



Proszę o uwagę

30. Kwantowa teoria atomów

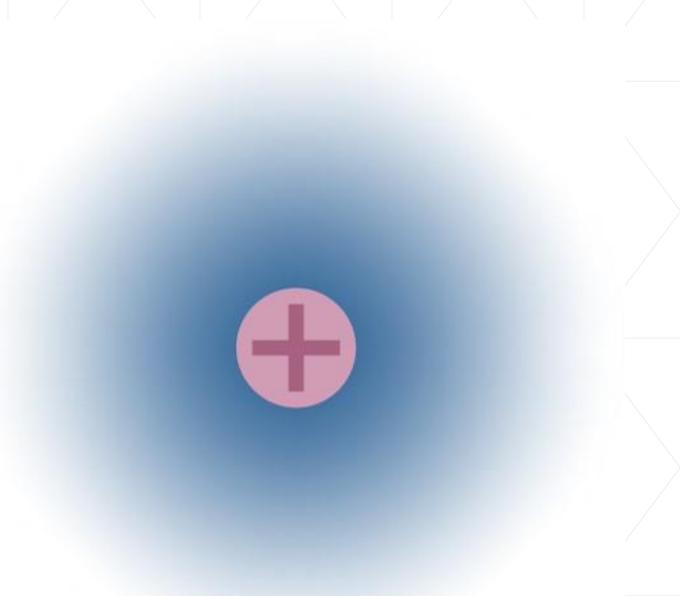
Wprowadzenie do teorii atomu:

- równanie Schrödingera dla atomu wodoru
- orbitalny moment pędu elektronu,
- moment magnetyczny elektronu,
- spin,
- liczby kwantowe,
- zakaz Pauliego,
- układ okresowy pierwiastków.



Modele atomu

- ❑ model **Thompsona** (1897 r.)
- ❑ model **Rutherforda** (1911 r.)
- ❑ model **Bohra** (1913 r.)
- ❑ model **kwantowy** (**Schrödingera**, 1925 r.)



Kwantowy (**Schrödinger**, 1925 r.)

Model kwantowy uwzględniając **hipotezę de Broglie'a** opiera się na podstawowych założeniach mechaniki kwantowej - opisie cząstki za pomocą **funkcji falowej** oraz **zasadzie nieoznaczoności Heisenberga**.

W modelu tym położenie elektronu w danej chwili czasu nie jest określone dokładnie, lecz z pewnym prawdopodobieństwem.

Stan elektronu w atomie opisany jest przez **funkcję falową**, która (w interpretacji fali de Broglie'a) dotyczy stojącej fali materii otaczającej jądro. Kwadrat amplitudy tej funkcji jest prawdopodobieństwem znalezienia elektronu w danym obszarze wokół jądra.

Atom wodoru

Atom wodoru jest swego rodzaju studnią potencjału (naturalną pułapką) dla elektronu.

Energia potencjalna oddziaływania elektron-jądro jest postaci:

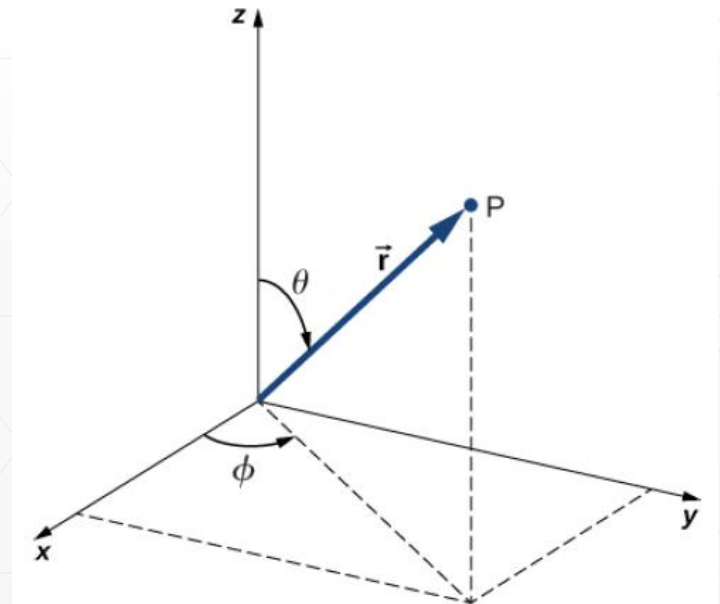
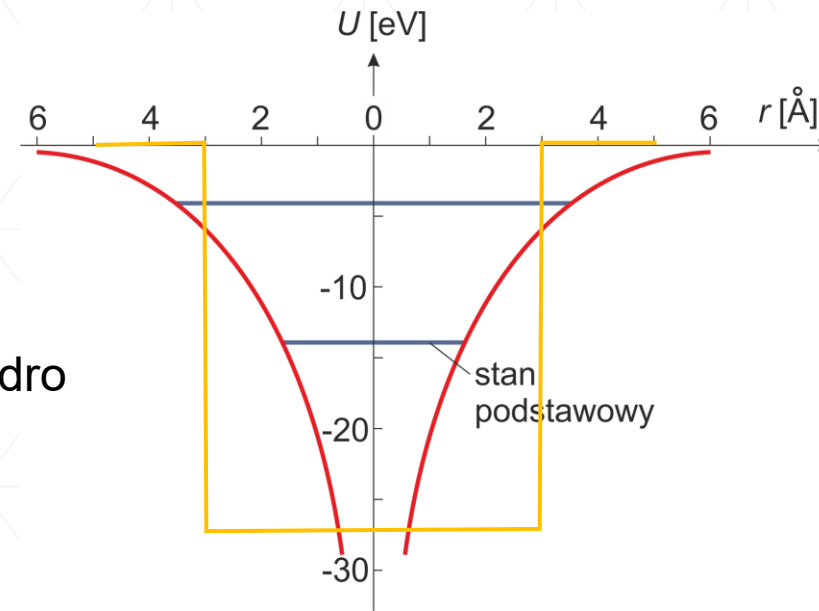
$$U(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

Potencjał ma symetrię sferyczną, więc musimy wprowadzić sferyczny układ współrzędnych:

$$x = r \sin \theta \cos \phi$$

$$y = r \sin \theta \sin \phi$$

$$z = r \cos \theta$$



Równanie Schrödingera

Równanie Schrödingera we współrzędnych kartezjańskich

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} + \frac{d^2\Psi}{dy^2} + \frac{d^2\Psi}{dz^2} = -\frac{2m}{\hbar^2} (E - U)\Psi$$

W układzie sferycznym

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d\Psi}{dr} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d\Psi}{d\theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{d^2\Psi}{d\phi^2} = -\frac{2m}{\hbar^2} (E - U)\Psi$$

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

Równanie Schrödingera dla atomu wodoru

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d\Psi}{dr} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d\Psi}{d\theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{d^2\Psi}{d\phi^2} = -\frac{2m}{\hbar^2} \left(E + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) \Psi$$

Równanie Schrödingera

W ogólnym przypadku funkcja falowa $\Psi(r, \theta, \phi) = R(r)\theta(\theta)\Phi(\phi)$

Podstawiając tę funkcję do równania Schrödingera otrzymujemy trzy równania, z których każde opisuje zachowanie się funkcji falowej w zależności od r, θ, ϕ – równanie radialne, biegunowe i azymutalne.

