



ATOMIC MODELS

جامعة ساوة

كلية التقنية الهندسية

قسم هندسة التبريد والتكييف

المرحلة/ الاولى

ATOMIC MODELS

- **Classical Mechanics** can not explain many phenomena involving electrons in solid materials.

الميكانيك التقليدي: لا يفسر كثيراً من الظواهر التي تتضمن حركة الالكترونات في المواد الصلبة.

- **Quantum Mechanics** establishes a set of laws that explain the atomic and sub-atomic behavior.

ميكانيك الكم: يؤسس لمجموعة من القوانين التي تفسر السلوك الذري ودون الذري.

Bohr Model

- Basic and simplified model. نموذج مبسط وأساسي.
- Electrons revolve around the atomic Nucleus. تدور الالكترونات حول النواة.
- Energy of electrons is quantized. طاقة الالكترونات مكممة.
- Orbitals are discrete. المدارات منفصلة.
- Electrons change orbitals according to their تغير الالكترونات مداراتها وفقاً لـ

مستوى أو حالة الطاقة. energy level or state.

- Electron changing level = Quantum Jump. يسمى تغيير الالكترون لمستواه بالقفزة الكمومية.

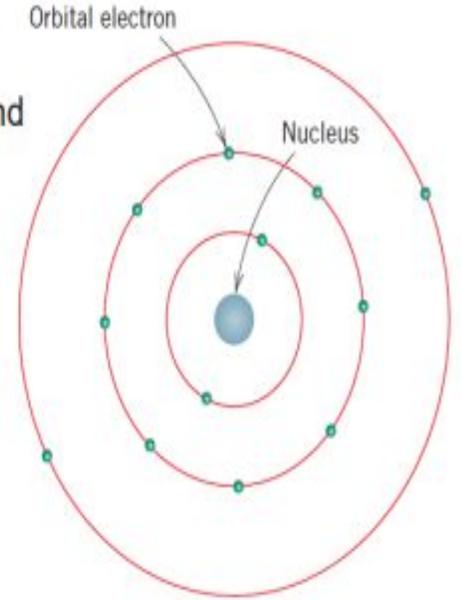


Figure 2.1 Schematic representation of the Bohr atom.

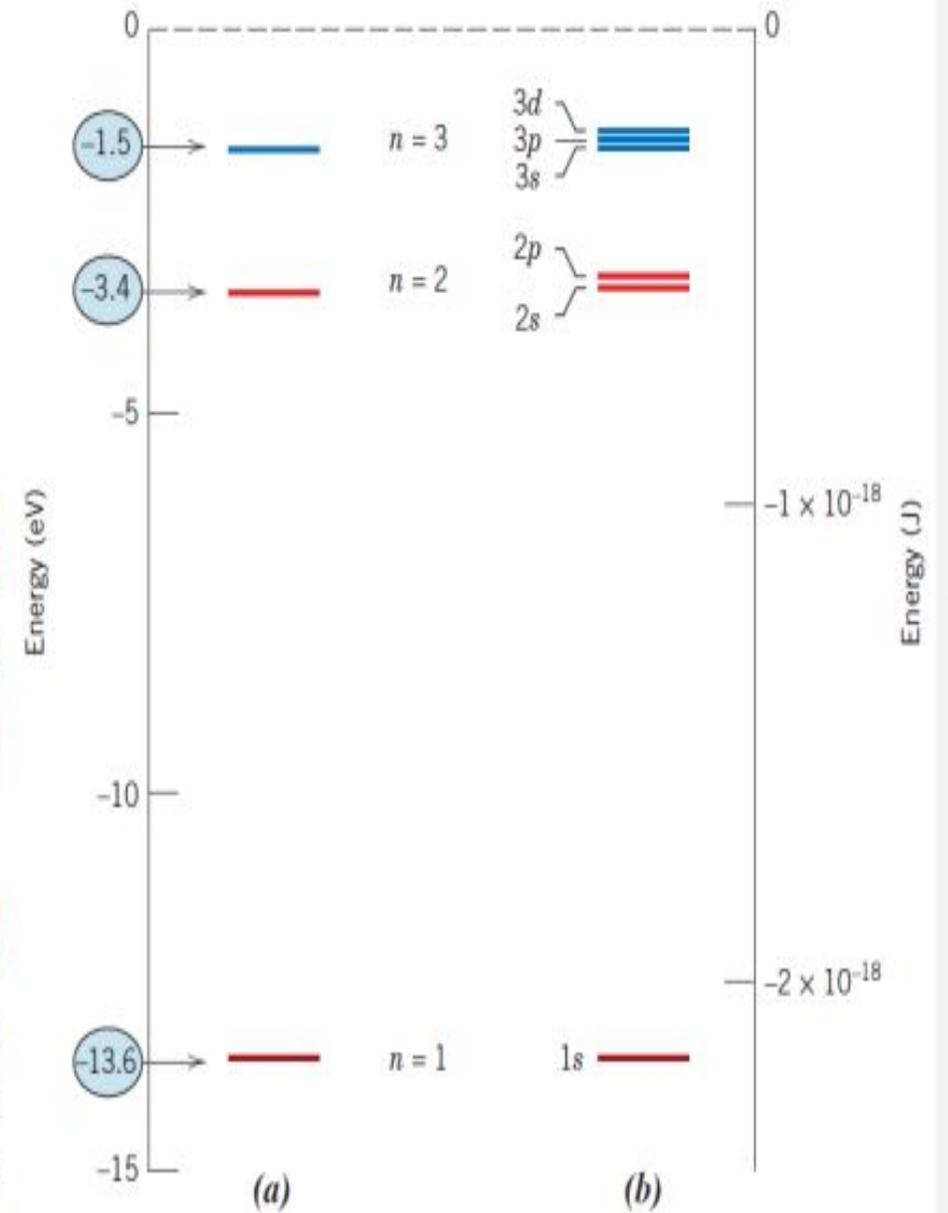
Figure 2.2 (a) The first three electron energy states for the Bohr hydrogen atom. (b) Electron energy states for the first three shells of the wave-mechanical hydrogen atom. (Adapted from W. G. Moffatt, G. W. Pearsall, and J. Wulff, *The Structure and Properties of Materials*, Vol. I, *Structure*, John Wiley & Sons, 1964. Reproduced with permission of Janet M. Moffatt.)

