izmērs.

Piemēram, IA grupas metālu rādiusi palielinās ja galvenais kvantu skaitlis, t.i., periods kļūst lielāks:

n = 1 **rH = 0,37 Å** pirmā perioda metāls ūdeņraža atoms,

n = 2 **rLi = 1,52 Å** otrā perioda metāls litijs atoms,

n = 3 **rNa = 1,86 Å** trešā perioda metāls nātrijs atoms,

n = 4 **rK = 2,31 Å** ceturtā perioda metāls kālijs atoms,

n = 5 **rRb = 2,44 Å** piektā perioda metāls rubīdija atoms,




n = 6 **rCs = 2,62 Å** sestā perioda metāls cēzija atoms,

n = 7 **rFr = 2,7 Å** septītā perioda metāls francija atoms,

Pauli princips: divi elektroni nevar atrasties vienā atoma orbitālē, ja tiem ir vienādi visi četri kvantu skaitļi: galvenais kvantu skaitlis n , azimutālais kvantu skaitlis \mathcal{L} , magnētiskais kvantu skaitlis $m_{\mathcal{L}}$ un

kvantu skaitlis **spins**. Ir divi kvantu skaitļi, **spini** $+1/2$ un $-1/2$ magnētiskie momenti virzītos augšup \uparrow un \downarrow .


Viena elektrona orbitālē var atrasties divi elektroni ar pretējiem **spiniem**. **Spins** ir magnētiskais

moments \uparrow , ko veido elektrona stāvvilnis. Elektrons ar pretēju **spinu** \downarrow  pievelkas ar anti paralēlo  **spinu**

vienā orbitālē kopā.

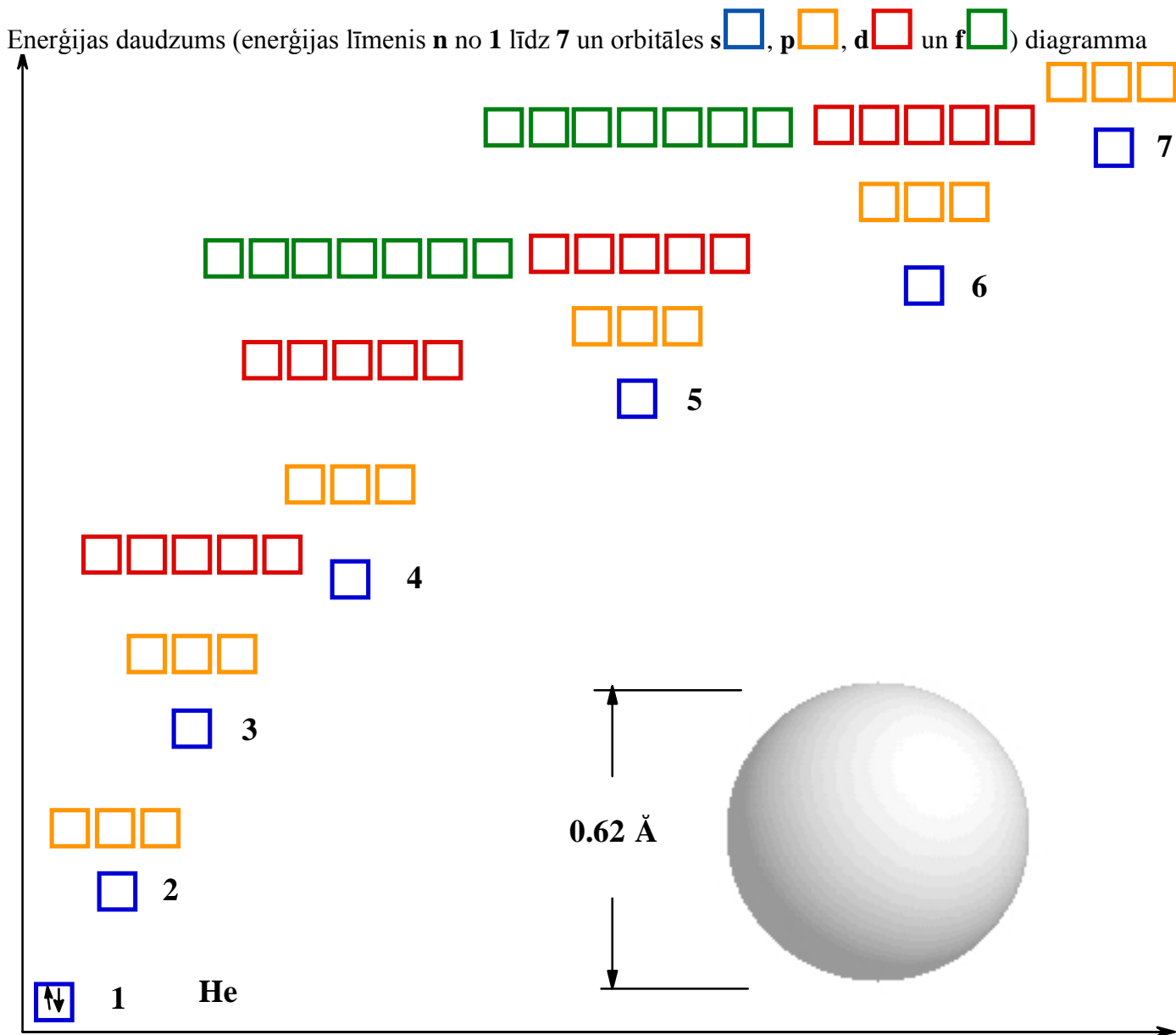
Divi elektroni var atrasties vienā orbitālē ar trim vienādiem kvantu skaitļiem :

galveno kvantu skaitli n , azimutālo kvantu skaitli \mathcal{L} , magnētisko kvantu skaitli $m_{\mathcal{L}}$, bet ar atšķirīgu ceturto kvantu skaitli **spinu**, kuri ir anti paralēli $+1/2$ un $-1/2$ vai \uparrow un \downarrow , kas ir maksimāli iespējamais skaitlis divi

elektroni vienā orbitālē .

Hunda likums 5.att. (elektrona enerģijas minimuma princips) nosaka elektronu orbitāļu aizpildīšanas kārtību no viszemākā enerģijas līmeņa orbitāles $1s$ $\uparrow\downarrow$ un secīgi elektrona enerģijas pieaugšanas virzienā. Ķīmisko elementu periodiskajā tabulā elementa atoms iekrāsots pēdējās aizpildītās orbitāles krāsā. Tas ir ārējā enerģijas līmenī vērtības elektrona orbitāles krāsā.

Elektrona s orbitāles ir zilā krāsā \square , p orbitāles ir dzeltenā krāsā \square , d orbitāles ir sarkanā krāsā \square , un f orbitāles ir zaļā krāsā \square .



5.Attēls. Relatīvais enerģijas daudzums elektronam atoma orbitālēs palielināšanās kārtībā sākot no pirmā perioda ar kvantu skaitli $n=1$ pirmo $1s$ orbitāli He hēlija $\uparrow\downarrow$ un H ūdeņraža $+1/2$ \uparrow elementa atomiem atbilstoši enerģijas minimuma principam.