Rozpatrzmy najprostszyp przypadk, gdy Ψ jest tylko funkcją r , tzn. żaden kierunek w przestrzeni nie jest wyróżniony – stan **s**, równanie Schrödingera przyjmuje postać:

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d\Psi}{dr} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d\Psi}{d\theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{d^2\Psi}{d\phi^2} = -\frac{2m}{\hbar^2} \left(E + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) \Psi$$
$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d\Psi}{dr} \right) + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) \Psi = 0$$

Funkcja falowa Ψ musi spełniać następujące warunki: $r \rightarrow \infty, \Psi \rightarrow 0$

Warunki te spełnia funkcja

$$\Psi(r) = \Psi_0 e^{-r/r_0}$$

gdzie $r_0 = \text{const.}$

Rozwiązanie równania Schrödingera

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d\Psi}{dr} \right) + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) \Psi = 0 \quad \Psi(r) = \Psi_0 e^{-r/r_0} \quad \frac{d\Psi}{dr} = \Psi_0 \left(\frac{-1}{r_0} \right) e^{-r/r_0}$$

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \Psi_0 \left(\frac{-1}{r_0} \right) e^{-r/r_0} \right) + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) \Psi_0 e^{-r/r_0} = 0$$

$$\frac{1}{r^2} \left(2r \cancel{\Psi_0} \left(\frac{-1}{r_0} \right) e^{-r/r_0} + r^2 \cancel{\Psi_0} \left(\frac{-1}{r_0} \right) \left(\frac{-1}{r_0} \right) e^{-r/r_0} \right) + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) \cancel{\Psi_0} e^{-r/r_0} = 0$$

$$\frac{1}{r} \underbrace{\left(\frac{-2}{r_0} + \frac{2m}{\hbar^2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right)}_0 + \underbrace{\left(\frac{2m}{\hbar^2} E + \frac{1}{r_0^2} \right)}_0 = 0$$

$$r_0 = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{me^2}$$

r_0 odpowiada promieniowi pierwszej orbity Bohra

to równanie musi być spełnione dla dowolnego r więc oba wyrazy w nawiasach powinny być równe 0

$$E = -\frac{\hbar^2}{2mr_0^2} = -\frac{me^4}{32\pi^2\epsilon_0^2\hbar^2}$$

E odpowiada energii na pierwszej orbicie Bohra

Rozwiązanie równania Schrödingera

Z rozwiązania równania radialnego wynika, że energia elektronu przyjmuje ściśle określone wielkości:

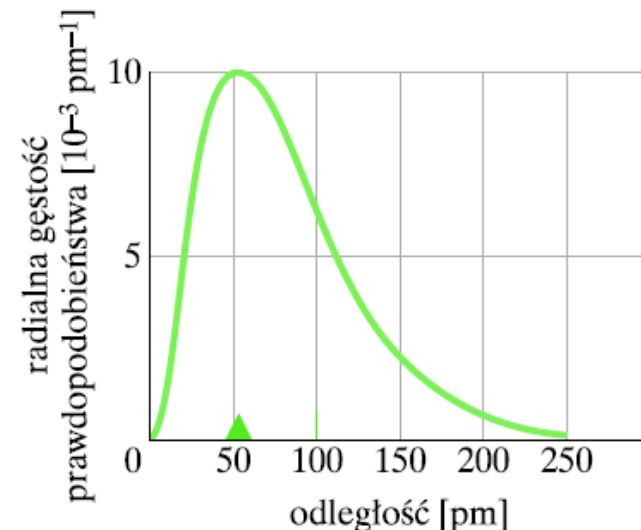
$$E_n = -\frac{1}{n^2} \frac{me^4}{32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2} = -\frac{13.59 \text{ eV}}{n^2} \quad \text{dla } n = 1, 2, 3, \dots$$

liczba n jest nazywana **główną liczbą kwantową**.

Prawdopodobieństwo znalezienia elektronu w elemencie objętości $dV = 4\pi r^2 dr$ wynosi $PdV = \Psi^2(r)4\pi r^2 dr = 4\pi r^2 e^{-2r/r_0} \Psi_0^2 dr$ i osiąga maksimum dla $r = r_0$.

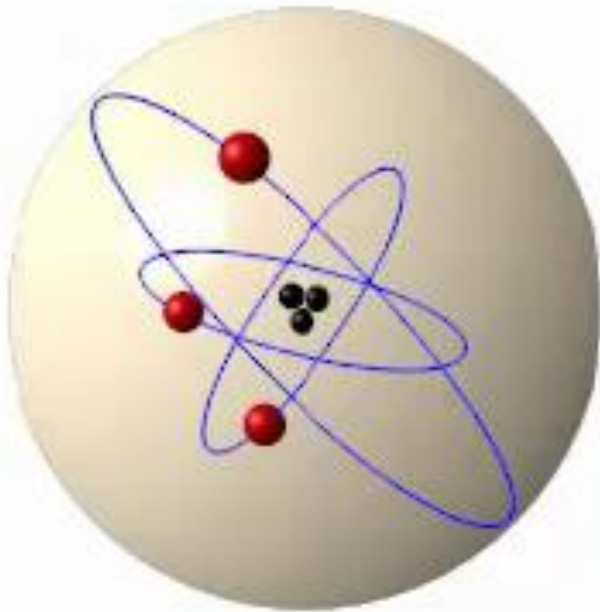
Wyrażenia na r_0 i E są identyczne jak w modelu Bohra, lecz kwantyzacja jest wynikiem rozwiązania równania Schrödingera, a nie postulatem jak u Bohra.

Pojęcie klasycznej orbity traci sens, r_0 to nie promień orbity, lecz odległość od jądra przy której prawdopodobieństwo znalezienia się elektronu jest największe.



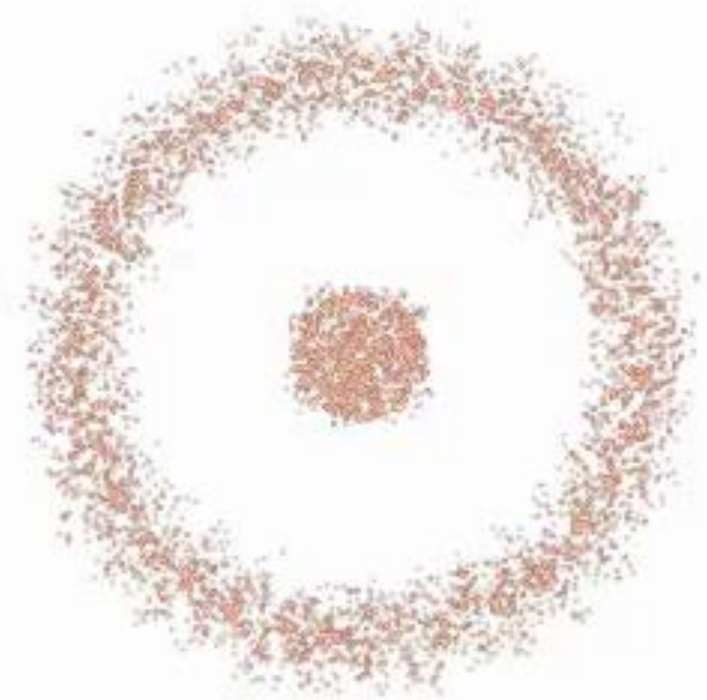
Modele atomu

model Bohra



orbity elektronowe

model kwantowy



prawdopodobieństwo
pojawienia się elektronu

Orbitalny moment pędu elektronu

Wątpliwości odnośnie teorii Bohra:

- dlaczego moment pędu elektronu jest skwantowany?
- dlaczego elektron emituje promieniowanie i nie spada na jądro?