(a) أول ثلاثة مستويات طاقة لذرة الهيدروجين وفق نموذج بور.

هنا نرى مستويات الطاقة منفصلة ومكممة، وهي تمثل المدارات (الأغلفة) التي تدور بها الإلكترونات حول النواة.

(b) أول ثلاثة مستويات طاقة لذرة الهيدروجين وفق للنموذج الموجي - الميكانيكي.

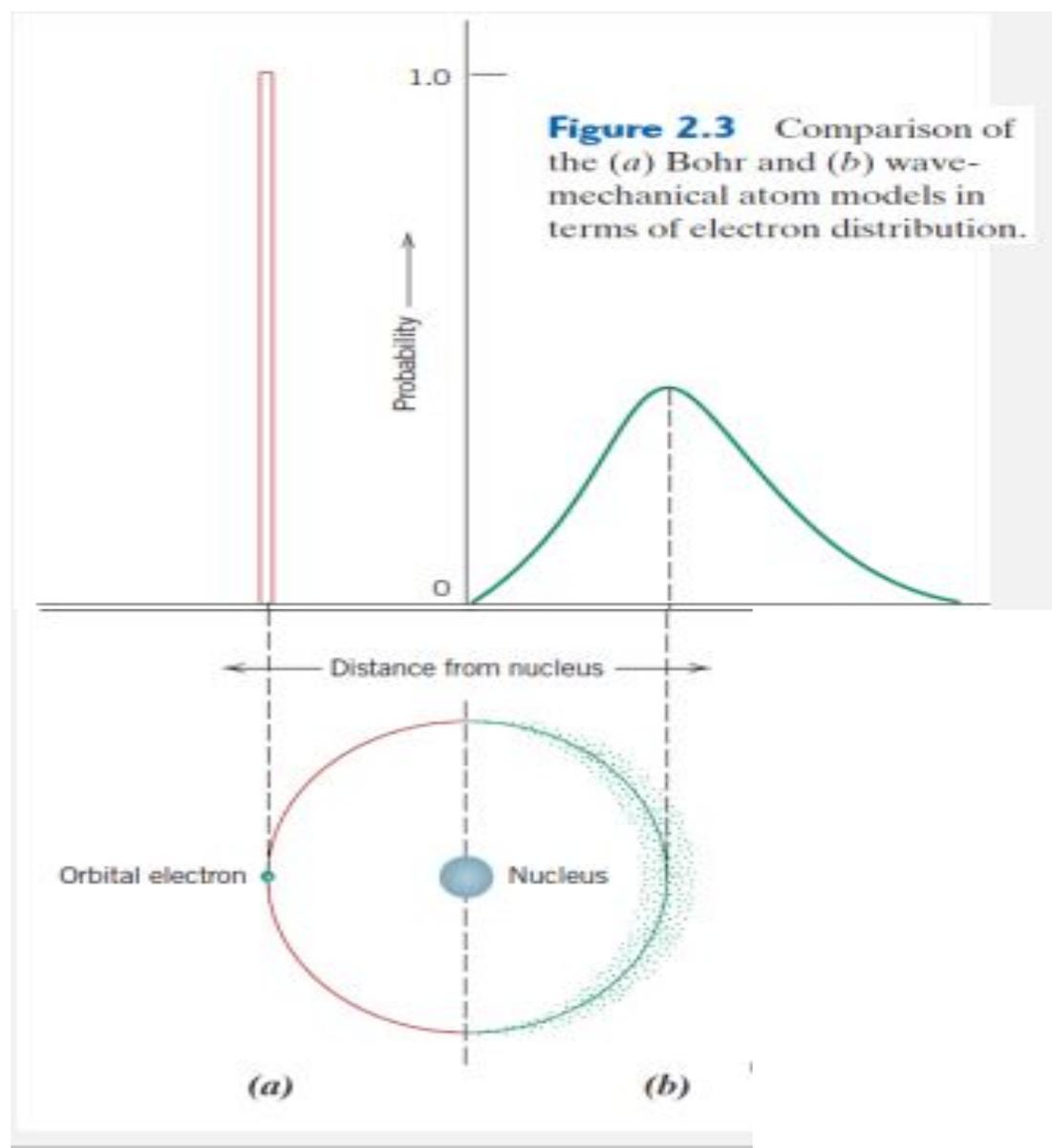
هذا النموذج هو صيغة معدلة من نموذج بور، حيث نلاحظ وجود المدارات الفرعية ضمن كل مدار رئيسي.



