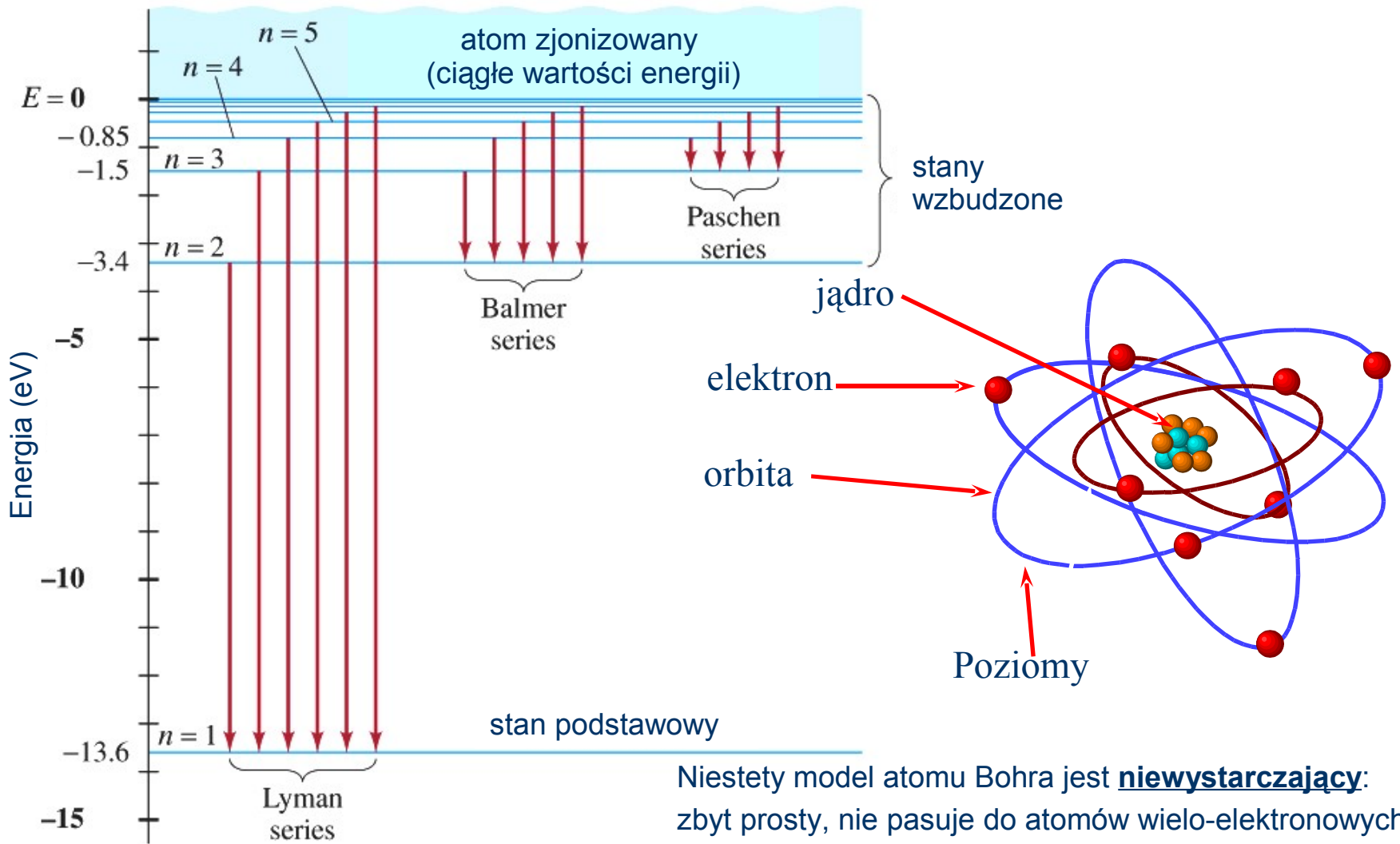


Budowa atomów

- Atomy wieloelektronowe
- Układ okresowy pierwiastków

Model atomu Bohra



Niestety model atomu Bohra jest **niewystarczający**: zbyt prosty, nie pasuje do atomów wielo-elektronowych. Mimo tego wskazuje on, że elektrony w atomie przyjmują pewne stacjonarne (trwałe) „stany energetyczne”.

Atom wodoru wg mechaniki kwantowej

Budowę atomów dokładniej daje się opisać metodami mechaniki kwantowej!

Mechanika kwantowa modeluje zachowanie się obiektów w skali „mikro” - w skali atomowej.

Oto opis w jaki sposób mechanika kwantowa opisuje atom wodoru:

Założenia

- ♦ Atom wodoru – jeden elektron krążący wokół jądra (jeden proton)
- ♦ Energię potencjalną układu elektron(-e)-proton(+e) opisuje funkcja:

$$U(r) = - \frac{e^2}{4\pi \epsilon_0 r}$$

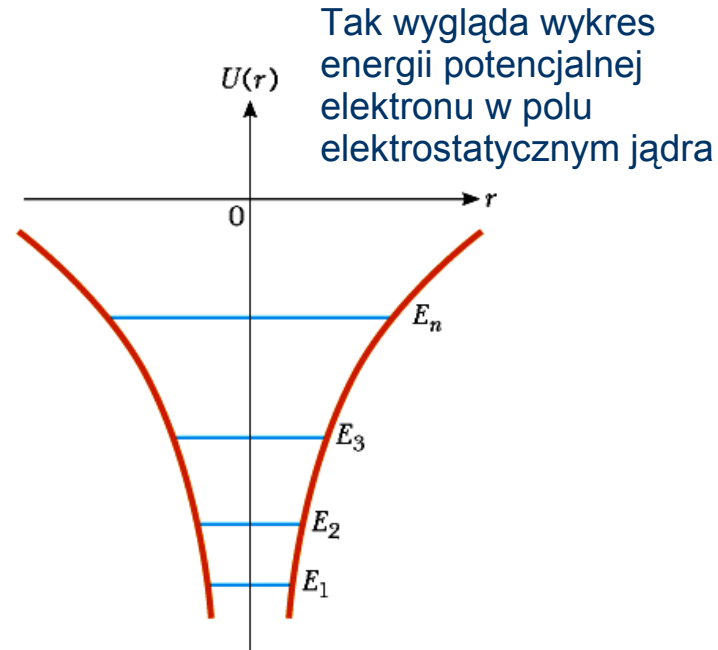
- ♦ Wstawiamy to do stacjonarnego równania Schrodingera

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla^2 \psi(x, y, z) = \left[E + \frac{e^2}{4\pi \epsilon_0 r} \right] \psi(x, y, z)$$

- ♦ Rozwiązujemy równanie różniczkowe – szukamy rozwiązań, czyli funkcji falowych które spełniają to równanie.
- ♦ Trzeba rozpatrzyć problem trójwymiarowo – najlepiej we współrzędnych sferycznych (r – odległość od jądra, kąty θ i ϕ określające położenie kątowe w przestrzeni). Szukamy f. falowych w postaci:

$$\psi(r, \theta, \phi) = R(r) \Theta(\theta) \Phi(\phi)$$

Interesuje nas szczególnie część radialna funkcji falowej – to ona niesie informację o tym jak daleko elektron może znajdować się od jądra w danym stanie kwantowym.



Atom wodoru wg mechaniki kwantowej

Rezultaty i wnioski z rozwiązań r.S. dla atomu wodoru

Funkcje falowe ,które spełniają r.S. dają następujące informacje i wyniki :

- ♦ Energia elektronu wynosi (jest skwantowana):

$$E = - \frac{m_e e^4}{(4\pi \varepsilon_0)^2 2 \hbar n^2}$$

Wynik ten zgadza się z wynikiem uzyskanym przez Bohra
– energie stanów atomu można opisać (numerować)

główna liczba kwantowa

$$n = 1,2,3\dots$$

- ♦ Ale funkcje falowe opisujące stany elektronu wymagają dodatkowo podania jeszcze 2 liczb kwantowych!!!

orbitalna liczba kwantowa

$$l = 0,1,2,3\dots n-1$$

magnetyczna liczba kwantowa

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

- ♦ Dlatego funkcje falowe indeksuje się $\Psi_{n l m}$
- ♦ Dla określenie w jakim stanie kwantowym znajduje się elektron wystarczy wiedzieć jakie są te liczby kwantowe **$n l m$** (i jeszcze **s** – ale o tym później) !!!