Założmy, że paczka falowa o liczbie falowej k porusza się w płaszczyźnie xy po okręgu o promieniu r . Paczka ta ma moment pędu względem osi z równy:

$$L_z = rp = r(\hbar k)$$

Ponieważ droga elektronu na orbicie to $s = r\phi$, funkcję falową można zapisać

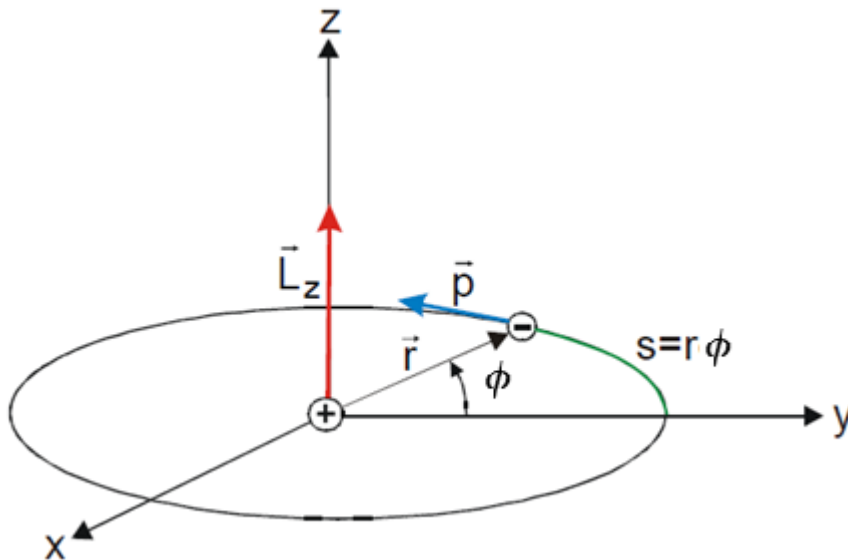
$$\Psi(r) = \Psi_0 e^{-iks} = \Psi_0 e^{-ik(r\phi)}$$

Z jednoznaczności funkcji falowej

$$\Psi(\phi) = \Psi(\phi + 2\pi)$$

$$\Psi_0 e^{-ik(r\phi)} = \Psi_0 e^{-ik(r\phi + 2\pi r)}$$

$$1 = e^{-i2\pi kr}$$



Równanie to będzie spełnione jeżeli

$e^{-i2\pi kr}$ równa się 1 wtedy, gdy iloczyn kr jest liczbą całkowitą,
(zazwyczaj liczbę tę oznacza się m_l i nazywa się **magnetyczną liczbą kwantową**)

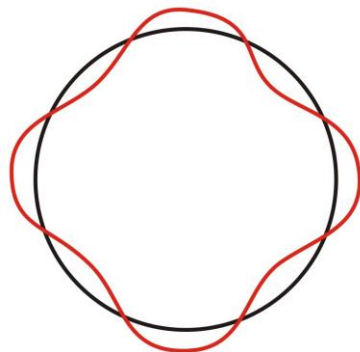
$$kr = m_l \quad \text{dla } m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

Pomnóżmy obie strony przez \hbar

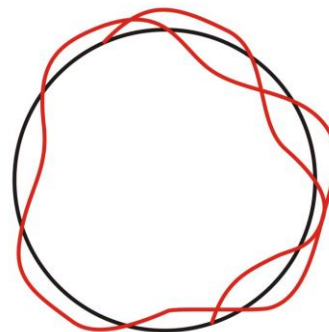
$$\hbar kr = m_l \hbar \quad \text{czyli} \quad L_z = m_l \hbar$$

Oznacza to, że orbitalny moment pędu elektronu względem osi z (lub innego ustalonego kierunku) **jest skwantowany** i może przyjmować wartości $0, \pm\hbar, \pm 2\hbar, \pm 3\hbar$ itd.

Ponieważ $k = 2\pi/\lambda$ to równanie $kr = m_l$ przyjmuje postać $\lambda m_l = 2\pi r$



długość orbity (obwód) jest równa całkowitej wielokrotności λ , (4λ)



gdy fale nie nakładają się to orbita nie jest dozwolona

Składowa momentu pędu nie może być większa od całkowitego momentu pędu.

Przy ustalonej wartości całkowitego momentu pędu istnieje pewna maksymalna wartość m_l . Oznaczmy ją przez l . Między l i m_l zachodzi warunek:

$$|m_l| \leq l$$

Stąd wynika, że liczba m_l może przybierać $2l + 1$ wartości od $-l$ do $+l$:

$$-l, -l + 1, \dots, -1, 0, 1, \dots, l - 1, l$$

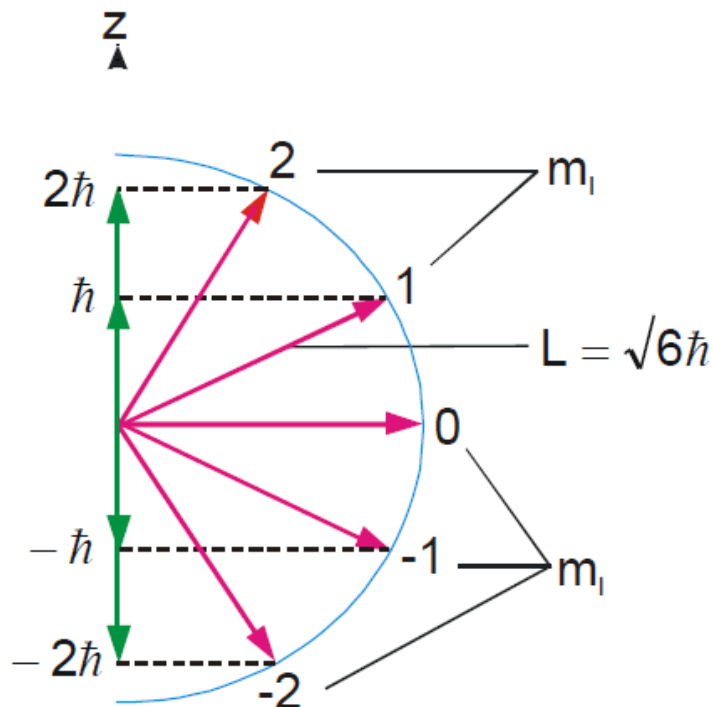
Wartość L **orbitalnego momentu pędu** \vec{L} elektronu w atomie jest również skwantowana i przyjmuje wartości:

$$L = \sqrt{l(l+1)}\hbar \quad \text{dla } l = 0, 1, 2, \dots$$

Liczba l jest nazywana **orbitalną (azymutalną) liczbą kwantową**, a liczba m_l **magnetyczną liczbą kwantową**.

Kwantowanie momentu pędu elektronu

Wektor L może przyjmować tylko określone kierunki w przestrzeni, mianowicie takie, przy których jego rzut na oś z jest wielokrotnością \hbar .



Ilość możliwych ustaleń wektora L wynosi $2l + 1$, przy czym kąty między L_z i L spełniają warunek

$$\cos \theta = \frac{L_z}{L} = \frac{m_l}{\sqrt{l(l+1)}}$$

Wektor orbitalnego momentu pędu jest skwantowany przestrzennie, tzn. wartość bezwzględna momentu pędu i jego rzut na oś z przyjmują ściśle określone wartości, zależne od liczb kwantowych l i m_l .

W przypadku przedstawionym na rysunku $l = 2$ i $L = \sqrt{6}\hbar$.

Rzuty wektora L na wyróżniony kierunek wynoszą: $2\hbar$, \hbar , 0 , $-\hbar$, $-2\hbar$.

Liczby kwantowe w atomie wodoru

Mimo że energie stanów można opisać pojedynczą liczbą kwantową n , to funkcje falowe opisujące te stany wymagają trzech liczb całkowitych n, l, m_l , zwanych **liczbami kwantowymi**, odpowiadających trzem wymiarom, w których mogą poruszać się elektrony.

Symbol	Nazwa	Dozwolone wartości	Znaczenie
n	Główna liczba kwantowa	1, 2, 3, ...	Określa możliwe wartości energii
l	Orbitalna liczba kwantowa	0, 1, 2, ..., $n - 1$	Określa moment pędu (kształt powłoki)
m_l	Magnetyczna liczba kwantowa	$-l, -l + 1, \dots, 0, 1, \dots, l - 1, l$	Określa składowe momentu pędu

Przy danej wartości n (określonej energii), liczba możliwych wartości l i m_l , czyli liczba niezależnych rozwiązań równania Schrödingera wynosi:

$$\sum_{l=0}^{n-1} (2l + 1) = n^2$$

Jeżeli elektron jest w takim stanie, że jednej wartości energii odpowiada kilka niezależnych rozwiązań równania Schrödingera, to mówimy, że stan taki jest **n^2 -krotnie zdegenerowany**.