Wave-Mechanical Model

- This model combines the wave and particle behavior to explain the electron behavior.
- Position of Electron is not Discrete.
- Position = Probability of being at various locations around the nucleus.
- Position is described by Probability distribution or Electron Cloud.

يعطي السلوك الموجي للإلكترون تقديراً لاحتمال وجود الإلكترون ضمن حدود موجية، وهذا السلوك هو بديل لنظام المدارات الثابتة التي افترضه بور في نظريته. وبدلاً من وصف الإلكترون بأنه جسيم يدور في مدار ذي نصف قطر محدد، فإن النموذج الجديد يصف حركة الإلكترون بدلالة الدالة الموجية التي يطلق عليها اسم المدار أو الأوربيتال.



quantum number

Quantum Numbers

أعداد الكم

In wave mechanics, every electron in an atom is characterized by four parameters called **quantum numbers**. The size, shape, and spatial orientation of an electron's probability density (or *orbital*) are specified by three of these quantum numbers. Furthermore, Bohr energy levels separate into electron subshells, and quantum numbers dictate the number of states within each subshell. Shells are specified by a *principal quantum number* n , which may take on integral values beginning with unity; sometimes these shells are designated by the letters *K, L, M, N, O*, and so on, which correspond, respectively, to $n = 1, 2, 3, 4, 5, \dots$, as indicated in Table 2.1. Note also that this quantum number, and it only, is also associated with the Bohr model. This quantum number is related to the size of an electron's orbital (or its average distance from the nucleus).

The second (or *azimuthal*) quantum number, l , designates the subshell. Values of l are restricted by the magnitude of n and can take on integer values that range from $l = 0$ to $l = (n - 1)$. Each subshell is denoted by a lowercase letter—an *s, p, d*, or *f*—related to l values as follows:

<i>Value of l</i>	<i>Letter Designation</i>
0	<i>s</i>
1	<i>p</i>
2	<i>d</i>
3	<i>f</i>

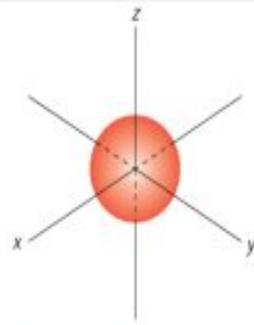


Figure 2.4
Spherical shape of an s electron orbital.