Ponieważ dla danej wartości **n** istnieje kilka różnych wartości **l** i **m** to zdarza się, że różnym stanom odpowiada ta sama energia – **stany zdegenerowane**. Stopień zdegenerowania = **$2 n^2$** = liczba możliwych stanów o konkretnym **n**

Atom wodoru wg mechaniki kwantowej

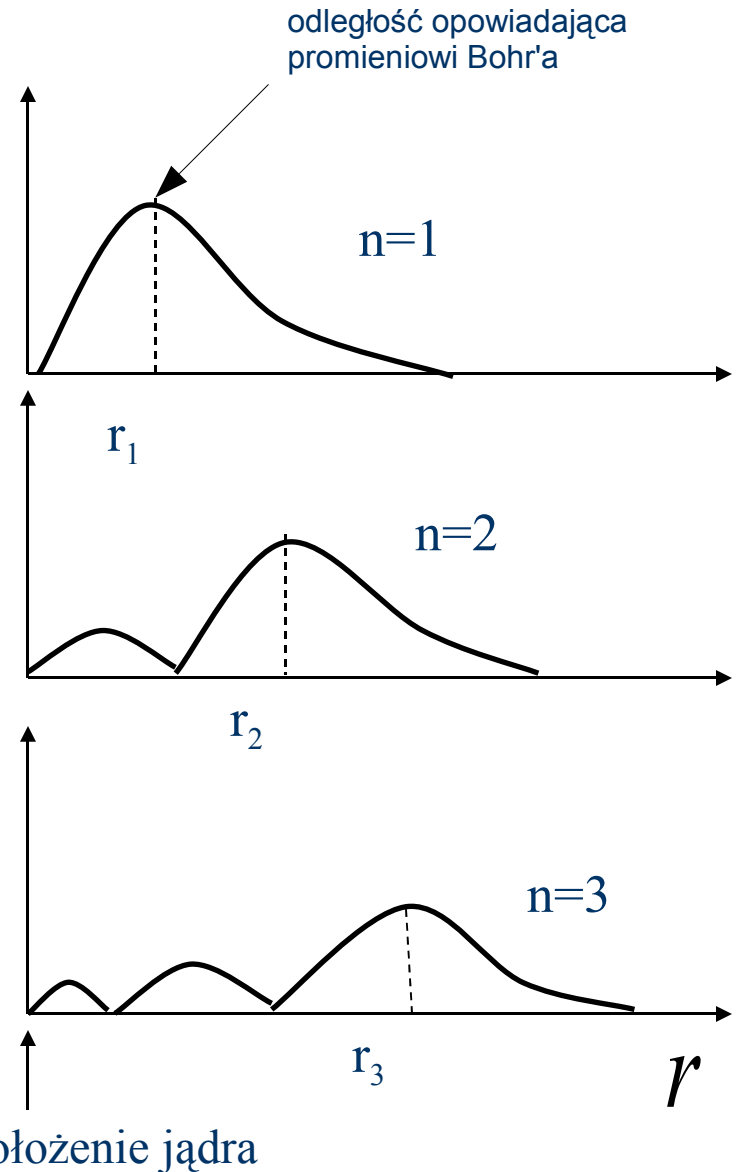
Jeśli weźmiemy pod uwagę tylko radialną część f.falowej to:

$$4\pi r^2 |R_{nl}|^2$$

możemy policzyć **radialną gęstość prawdopodobieństwa położenia** dla elektronu w atomie wodoru dla różnych n i dla $l = 0, m = 0$

Prawdopodobieństwo położenia elektronu wzdłuż r jest różne od zera prawie dla wszystkich r

- *elektron może znajdować się w dowolnej odległości od jądra, nie ma dla niego obszarów zupełnie niedozwolonych*
- *ale najbardziej prawdopodobne jest że znajdzie się z okolicy orbity znanej z teorii Bohra*



Liczby kwantowe elektronów w atomie wodoru

n = główna liczba kwantowa, określa poziom energetyczny
(określa średni promień orbity)

$n = 1, 2, 3 \dots$

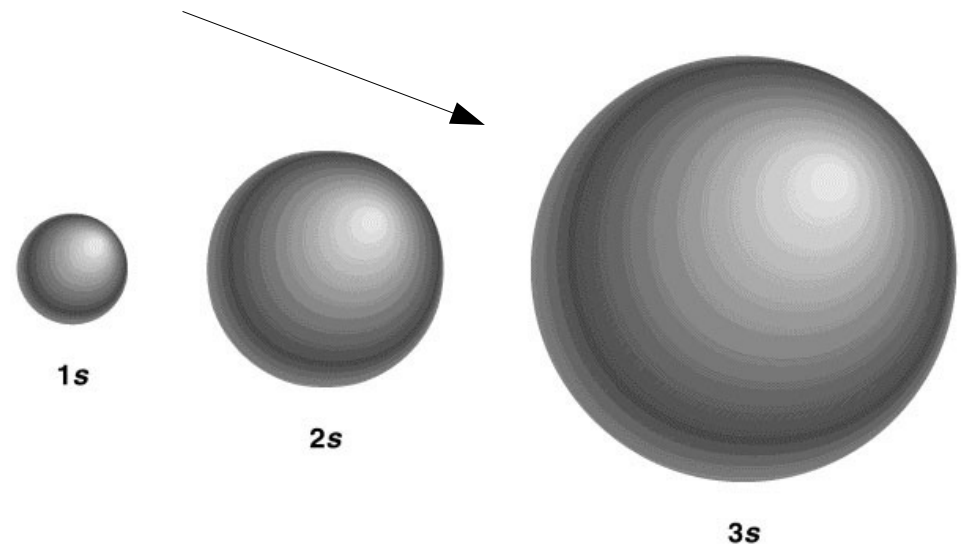
(symbolicznie określa się jako K, L, M.....)

Powierzchnie, na których prawdopodobieństwo obecności elektronu jest największe nazywa się to **orbitalami**

Oto przykład kształtu orbitali gdy $n = 1, 2, 3$

Ale uwaga!

Taki kształt mają orbitale tylko gdy pozostałe liczby kwantowe wynoszą 0 !!! Jeśli nie to kształty są inne!!!



Widać, że dla tych prostych przypadków kształt orbitali (sfera) pokrywa się z modelem Bohra.

Jeśli elektron posiada liczbę kwantową n to znaczy że należy do określonej **POWŁOKI n**

Atom wodoru wg mechaniki kwantowej

l = orbitalna liczba kwantowa (określa kształt orbity)

$$l = 0, 1, 2, \dots (n - 1)$$

$$l = s, p, d, f \dots$$

zakres zmienności tej liczby jest ograniczony

moment pędu elektronu jest "skwantowany" zgodnie ze wzorem : $L_l = \sqrt{l(l+1)} \frac{h}{2\pi}$

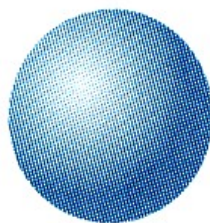
ze względów historycznych zamiast cyfr używane są litery

Stan o $n=1$ i $l=0$ nazywany jest stanem **1s**

Stan o $n=1$ i $l=1$ nazywany jest stanem **1p**

Stan o $n=1$ i $l=2$ nazywany jest stanem **1d**

Oto przykład kształtu orbitali gdy $n = 1$ oraz $l = 0, 1, 2$



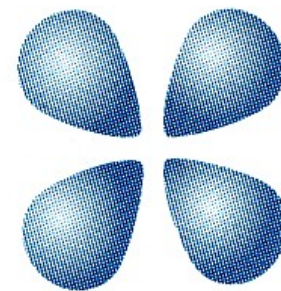
$$l = 0$$

s



$$l = 1$$

p



$$l = 2$$

d

Uwaga!

Taki kształt mają orbitale tylko gdy liczba kwantowa $n = 1$!!!
Jeśli nie to kształty są inne!!!