Orbital atomowy

Dla zadanych wartości liczb kwantowych n , l , m_l , funkcja falowa ma określoną postać, którą oznaczamy symbolem Ψ_{n,l,m_l} i nazywamy **orbitem atomowym**.

Każdy orbital oznaczony jest tym samym symbolem co odpowiadający mu stan elektronowy. Tworzy się je z cyfry oznaczającej główną liczbę kwantową n i litery przyporządkowanej liczbie l w następujący sposób

l : 0 1 2 3 4 5
Orbital: s p d f g h itd.

Dla stanu podstawowego atomu wodoru $n = 1$, a zatem $l = m_l = 0$.

Dla najniższego stanu wzbudzonego $n = 2$, a zatem $l = 0$ lub $l = 1$ i $m_l = -1, 0$ lub 1

	$l = 0$	$l = 1$	$l = 2$	$l = 3$	$l = 4$	$l = 5$
$n = 1$	1s					
$n = 2$	2s	2p				
$n = 3$	3s	3p	3d			
$n = 4$	4s	4p	4d	4f		
$n = 5$	5s	5p	5d	5f	5g	
$n = 6$	6s	6p	6d	6f	6g	6h

Gęstość prawdopodobieństwa

Znając funkcje falowe można obliczyć prawdopodobieństwo znalezienia elektronu w określonym elemencie objętości. Ogólne wyrażenie na funkcję falową ma postać

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

$R(r)$ to prawdopodobieństwo radialne (zależne od r), a $\Theta(\theta)$ to prawdopodobieństwo kątowe (zależne od θ). Ponieważ $e^{im_l\phi}e^{-im_l\phi} = 1$, gęstość prawdopodobieństwa nie będzie zależała od ϕ .

Całkowita gęstość prawdopodobieństwa wynosi

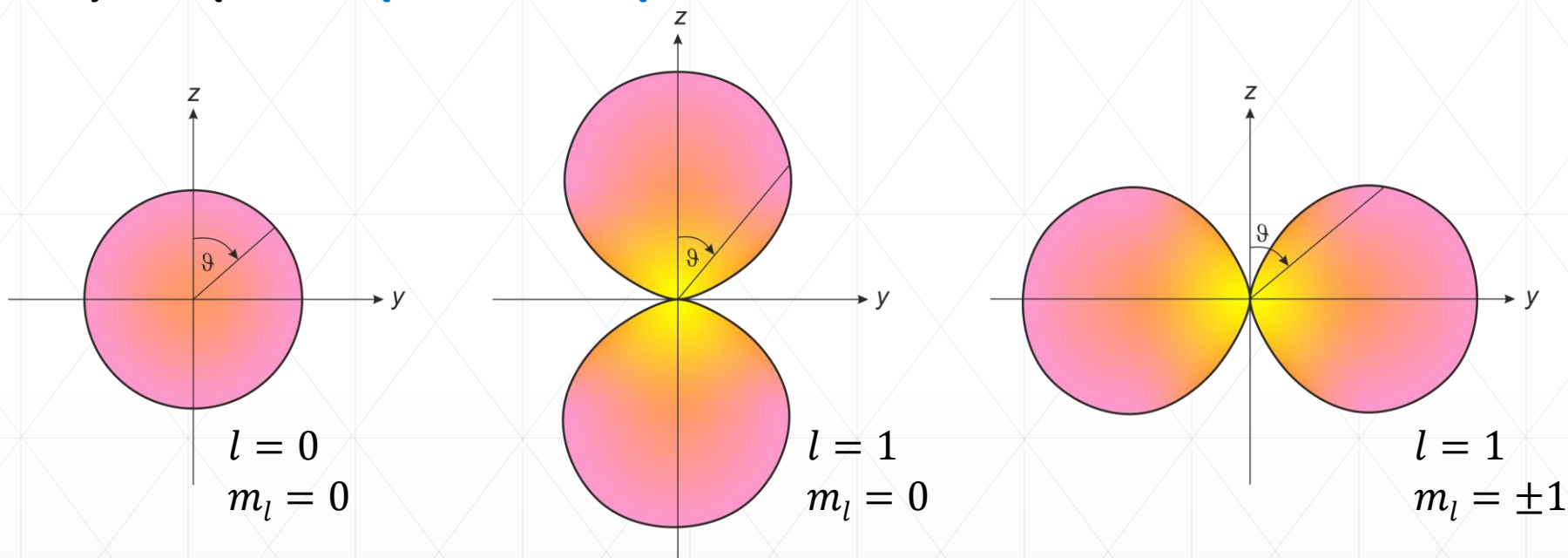
$$|\Psi(r, \theta, \phi)|^2 = |R(r)|^2|\Theta(\theta)|^2$$

Wyrażenie $|\Theta(\theta)|^2$ jest **kątową gęstością prawdopodobieństwa**, czyli prawdopodobieństwem przypadającym na jednostkę kąta bryłowego. Funkcję tą można przedstawić w postaci wykresu biegunowego.

Miarą prawdopodobieństwa znalezienia elektronu w danym kierunku jest odległość między początkiem układu współrzędnych i punktem przecięcia prostej poprowadzonej pod danym kątem, z wykresem funkcji $|\Theta(\theta)|^2$.

Gęstość prawdopodobieństwa

Obszar w którym występuje duże prawdopodobieństwo znalezienia się elektronu nazywa się **chmurą elektronową**.



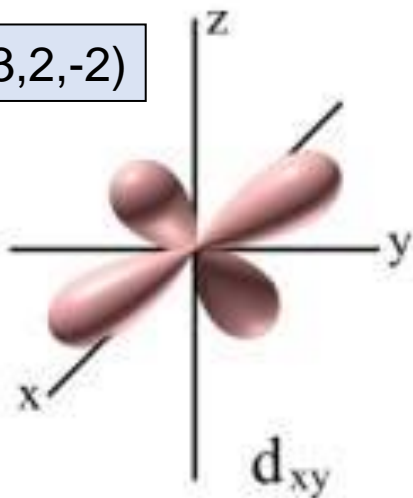
Wykresy biegunowe kierunkowej zależności gęstości prawdopodobieństwa dla atomu wodoru w przypadku $l = 0$ (orbital *s*) i $l = 1$ (orbital *p*).

W każdym przypadku gęstość prawdopodobieństwa wykazuje symetrię obrotową względem osi *z*.

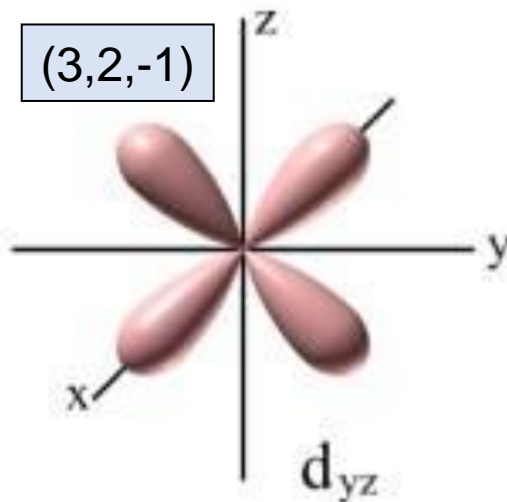
Orbitale d

$n = 3, \quad l = 2, \quad m_l$ od -2 do 2

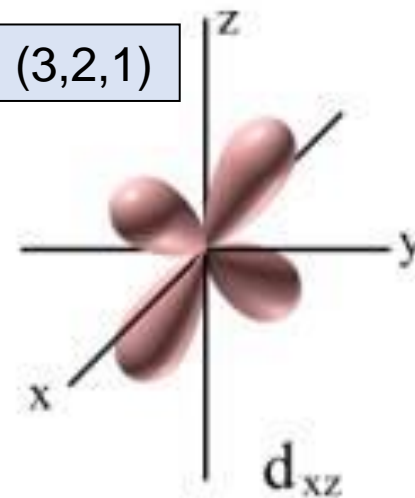
(3,2,-2)