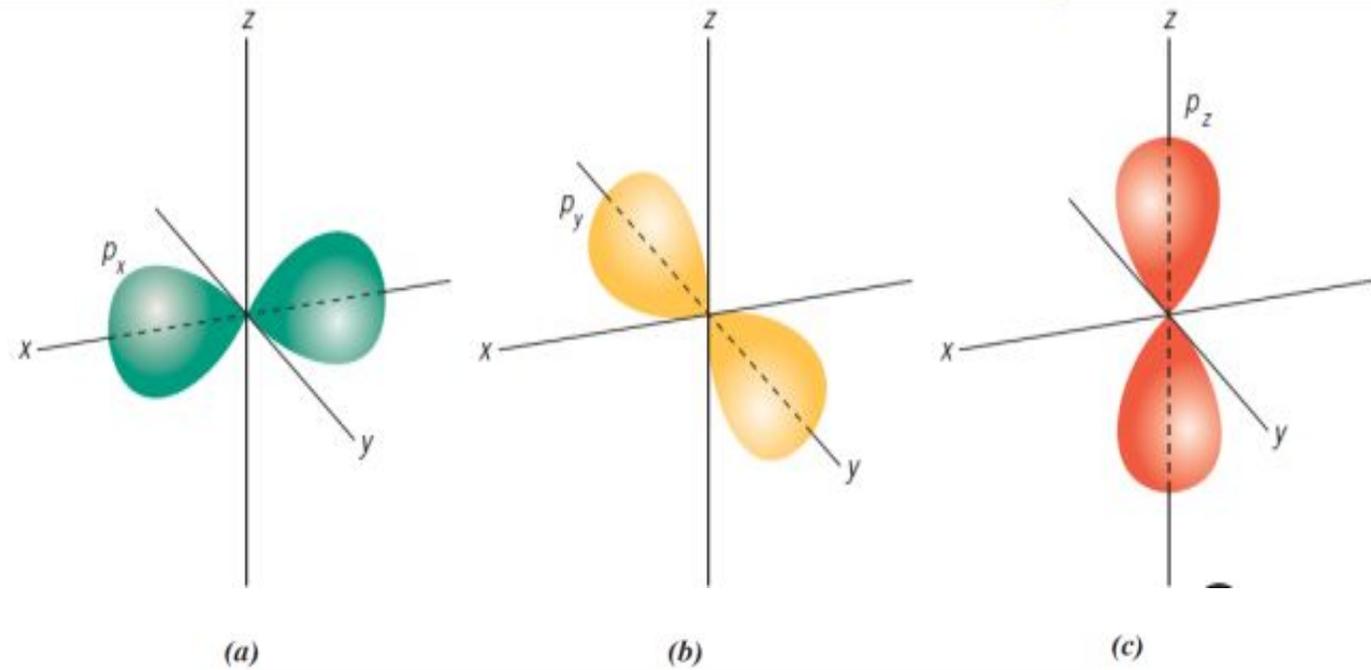
Furthermore, electron orbital shapes depend on l . For example s orbitals are spherical and centered on the nucleus (Figure 2.4). There are three orbitals for a p subshell (as explained next); each has a nodal surface in the shape of a dumbbell (Figure 2.5). Axes for these three orbitals are mutually perpendicular to one another like those of an x - y - z coordinate system; thus, it is convenient to label these orbitals p_x , p_y , and p_z (see Figure 2.5). Orbital configurations for d subshells are more complex and are not discussed here.

تتعدد أشكال الأوربيتالات على قيمة l ، فمثلاً يكون شكل الأوربيتال s ($l=0$) كروياً كما في الشكل 2.4.

أما الأوربيتال p فيملك ثلاثة أشكال على هيئة الجرس كما موضحة في الشكل 2.5، كل أوربيتال منها يتعامد على الآخر بما يتوافق مع نظام الإحداثيات x - y - z .

أشكال الأوربيتالات d و f خارج نطاق دراستنا.

Figure 2.5
Orientations and shapes of (a) p_x , (b) p_y , and (c) p_z electron orbitals.



The number of electron orbitals for each subshell is determined by the third (or magnetic) quantum number, m_l ; m_l can take on integer values between $-l$ and $+l$, including 0. When $l = 0$, m_l can only have a value of 0 because $+0$ and -0 are the same. This corresponds to an s subshell, which can have only one orbital. Furthermore, for $l = 1$, m_l can take on values of -1 , 0 , and $+1$, and three p orbitals are possible. Similarly, it can be shown that d subshells have five orbitals, and f subshells have seven. In the absence of an external magnetic field, all orbitals within each subshell are identical in energy. However, when a magnetic field is applied, these subshell states split, with each orbital assuming a slightly different energy. Table 2.1 presents a summary of the values and relationships among the n , l , and m_l quantum numbers.