Jeśli elektron posiada liczbę kwantową n i l to znaczy że należy do określonej **POWŁOKI n** i **POD-POWŁOKI l**

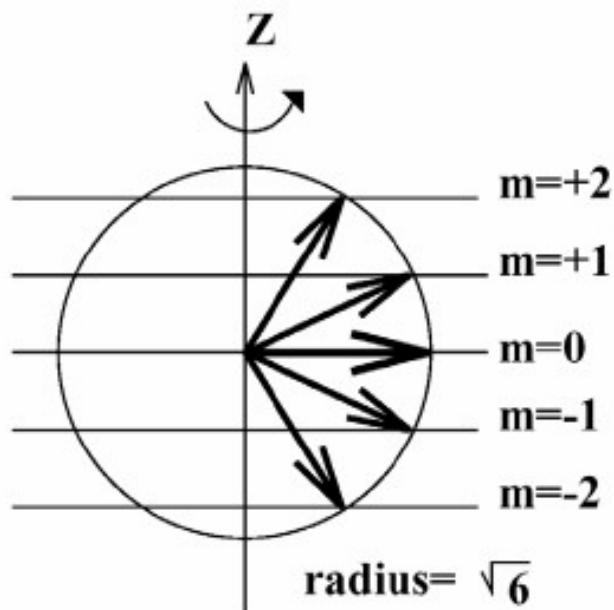
Atom wodoru wg mechaniki kwantowej

m_l = magnetyczna liczba kwantowa

z-owa składowa momentu pędu l (określa orientację orbity)

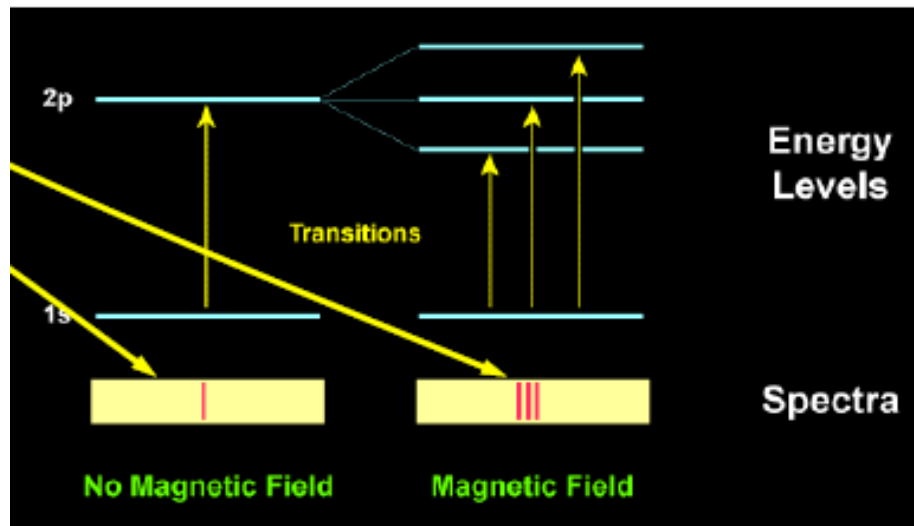
$$m_l = -l, \dots, -2, -1, 0, 1, 2, \dots, +l$$

np. dla $l = 2$ orientacja momentu pędu może wyglądać :



Istnieją tylko takie orientacje wektora momentu pędu elektronu, przy których rzut tego wektora na kierunek Z zewnętrznego pola magnetycznego przyjmuje wartości: $L_{lZ} = m_l \frac{h}{2\pi}$

Doświadczalnie można to potwierdzić (efekt Zeemana)

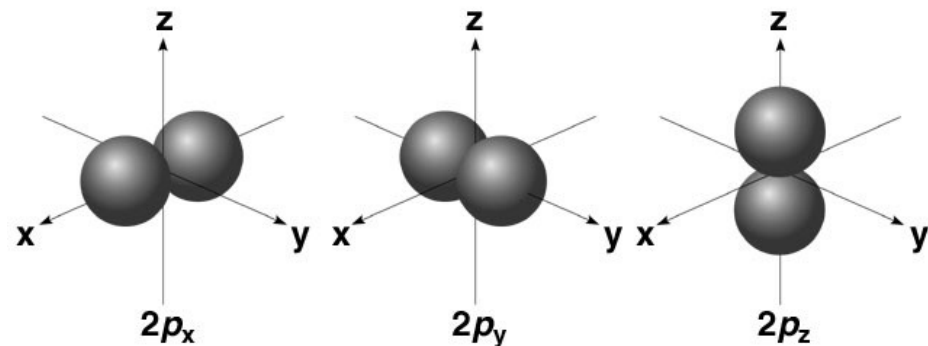


Atom wodoru wg mechaniki kwantowej

m_l = magnetyczna liczba kwantowa

z-owa składowa momentu pędu l (określa orientację orbity)

$$m_l = -l, \dots, -2, -1, 0, 1, 2, \dots, +l$$



przykład: $n=2$, $l=1$

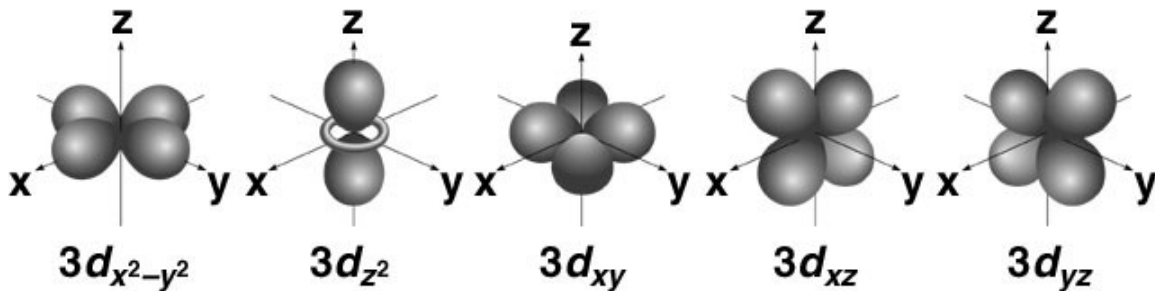
(2p)

$$m = -1, 0, 1$$

przykład: $n=3$, $l=2$

(3d)

$$m_l = -2, 1, 0, 1, 2$$



Atom wodoru wg mechaniki kwantowej

m_s = magnetyczna liczba spinowa

$$m_s = -1/2, \quad 1/2$$

- do pełnego opisu stanu elektronu potrzebna jest ta liczba
- własność ta nie wynika bezpośrednio z równania Schrodingera,
- własność ta jest integralna dla każdej cząstki – elektrony należą do grupy cząstek które mają spin połówkowy – są tzw. „fermionami”
- elektrony mają własny spinowy moment pędu
- elektrony mają własny moment magnetyczny właśnie związany ze spinem (oprócz tego posiadają orbitalny moment magnetyczny związany z ruchem wokół jądra atomowego)
- Spin elektronu został potwierdzony doświadczalnie (Stern, Gerlach 1922, Phipps Taylor 1927)

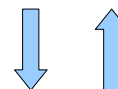
spinowy moment pędu elektronu wynosi :

$$L_s = \sqrt{s(s+1)} \frac{h}{2\pi}$$

gdzie s jest *spinową liczbą kwantową* (dla fermionów $s=1/2$).

Istnieją tylko takie orientacje wektora spinowego momentu pędu elektronu, przy których rzut tego wektora na kierunek Z zewnętrznego pola magnetycznego przyjmuje wartości:

$$L_{sZ} = m_s \frac{h}{2\pi}$$



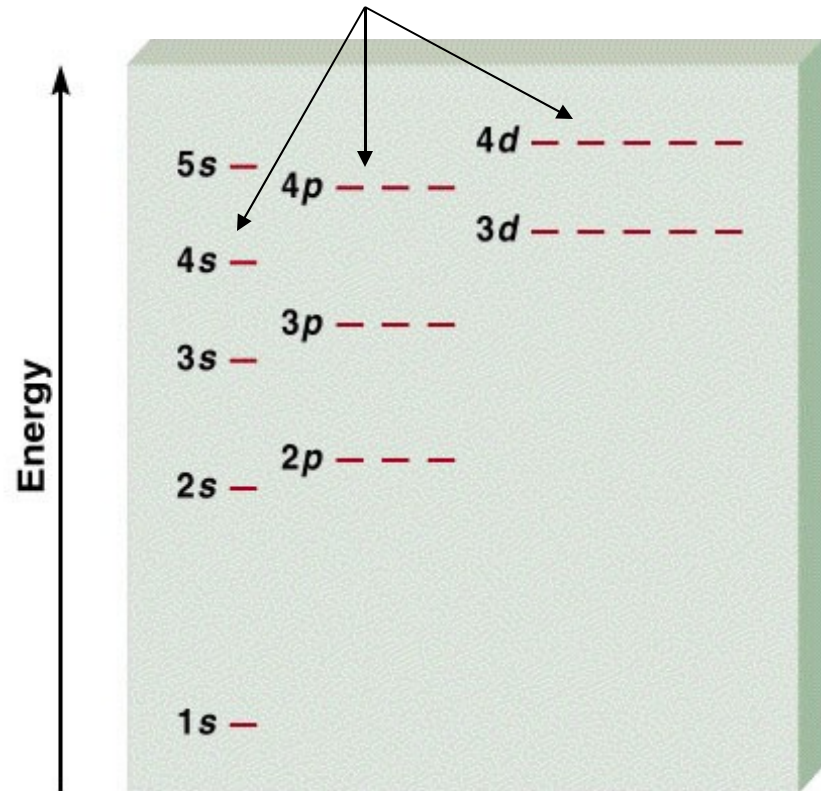
Atomy wieloelektronowe

- ◆ mają więcej niż jeden elektron w atomie
- ◆ do energii każdego z elektronów wchodzi :
 - energia kinetyczna
 - energia potencjalna pochodząca od oddziaływania elektron - jądro atomowe
 - energii potencjalna pochodzącej od oddziaływania elektron – inne elektrony
- ◆ matematycznie nie możliwe jest dokładne rozwiązanie r. Schrodingera - problem: jak uwzględnić odpychające oddziaływanie z innymi elektronami
 - stosuje się pewne metody przybliżone, wprowadzając np. efektywny ładunek jądra atomowego, tzw. pole samo-uzgodnione
 - wyniki oblicza się metodami numerycznymi

Atomy wieloelektronowe

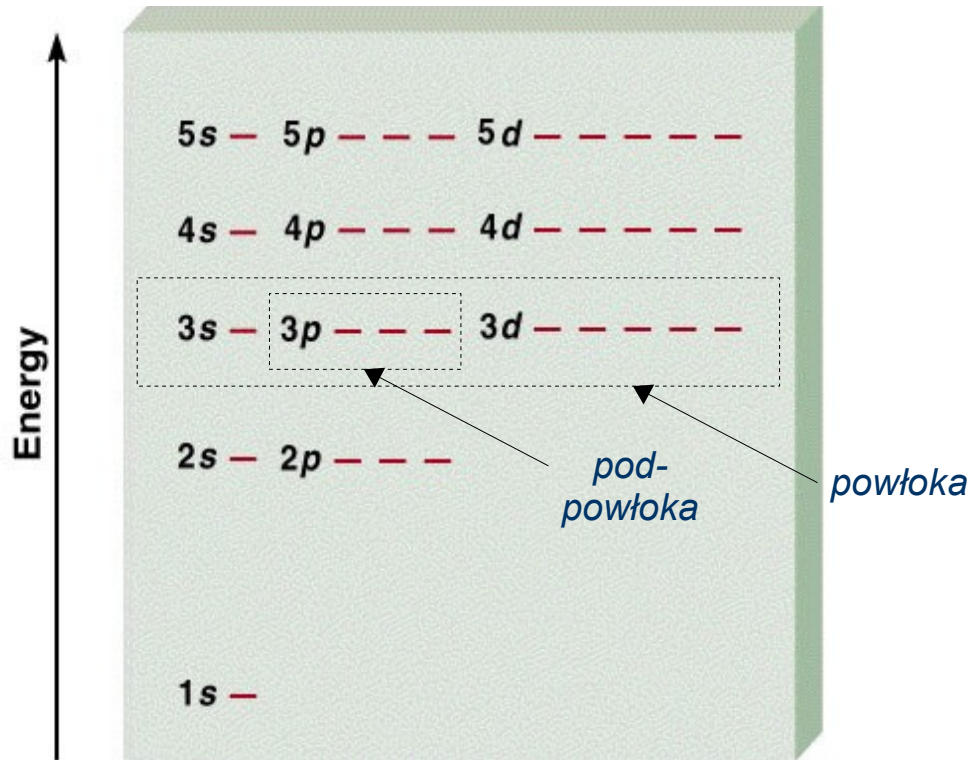
- W jaki sposób elektrony „układają się” w atomie,
 - w jaki sposób zajmują możliwe dla nich poziomy energetyczne?
- Panuje zasada: elektrony obsadzają możliwe najniższe poziomy energetyczne
- ♦ **Uwaga!** Okazuje się, że energia elektronów w atomach wieloelektronowych zależy nie tylko od liczby kwantowej n ale także w pewnym stopniu od orbitalnej liczby kwantowej l
 - to jest właśnie efekt oddziaływań wielu elektronów w atomie
 - niektóre poziomy energetyczne z wyższym n ale mniejszym l są niżej niż poziomy o mniejszym n a większym l
 - to jest tzw. zniesienie degeneracji poziomów ze względu na l

Efekt „rozszczenia się” poziomów w atomach wieloelektronowych

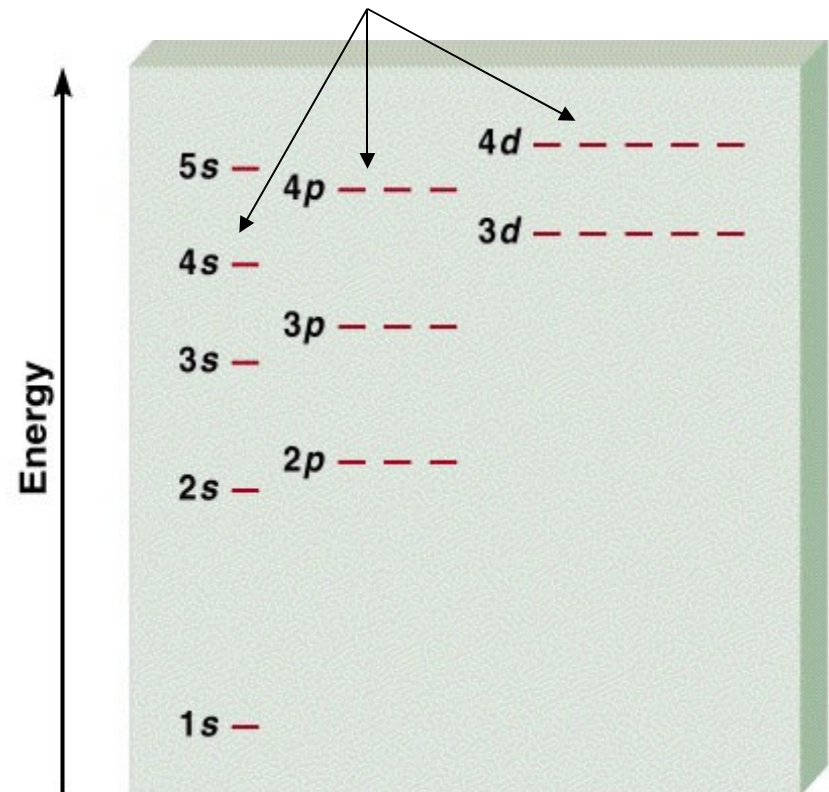


Atomy wieloelektronowe

Poziomy energetyczne w atomie jedno-elektronowym (wodoru)



Efekt „rozszczipiania się” poziomów w atomach wielo-elektronowych



Zakaz Pauliego

- ◆ Czy wiele elektronów może obsadzić ten sam poziom energetyczny?
- ◆ Nie zawsze. Obowiązuje pewna zasada!