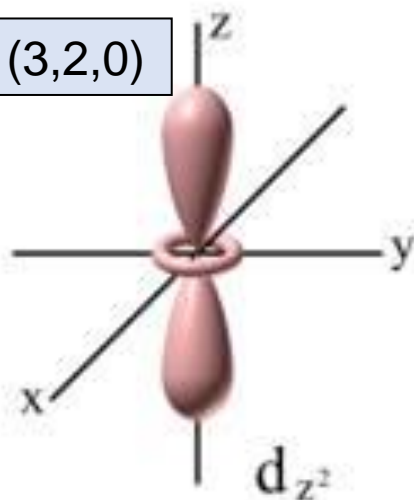
(3,2,-1)



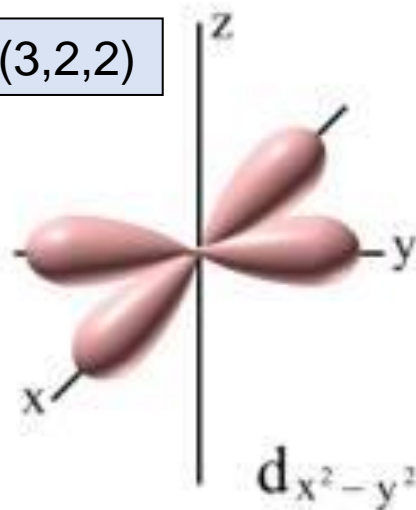
(3,2,1)



(3,2,0)

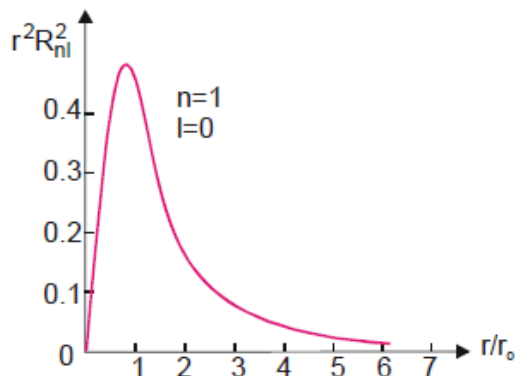


(3,2,2)

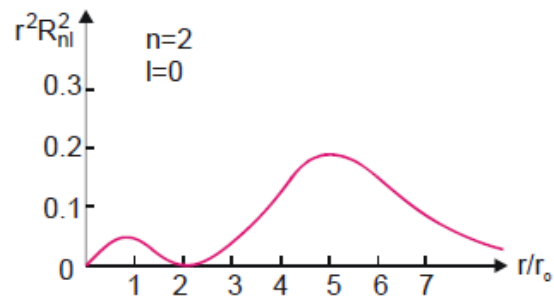


Gęstość prawdopodobieństwa

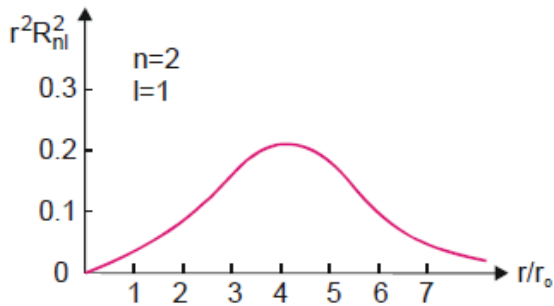
Radialna gęstość prawdopodobieństwa określona jest jako: $4\pi r^2 |R(r)|^2$



W stanie 1s: $|R(r)|^2$ osiąga maksimum dla $r = r_0$.

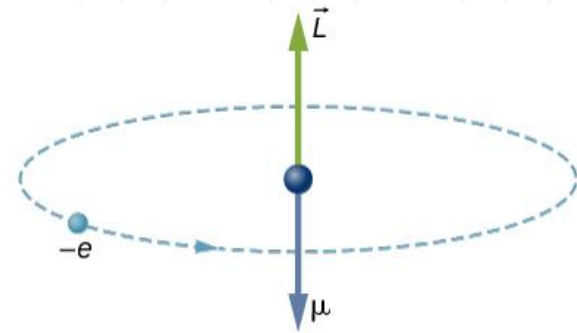
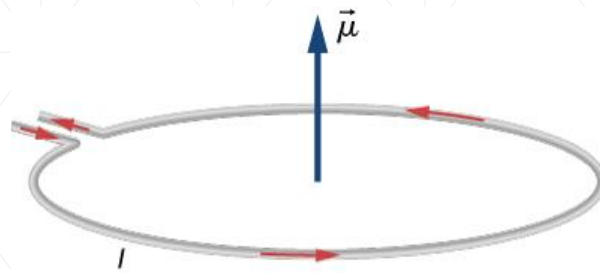


W stanie 2s: istnieją dwa maksima: dla $r = r_0$ i $r \approx 5r_0$.



W stanie 2p: $|R(r)|^2$ osiąga maksimum dla $r \approx 4r_0$.

Moment magnetyczny



Cząstka o ładunku q poruszająca się po orbicie kołowej z prędkością v , wytwarza prąd o natężeniu (dla elektronu $q = -e$)

$$I = q \frac{v}{2\pi r}$$

$$I = -e \frac{v}{2\pi r}$$

Moment magnetyczny zamkniętego, okrągłego obwodu z prądem wynosi

$$\vec{\mu} = I \cdot \vec{S}$$

$$\mu = -e \frac{v}{2\pi r} \pi r^2 = \frac{-e}{2m} r m v = \frac{-e}{2m} r p$$

Elektron krążący po orbicie kołowej posiada orbitalny moment pędu

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$$

Elektron w atomie ma także moment pędu, zwany orbitalnym (choć nie krąży), oraz towarzyszący mu **orbitalny moment magnetyczny**.

Moment magnetyczny z momentem pędu wiąże się równaniem:

$$\vec{\mu}_l = -\frac{e}{2m} \vec{r} \times \vec{p} = -\frac{e}{2m} \vec{L}$$

Moment magnetyczny

Ponieważ wartość orbitalnego momentu pędu jest skwantowana, wartość momentu magnetycznego też musi być skwantowana i wynosi

$$\mu_l = -\frac{e}{2m}L = -\frac{e}{2m}\sqrt{l(l+1)}\hbar = -\mu_B\sqrt{l(l+1)}$$

μ_B nazywany **magnetonem Bohra** jest jednostką atomowego momentu magnetycznego.

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m} = 9.274 \times 10^{-24} \quad \text{J/T}$$

Wektorów \vec{L} ani $\vec{\mu}_l$ nie można w żaden sposób zmierzyć.

Można jednak zmierzyć składowe tych dwóch wektorów wzdłuż danej osi.

Jeżeli atom umieścimy w polu magnetycznym o indukcji \vec{B} to osią tą jest kierunek linii tego pola. Wtedy możemy zmierzyć składowe wektorów \vec{L} i $\vec{\mu}_l$ wzdłuż tej osi.

Na cząstkę o momencie magnetycznym $\vec{\mu}_l$ w zewnętrznym polu magnetycznym \vec{B} działa moment sił

$$\vec{T} = \vec{\mu}_l \times \vec{B}$$

który dąży do ustawienia wektora momentu wzdłuż kierunku pola.

Składowa orbitalnego momentu magnetycznego w kierunku zewnętrznego pola

$$\mu_{lz} = \mu_l \cos \theta = -\frac{e\hbar}{2m} \sqrt{l(l+1)} \cos \theta = -\frac{e\hbar}{2m} m_l$$

Dlaczego m_l nazywa się **magnetyczną liczbą kwantową**? - bo określa rzut momentu magnetycznego na kierunek zewnętrznego pola magnetycznego.

