

2. КВАНТОВЫЕ ЧИСЛА

Уравнение Шрёдингера, как любое дифференциальное уравнение 2-го порядка, имеет бесчисленное множество решений. Выбрать решения, имеющие физический смысл, можно только при соблюдении определенных ограничений. Каждому «реальному» решению будет соответствовать атомная орбиталь с определенной энергией, формой и положением в пространстве. Ограничениями, позволяющими получить правильные решения уравнения Шрёдингера, являются **квантовые числа**. Четыре квантовых числа - *главное, орбитальное, магнитное и спиновое* – введены в теорию условно, для более точного описания состояния электрона в атоме.

Главное квантовое число (n) определяет энергию и размеры атомной орбитали. Оно соответствует номеру энергетического уровня, на котором находится электрон. Главное квантовое число принимает целочисленные значения : $n = 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, \dots$. Чем больше n , тем выше энергия электрона.

ПРИМЕР 1. Главное квантовое число электрона $n = 4$. Это значит, что электрон находится на 4-м энергетическом уровне.

Орбитальное квантовое число (l) определяет форму атомной орбитали, т.е. характеризует энергетический подуровень, на котором находится электрон. Орбитальное квантовое число принимает целочисленные значения *от 0 до $(n-1)$* .

Т.е. $l = 0 \dots (n-1)$. Например, (см. таблицу)

Значение l	0	1	2	3	4
Энергетический подуровень	<i>s</i>	<i>p</i>	<i>d</i>	<i>f</i>	<i>g</i>

ПРИМЕР 2. Если главное квантовое число $n = 3$, значит орбитальное квантовое число может принимать следующие значения: $l = 0, 1, 2$. Т.е. электрон с главным квантовым числом равным трем может находиться, соответственно, на *s*-, *p*- или *d* - подуровне 3-го энергетического уровня.

Магнитное квантовое число (m) определяет ориентацию атомной орбитали в пространстве. Магнитное квантовое число принимает целочисленные значения *от $-l$ до $+l$* , включая ноль. (Т.е. $m = -l \dots +l$).

ПРИМЕР 3. Если орбитальное квантовое число $l = 1$, значит магнитное квантовое число может принимать следующие значения: $m = -1, 0, 1$.

Физический смысл этого распределения следующий. Электрон с орбитальным квантовым числом равным единице находится на *p*- подуровне, который содержит три *p*-орбитали. В отсутствие внешнего магнитного поля все орбитали одного подуровня имеют одинаковую энергию. Под действием внешнего магнитного поля происходит расщепление энергии подуровней, вследствие чего три *p*- орбитали будут по-разному ориентированы в пространстве, а именно, по направлениям декартовых осей координат - x , y и z .

(p_x , p_y , p_z). Таким образом, электрону, находящемуся на *p_x*- орбитали, можно условно присвоить значение $m = 1$, электрону *p_y*- орбитали – значение $m = 0$, а электрону *p_z*- орбитали - значение $m = -1$.

Спиновое квантовое число (s) или, иначе, **спин** (от англ. spin – вращение) определяет собственный момент вращения электрона. Спиновое квантовое число принимает только два значения: $+1/2$ или $-1/2$. Образно говоря, электрон как бы вращается вокруг своей оси по часовой стрелке или против нее. В зависимости от этого его спин поло-

жителен или отрицателен. Электроны с антипараллельными спинами, находящиеся на одной атомной орбитали, называются спаренными и обозначаются противоположно направленными стрелками - $\uparrow\downarrow$.

Несмотря на то, что квантовые числа могут принимать целый ряд значений, следует помнить о том, что каждому отдельному электрону соответствует только 4 квантовых числа: одно главное, одно орбитальное, одно магнитное и одно спиновое.

ПРИМЕР 4.

1-й e^-	-	$n = 2, l = 0, m = 0, s = 1/2$
2-й e^-	-	$n = 2, l = 0, m = 0, s = -1/2$
3-й e^-	-	$n = 2, l = 1, m = 1, s = 1/2$
4-й e^-	-	$n = 2, l = 1, m = 0, s = 1/2$

В данном примере рассмотрены четыре электрона, каждый из которых обладает определенным набором квантовых чисел. Все эти электроны находятся на 2-м энергетическом уровне ($n = 2$). 1-й и 2-й электроны находятся на 2s-подуровне ($l=0$), на одной s-орбитали, и являются спаренными ($s = 1/2$ и $s = -1/2$).

3-й и 4-й электроны находятся на 2p-подуровне ($l=1$), но занимают разные p-орбитали ($m = 1$ и $m = 0$), их спиновые квантовые числа одинаковы, что возможно для электронов разных орбиталей.