Dwa elektrony nie mogą mieć tych samych 4 liczb kwantowych (nie mogą być w tych samych stanach kwantowych)

- Jest to tzw. zakaz Pauliego
- To znaczy, że : dwa elektrony z takimi samymi wartościami n, l i m_l (elektrony są na tej samej pod-powłoce i mające taką samą energię) muszą mieć przeciwne spiny, aby być w innym stanie (różnią się inną kwantową m_s)
- Ta zasada powoduje, że elektrony muszą zajmować inne stany kwantowe
- ◆ Ta zasada wymusza prawidłowość, że:
 - Na każdej **powłoce** znajduje się $2n^2$ stanów do obsadzenia
 - Na każdej **pod-powłoce** znajduje się $2(2l+1)$ stanów do obsadzenia

np. w powłoce $n = 3$ mamy 18 stanów do obsadzenia dla elektronów

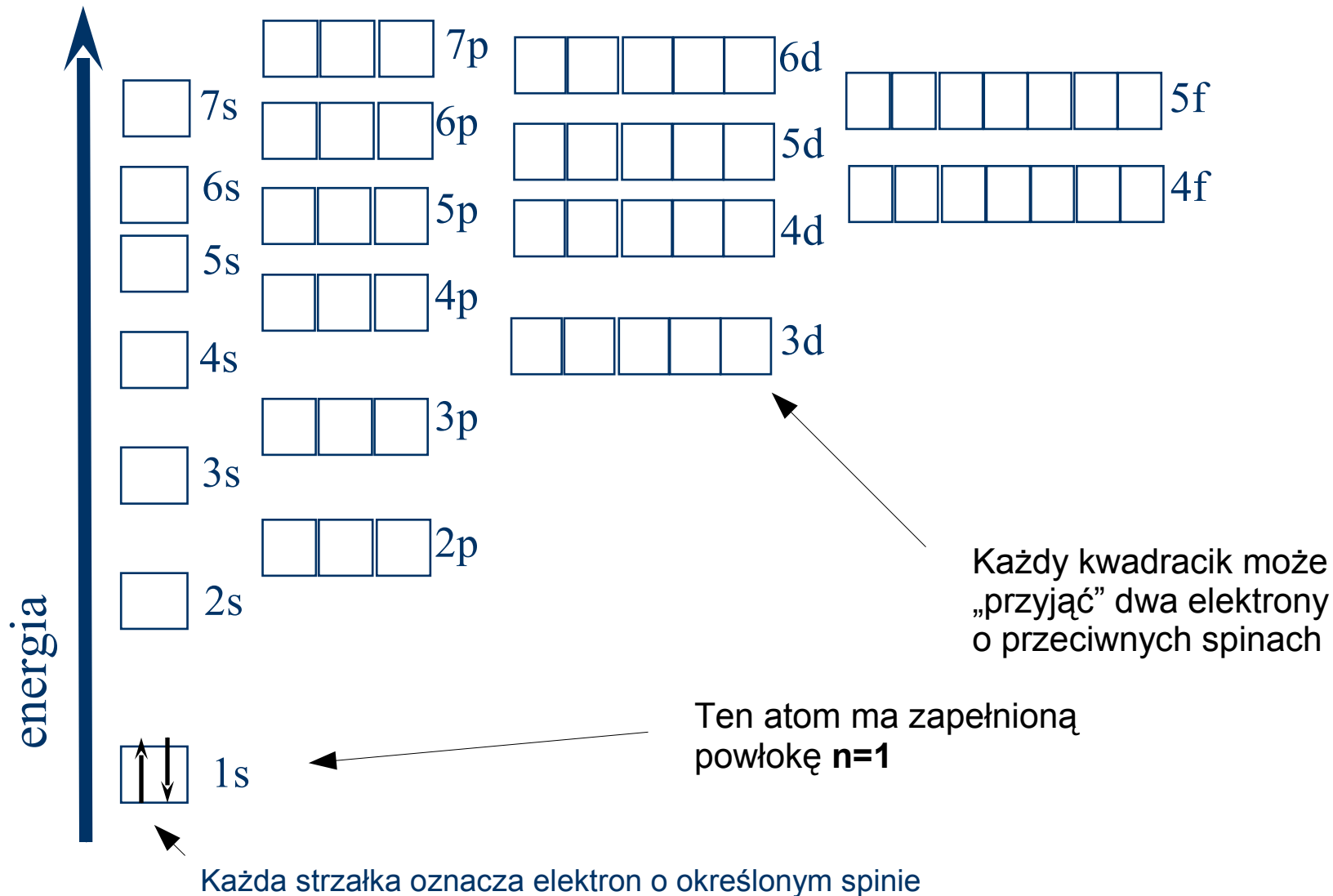
*np. w pod-powłoce typu **s** ($l = 0$) mamy 2 stany do obsadzenia dla elektronów*

*np. w pod-powłoce typu **p** ($l = 1$) mamy 6 stanów do obsadzenia dla elektronów*

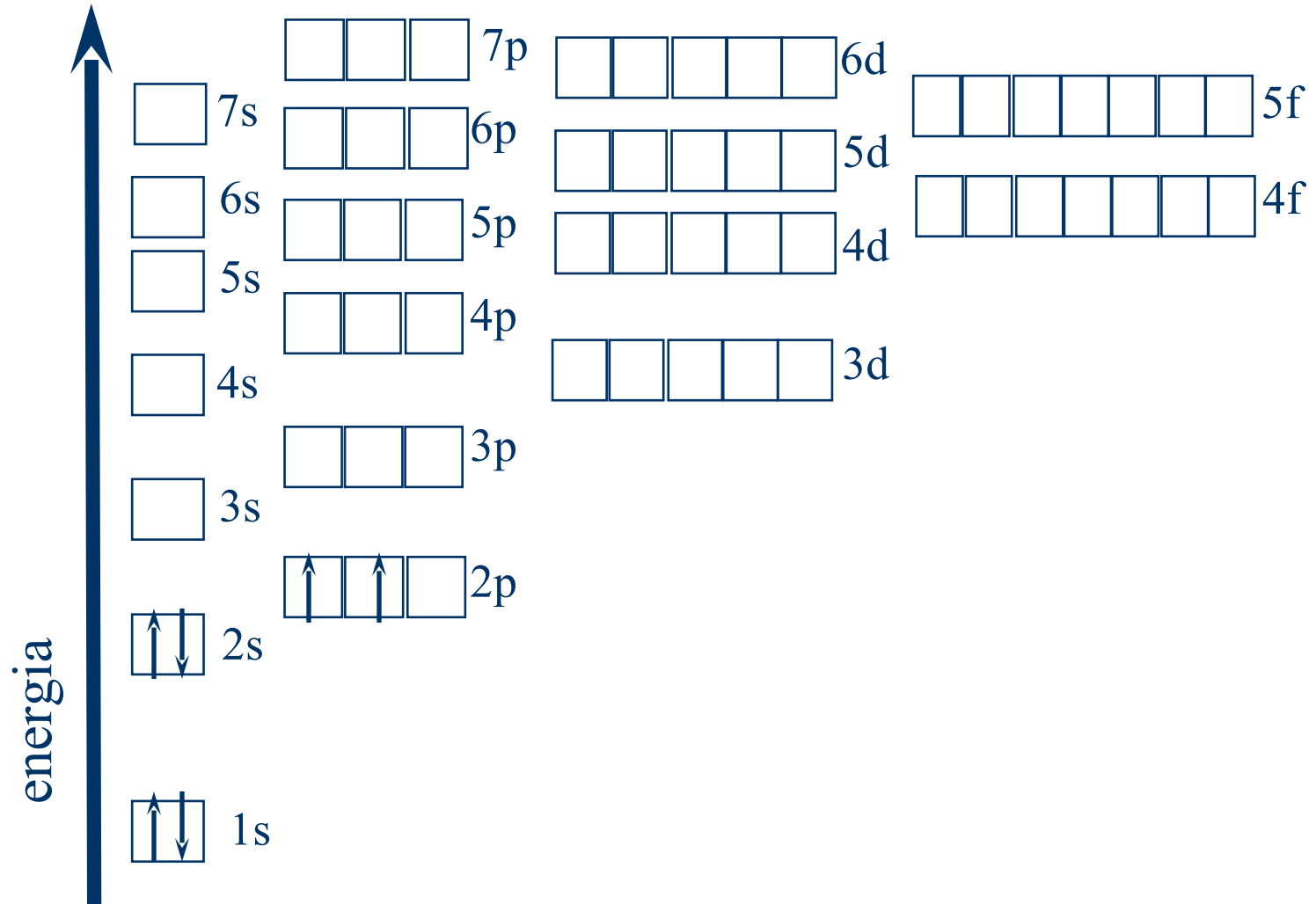
*np. w pod-powłoce typu **d** ($l = 2$) mamy 10 stanów do obsadzenia dla elektronów*