Elektron w polu magnetycznym uzyskuje dodatkową **energię potencjalną**, która również jest skwantowana:

$$U = \vec{\mu}_l \cdot \vec{B} = -\mu_l B \cos \theta = \frac{e\hbar}{2m} B m_l$$



(a)



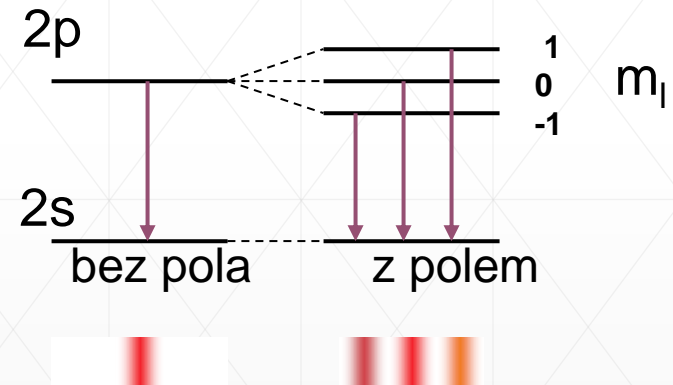
Zjawisko Zeemana

Uzyskanie przez elektron dodatkowej energii potencjalnej oznacza, że pole magnetyczne będzie zmieniało poziomy energetyczne elektronu.

Ponieważ dla ustalonego n i l istnieje $2l + 1$ możliwych wartości m_l , więc pierwotny poziom energetyczny zostanie rozszczepiony na $2l + 1$ podpoziomów.

Dla elektronu w atomie wodoru w stanie **2p** ($l = 1$) w polu indukcji 1T:

$$U = \begin{cases} 9.27 \times 10^{-24} \text{ J} & m_l = 1 \\ 0 & m_l = 0 \\ -9.27 \times 10^{-24} \text{ J} & m_l = -1 \end{cases}$$

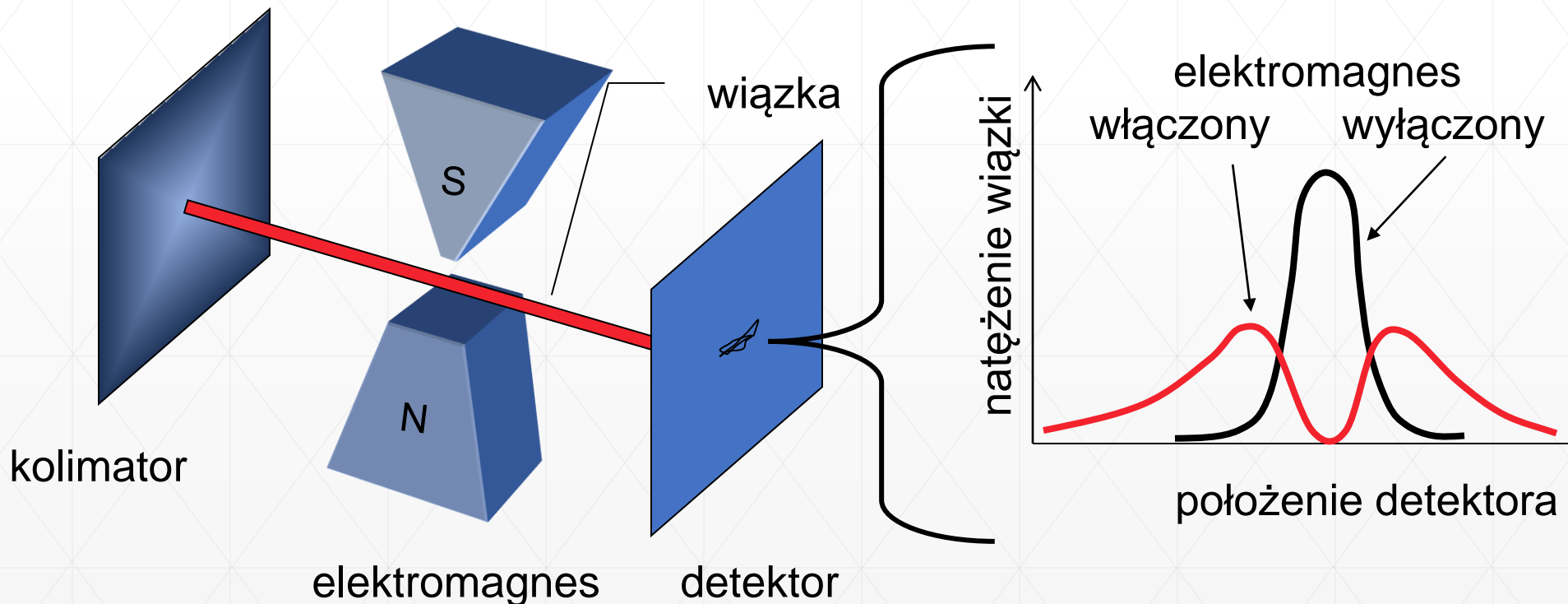


Zjawisko rozszczepienia linii widmowych w zewnętrznym polu magnetycznym nosi nazwę **zjawiska Zeemana**. Zjawisko to potwierdza przestrzenne skwantowanie orbitalnego momentu pędu w atomie.

Doświadczenie Sterna-Gerlacha

Precyzyjne obserwacje widm atomowych pokazały, że linie początkowo uważane za pojedyncze składają się w rzeczywistości z kilku linii. Nazwano to **strukturą subtelną linii widmowych**.

W 1922 roku Stern i Gerlach badając wpływ niejednorodnego pola na wiązkę atomów srebra zaobserwowali jej rozszczepienie i parzystą liczbę śladów na ekranie. Zjawisko to zostało wyjaśnione kilka lat później, poprzez przypisanie elektronom dodatkowej własności – **spinu**.



Spin elektronu

Strukturą subtelną linii widmowych i wynik doświadczenia **Sterna-Gerlacha** można wyjaśnić istnieniem dodatkowych momentów magnetycznych elektronów.

Okazało się, że elektron poza orbitalnym momentem pędu ma **własny moment pędu zwany spinowym lub krótko spinem**:

- jest on naturalną (wewnętrzną) właściwością elektronu,
- jego istnienie zaproponowali w 1925 roku studenci Goudsmit i Uhlenbeck w celu wyjaśnienia struktury subtelnej linii widmowych.

Spinowy moment pędu elektronu wynosi $L_s = \sqrt{s(s+1)}\hbar$

gdzie s jest **spinową liczbą kwantową** równą $1/2$.

Spin elektronu $L_s = \sqrt{3}\hbar/2$ jest podstawową właściwością elektronu (podobnie jak masa i ładunek).

Ze spinowym momentem pędu elektronu związany jest **spinowy magnetyczny moment dipolowy**.

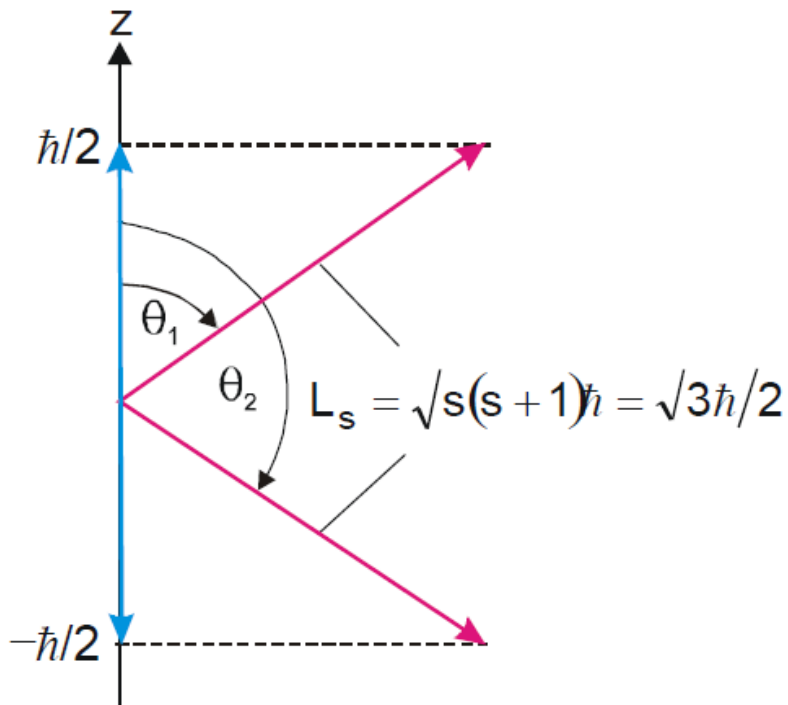
$$\vec{\mu}_s = -\frac{e}{m}\vec{L}_s$$

Spin elektronu

Rzut spinowego momentu pędu na wyróżniony kierunek jest skwantowany

$$L_{sz} = m_s \hbar$$

gdzie m_s przyjmuje dwie wartości: $1/2$ lub $-1/2$ i nosi nazwę **magnetycznej spinowej liczby kwantowej**.