Associated with each electron is a *spin moment*, which must be oriented either up or down. Related to this spin moment is the fourth quantum number, m_s , for which two values are possible: $+\frac{1}{2}$ (for spin up) and $-\frac{1}{2}$ (for spin down).

Thus, the Bohr model was further refined by wave mechanics, in which the introduction of three new quantum numbers gives rise to electron subshells within each shell. A comparison of these two models on this basis is illustrated, for the hydrogen atom, in Figures 2.2a and 2.2b.

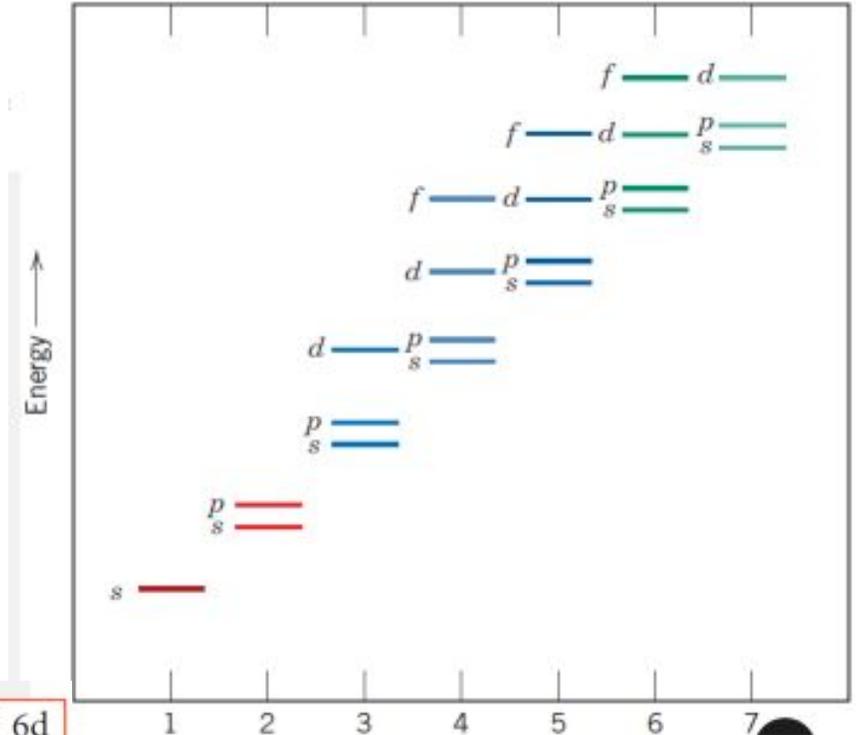
A complete energy level diagram for the various shells and subshells using the wave-mechanical model is shown in Figure 2.6. Several features of the diagram are worth noting. First, the smaller the principal quantum number, the lower the energy level; for example, the energy of a $1s$ state is less than that of a $2s$ state, which in turn

is lower than that of the 3s. Second, within each shell, the energy of a subshell level increases with the value of the l quantum number. For example, the energy of a 3d state is greater than that of a 3p, which is larger than 3s. Finally, there may be overlap in energy of a state in one shell with states in an adjacent shell, which is especially true of d and f states; for example, the energy of a 3d state is generally greater than that of a 4s.

Figure 2.6 Schematic representation of the relative energies of the electrons for the various shells and subshells.

يوضح هذا الشكل مخططاً لمستويات الطاقة للأغلفة الرئيسية والثانوية حيث نلاحظ ما يلي:

1. يتناسب مقدار الطاقة طردياً مع قيمة الغلاف الرئيسي n ، فمثلاً طاقة الغلاف 2s أعلى من طاقة 1s وهكذا.
2. ضمن الغلاف الرئيسي الواحد، تزداد طاقة الغلاف الثانوي مع تزايد قيمة l ، فمثلاً طاقة الغلاف 3d أعلى من طاقة 3p وهي بدورها أعلى من طاقة 3s.
3. قد نرى تداخلاً في مستوى الطاقة لغلاف رئيسي ما مع الغلاف المجاور له، ويلاحظ ذلك خصوصاً في الأغلفة d و f . فمثلاً طاقة الغلاف 3d أعلى من طاقة 4s.



1s 2s 2p 3s 3p 4s 3d 4p 5s 4d 5p 6s 4f 5d 6p 7s 5f 6d