He z 2 elektronami

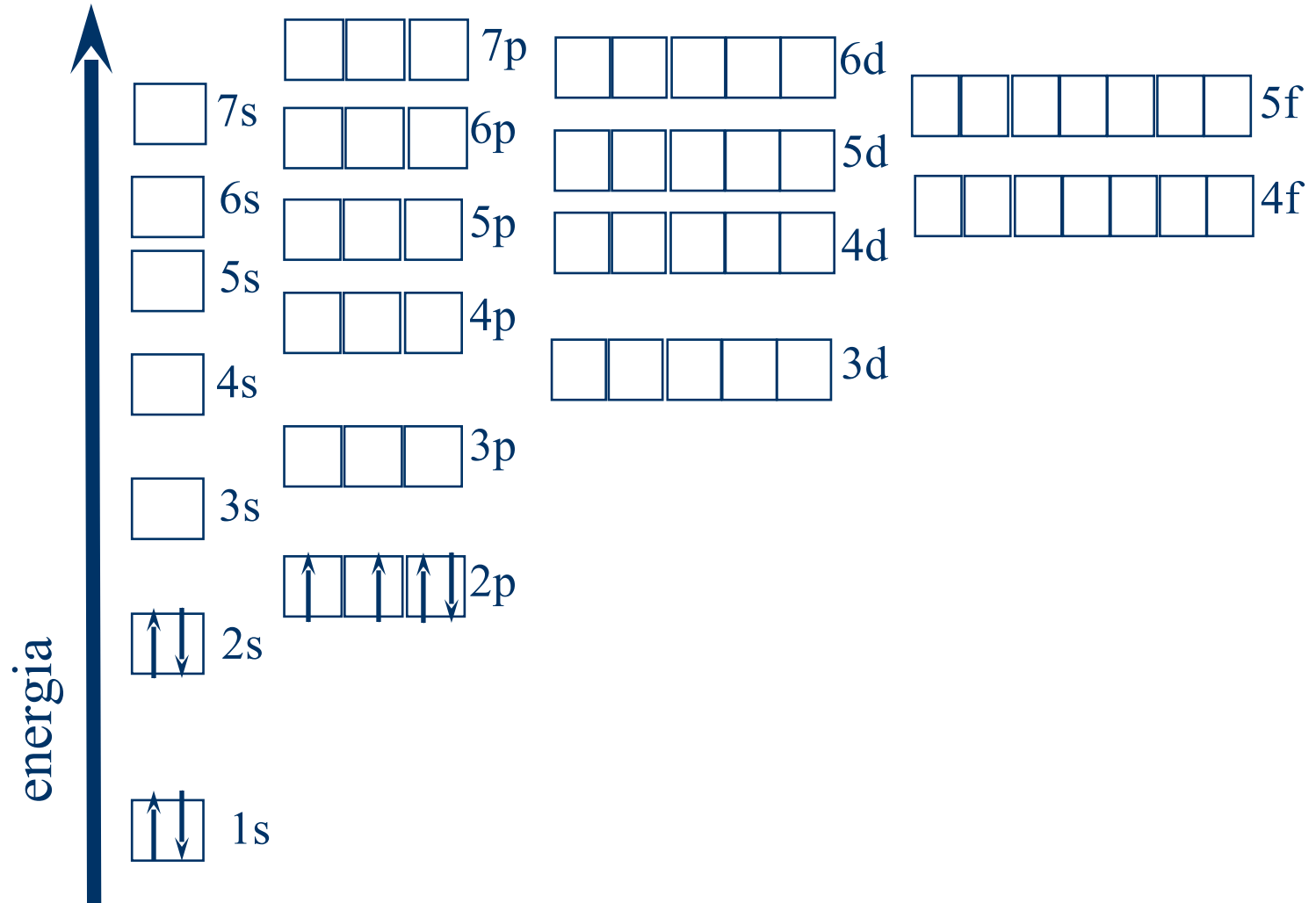
Elektrony wypełniają miejsca w ten sposób aby atom posiadał minimalną energię!