Spinowy moment pędu elektronu i jego rzut na określony kierunek w przestrzeni.



Liczby kwantowe

Stan elektronu w atomie będziemy więc opisywać za pomocą czterech liczb kwantowych: n , l , m_l i m_s .

(liczby spinowej s się nie wymienia, bo dla wszystkich elektronów jest ona równa $s = 1/2$)

Liczba kwantowa	Symbol	Dozwolone wartości	Odpowiada
główna	n	1, 2, 3, ...	odległości od jądra
orbitalna	l	0, 1, 2, ..., $n - 1$	orbitalnemu momentowi pędu
magnetyczna	m_l	$-l, -l + 1, \dots, 0, 1, \dots, l - 1, l$	orbitalnemu momentowi pędu wzdłuż osi z
magnetyczna spinowa	m_s	$\pm 1/2$	spinowemu momentowi pędu wzdłuż osi z

- wszystkie stany o jednakowej głównej liczbie kwantowej n tworzą **powłokę**.
- powłokę tworzy $2n^2$ stanów.
- wszystkie stany o jednakowych wartościach kwantowych n i l tworzą **podpowłokę**.
- wszystkie stany tworzące podpowłokę mają niemal jednakową energię.
- podpowłokę tworzy $2(2l + 1)$ stanów.

Zakaz Pauliego

Elektrony znajdujące się w danym atomie obowiązują **zasada Pauliego** (1925 r.), zwana też **zakazem Pauliego**. Głosi ona, że:

Elektrony w atomie muszą się różnić chociaż jedną liczbą kwantową, lub inaczej

dowolne dwa elektrony w atomie nie mogą znajdować się w tym samym stanie kwantowym.

np. gdy $n = 2$, możliwe są 4 orbitale:
 $(n, l, m_l) = (2, 0, 0), (2, 1, 1), (2, 1, 0), (2, 1, -1)$,
które mogą być zajęte przez 8 elektronów

n	l	m_l	m_s
2	0	0	↑↓
	1	1	↑↓
		0	↑↓
		-1	↑↓



Wolfgang Pauli (1900–1958)
Nobel 1946

Powłoki i podpowłoki elektronowe

Elektrony o tej samej wartości głównej liczby kwantowej n tworzą **powłokę**.

n : 1 2 3 4 5 6
powłoka: K L M N O P itd.

Dana powłoka dzieli się na **podpowłoki**, utworzone z elektronów odpowiadających różnym wartościom orbitalnej liczby kwantowej l .

Powłoka **K** zawiera tylko jedną podpowłokę **1s**. Powłoka **L** zawiera dwie podpowłoki **2s** i **2p**, a następne powłoki – odpowiednio coraz więcej podpowłok.

Maksymalna liczba elektronów w podpowłoce o danej wartości l jest równa wartości liczby kwantowej m_l pomnożonej przez ilość ustawień spinu, tzn. $2(2l + 1)$.

Dla poszczególnych podpowłok liczby elektronów wynoszą odpowiednio:

podpowłoka	s	p	d	f	g
liczba elektronów	2	6	10	14	18

Liczby elektronów na powłokach

Na n -tej powłoce może być $N = 2 \sum_{l=0}^{n-1} (2l + 1) = 2n^2$ elektronów

Dopuszczalne liczby elektronów w poszczególnych powłokach wynoszą więc:

powłoka	K	L	M	N	O	P	Q
liczba elektronów	2	8	18	32	50	72	98

- W stanie $n = 1$ mogą znajdować się 2 elektrony.
- W stanie $n = 2$ może znajdować się 8 elektronów:
 $(n, l, m_l) = (2, 0, 0), (2, 1, 1), (2, 1, 0), (2, 1, -1)$, po 2 na każdym orbitalu
- Liczbę 18 można otrzymać składając 5 orbitali z $l = 2$ (10 elektronów) 3 orbitale z $l = 1$ (6 elektronów) i 1 orbital z $l = 0$ (2 elektrony).

Obsadzanie powłok i podpowłok

Elektrony w atomie dążą do zajęcia jak najniższych poziomów energetycznych. Kolejne powłoki są zajmowane przez elektrony dopiero po całkowitym zapełnieniu powłok leżących poniżej (o mniejszej energii).

Elektrony na ostatniej, najbardziej zewnętrznej powłoce, nazywanej **powłoką walencyjną**, są najslabiej związane z atomem i mogą odrywać się od niego podczas tworzenia wiązań chemicznych. Powłoka walencyjna może przyjmować też dodatkowe elektrony.

Elektrony znajdujące się na powłoce walencyjnej nazywane są **elektronami walencyjnymi**.

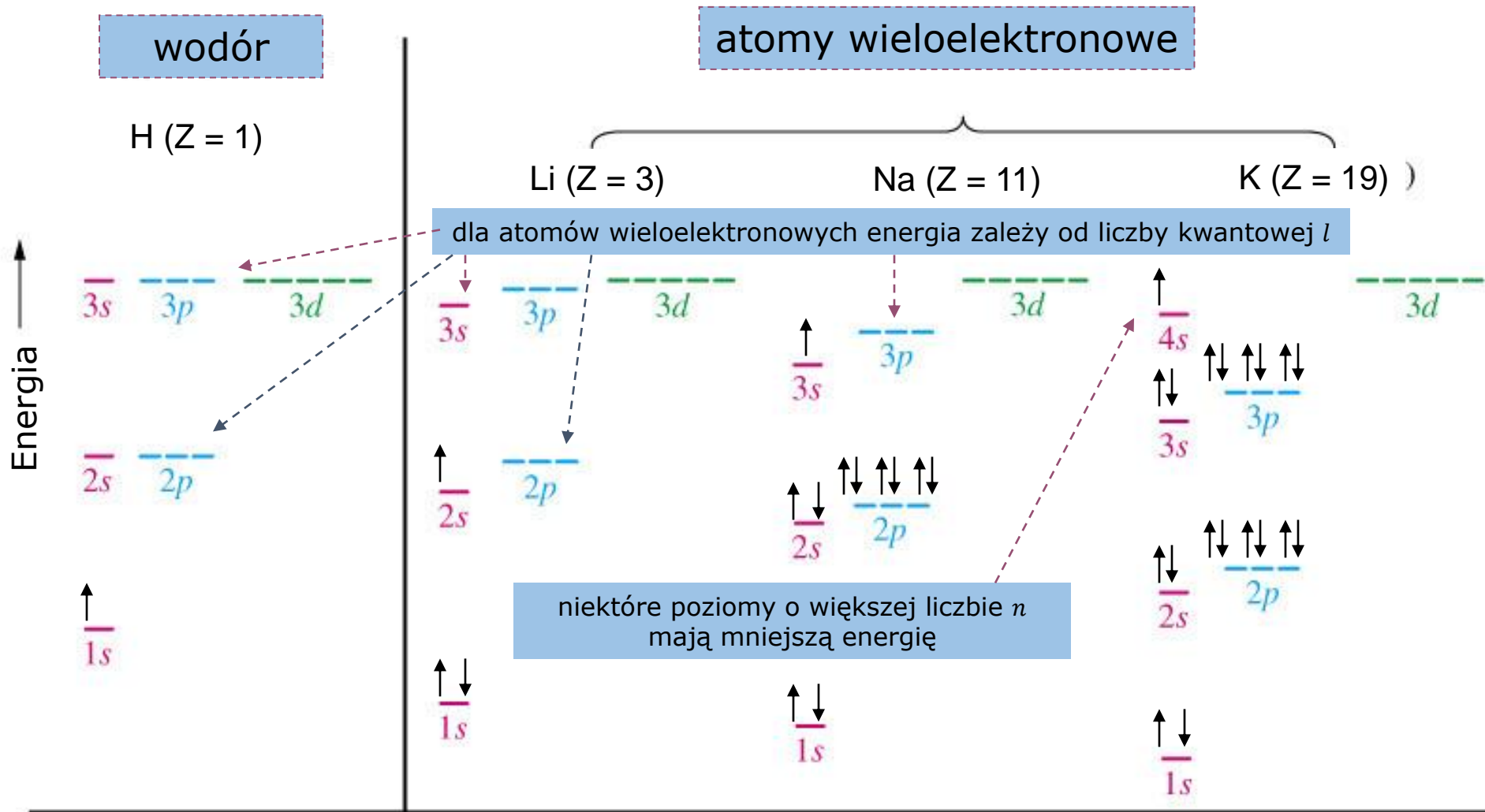
Energia jonizacji atomów to energia potrzebna do oderwania najslabiej związanego elektronu, czyli **elektronu walencyjnego**.