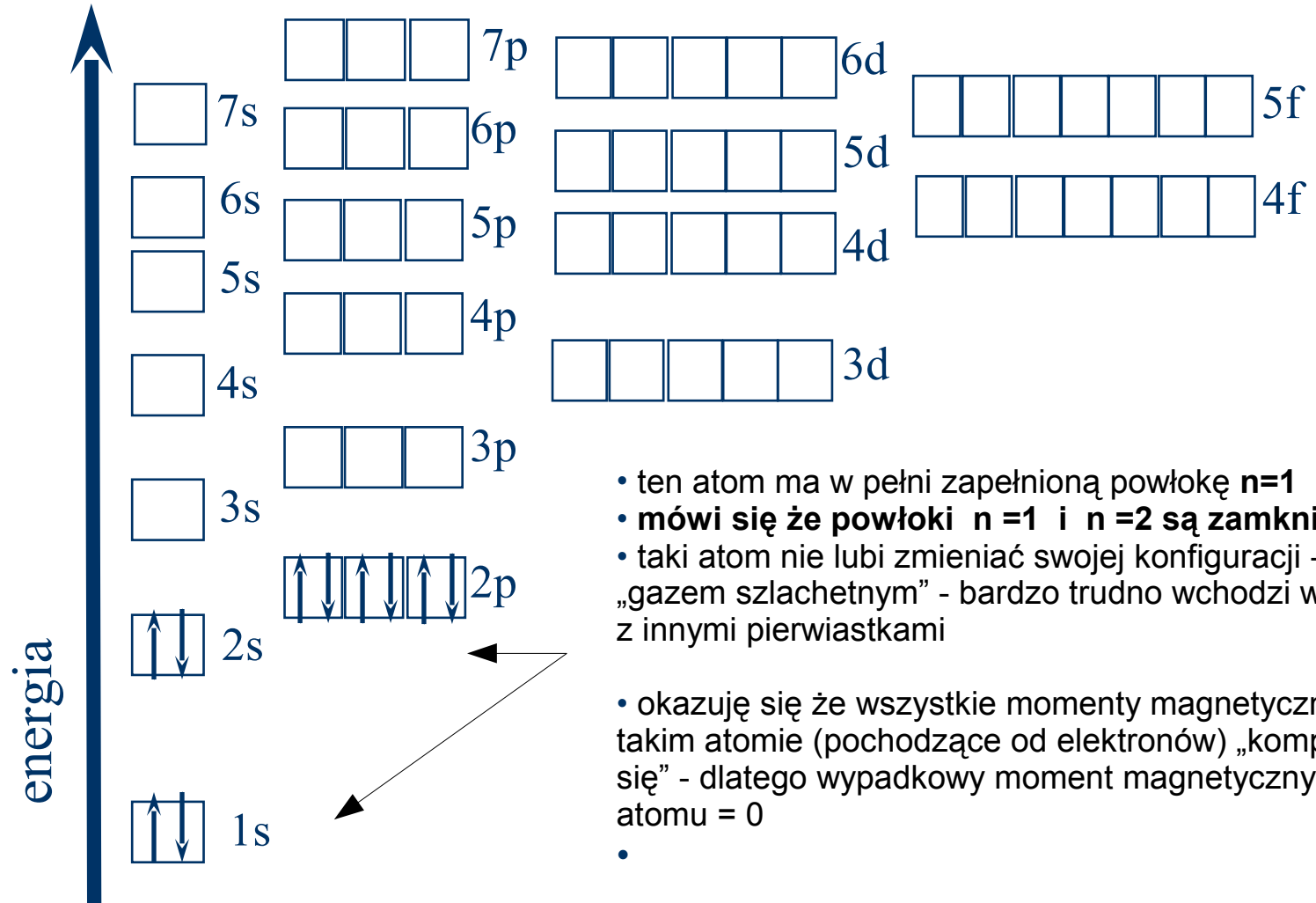
C z 6 elektronami



O z 8 elektronami



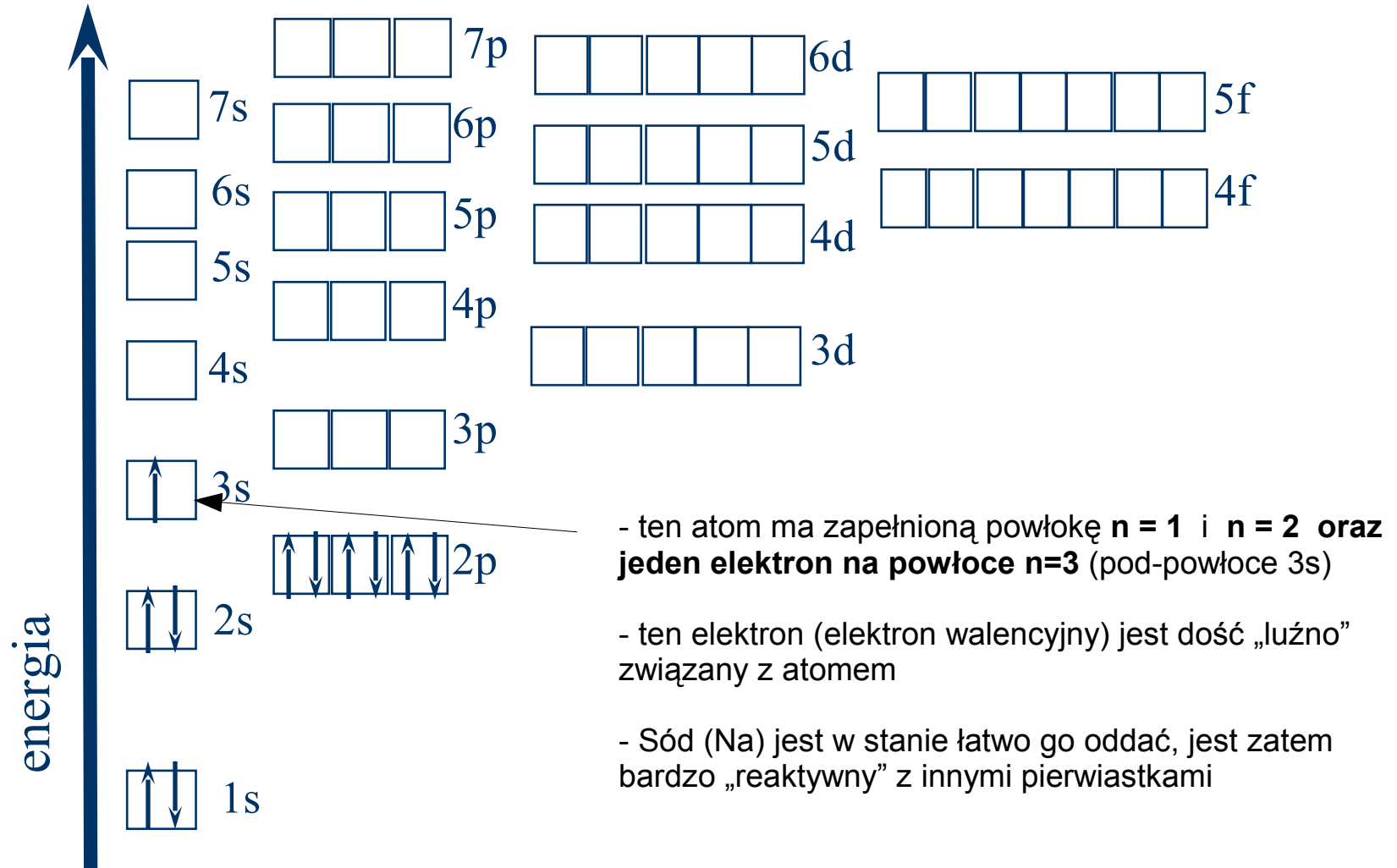
Ne z 10 elektronami



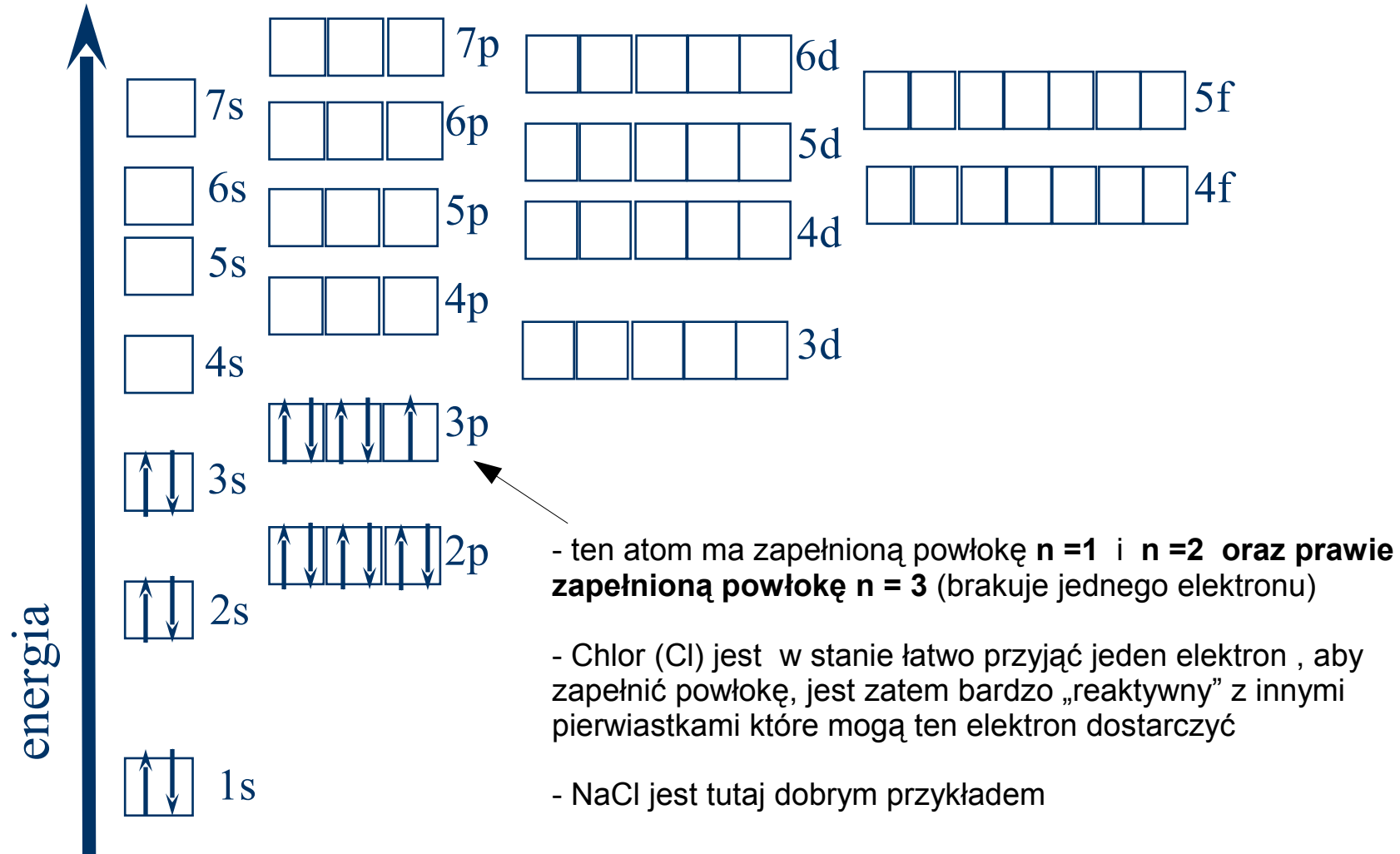
- ten atom ma w pełni zapełnioną powłokę $n=1$ i $n=2$
- **mówi się że powłoki $n=1$ i $n=2$ są zamknięte**
- taki atom nie lubi zmieniać swojej konfiguracji - jest „gazem szlachetnym” - bardzo trudno wchodzi w reakcję z innymi pierwiastkami

- okazują się że wszystkie momenty magnetyczne w takim atomie (pochodzące od elektronów) „kompensują się” - dlatego wypadkowy moment magnetyczny takiego atomu = 0
-

Na z 11 elektronami

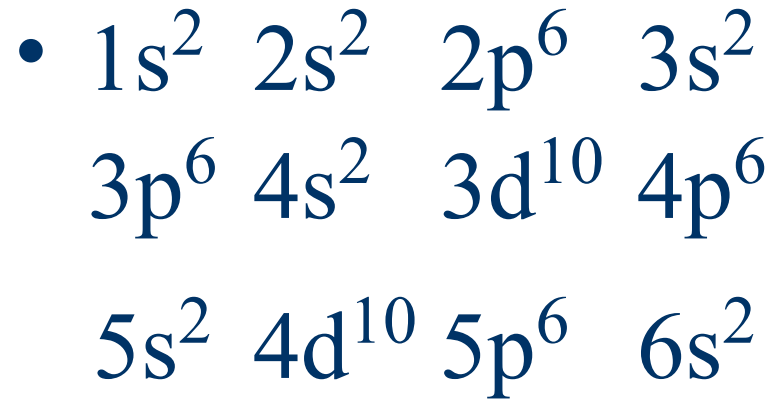
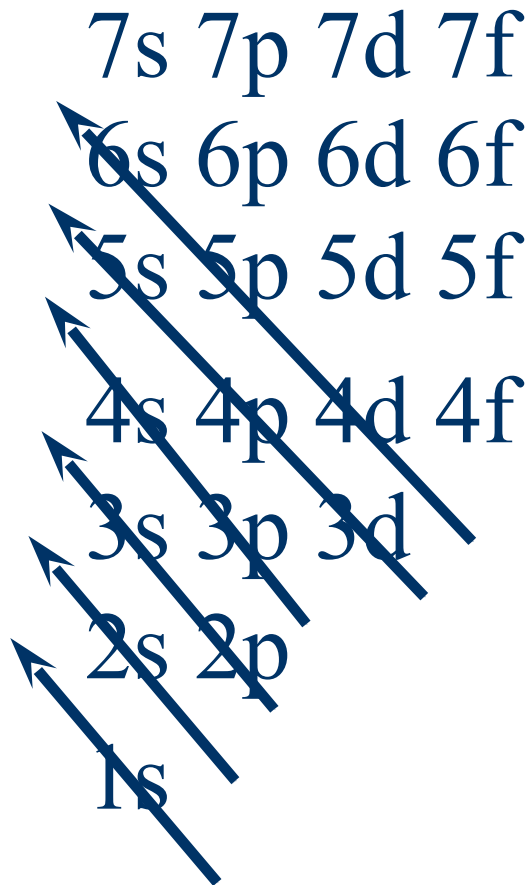


Cl z 17 elektronami



Sposób obsadzania poziomów energetycznych

Jeśli ponumerujemy pod-powłoki w następujący sposób, to można łatwo „konfigurować” kolejne pierwiastki

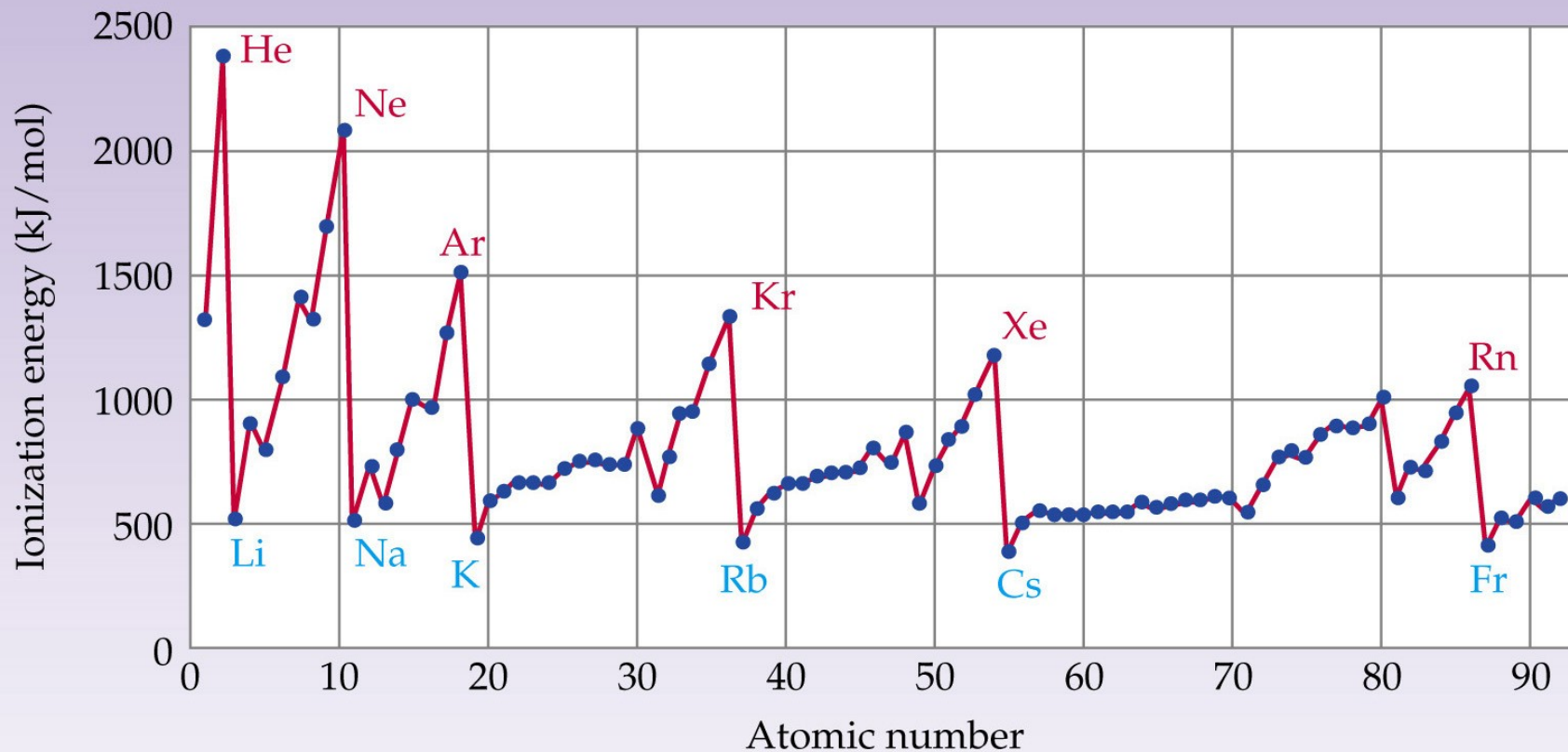


Energia jonizacji pierwiastków

Układ okresowy pierwiastków

Proces jonizacji polega na „odrywaniu” elektronów z atomu.
Atom staje się jodem dodatnim.
Oderwanie elektronu wymaga pewnej energii

Widać, że wykres tworzy pewną
okresową prawidłowość.



liczba atomowa Z

określa ile protonów znajduje się w jądrze atomowym – równa jest także liczbie elektronów w atomie gdy atom nie jest „zjonizowany”

Układ okresowy pierwiastków

Periodic Table of the Elements 2005

1 H 1.01																	18 He 4.00
3 Li 6.94	4 Be 9.01											5 B 10.81	6 C 12.01	7 N 14.01	8 O 15.99	9 F 19.00	10 Ne 20.18
11 Na 22.99	12 Mg 25.31											13 Al 26.98	14 Si 28.09	15 P 30.97	16 S 32.07	17 Cl 35.45	18 Ar 39.95
19 K 39.10	20 Ca 40.08	21 Sc 44.96	22 Ti 47.87	23 V 50.94	24 Cr 52.00	25 Mn 54.94	26 Fe 55.85	27 Co 58.93	28 Ni 58.69	29 Cu 63.55	30 Zn 65.41	31 Ga 69.72	32 Ge 72.64	33 As 74.92	34 Se 78.96	35 Br 79.90	36 Kr 83.80
37 Rb 85.47	38 Sr 87.62	39 Y 88.91	40 Zr 91.22	41 Nb 92.91	42 Mo 95.94	43 Tc (98)	44 Ru 101.07	45 Rh 102.91	46 Pd 106.42	47 Ag 107.87	48 Cd 112.41	49 In 114.82	50 Sn 118.71	51 Sb 121.76	52 Te 127.60	53 I 126.90	54 Xe 131.29
55 Cs 132.91	56 Ba 137.33	57 La 138.91	72 Hf 178.49	73 Ta 180.95	74 W 183.84	75 Re 186.21	76 Os 190.23	77 Ir 192.22	78 Pt 195.08	79 Au 196.97	80 Hg 200.59	81 Tl 204.38	82 Pb 207.2	83 Bi 208.98	84 Po (209)	85 At (210)	86 Rn (222)
87 Fr (223)	88 Ra (226)	89 Ac (227)	104 Rf (261)	105 Db (262)	106 Sg (266)	107 Bh (264)	108 Hs (270)	109 Mt (268)	110 Ds (281)	111 Rg (272)							

bardzo „reaktywne”
pierwiastki grupy VI i VII

gazy szlachetne, które mają wypełnione powłoki – są b.m. mało reaktywne

bardzo „reaktywne”
pierwiastki grupy I i II



58 Ce 140.12	59 Pr 140.91	60 Nd 144.24	61 Pm (145)	62 Sm 150.36	63 Eu 151.97	64 Gd 157.25	65 Tb 158.93	66 Dy 162.50	67 Ho 164.93	68 Er 167.26	69 Tm 168.93	70 Yb 173.04	71 Lu 174.97
90 Th 232.04	91 Pa 231.04	92 U 238.03	93 Np (237)	94 Pu (244)	95 Am (243)	96 Cm (247)	97 Bk (247)	98 Cf (251)	99 Es (252)	100 Fm (257)	101 Md (258)	102 No (259)	103 Lr (262)