w atomie wodoru $E_{\text{jon}} = 13,6 \text{ eV}$

$$E_n = -\frac{me^4}{32\pi^2\epsilon_0^2\hbar^2} \frac{1}{n^2} = -13.6 \frac{1}{n^2} \text{ eV}$$

w atomie helu $E_{\text{jon}} = 24,6 \text{ eV}$ największa wśród pierwiastków (z powodu ekranowanie jądra przez drugi elektron)

Konfiguracja elektronów



wodór

atomy wieloelektronowe

H (Z = 1)

Li (Z = 3)

Na (Z = 11)

K (Z = 19)

dla atomów wieloelektronowych energia zależy od liczby kwantowej l

niektóre poziomy o większej liczbie n mają mniejszą energię

Energia

3s

3p

3d

2s

2p

3s

3p

3d

2s

2p

3s

3p

3d

2s

2p

4s

3p

3d

3s

2s

2p

1s

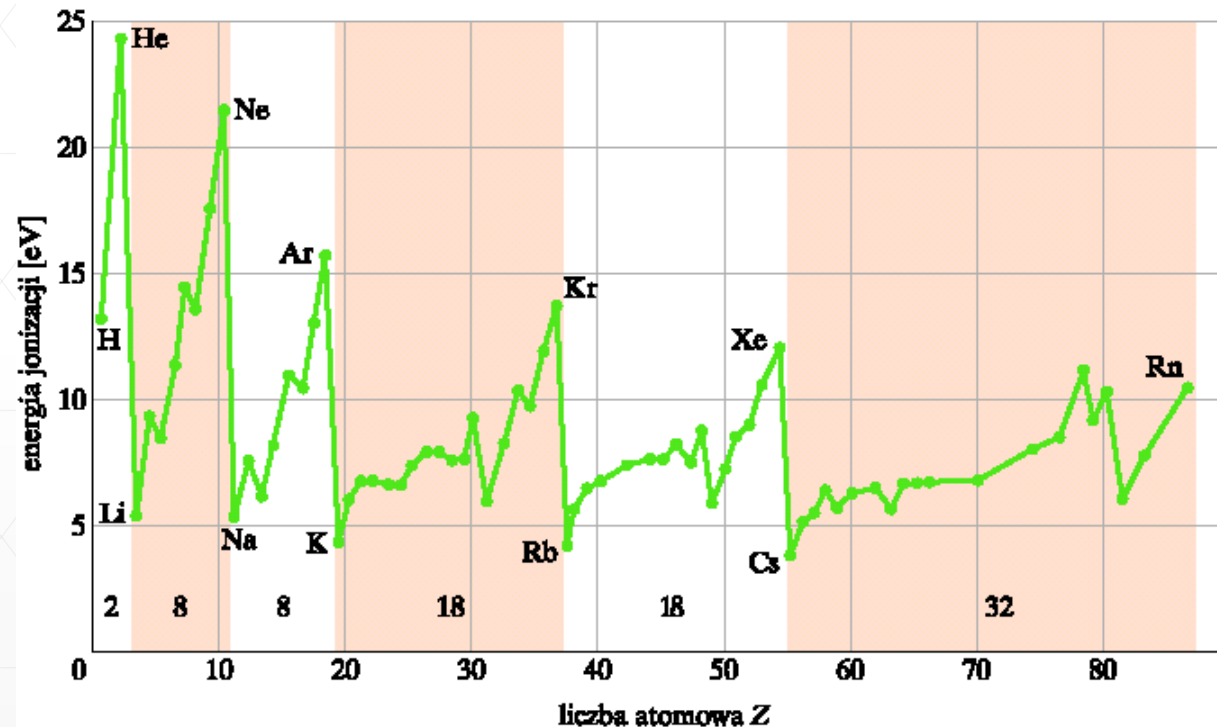
1s

1s

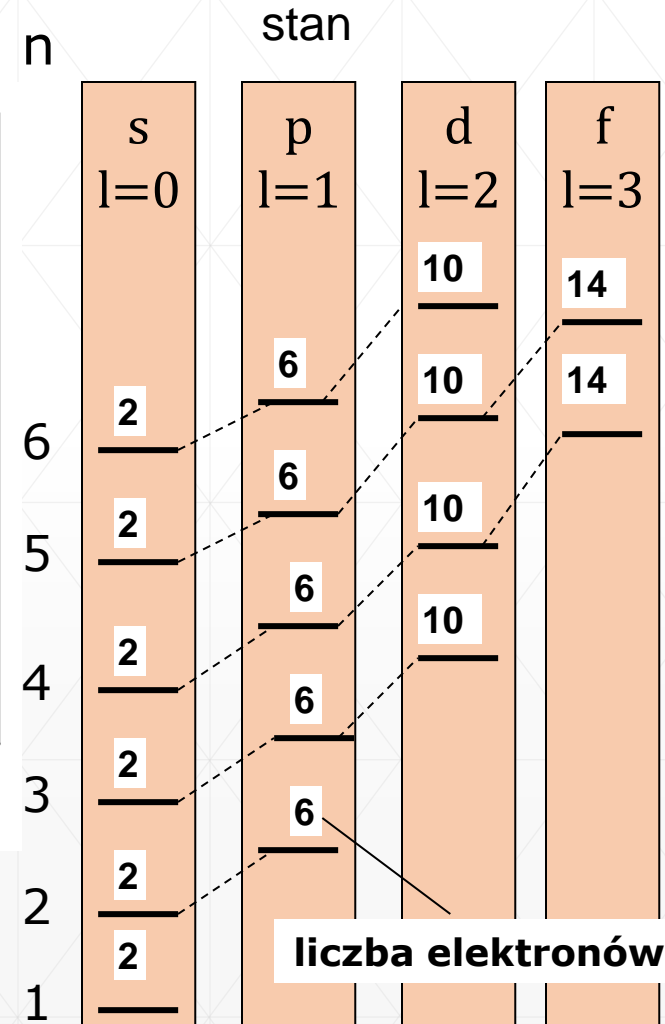
1s

1s

Kolejność zapęłniania powłok elektronowych



właściwości fizyczne i chemiczne pierwiastków zmieniają się zgodnie z kolejnością 2,8,8,18,18,32



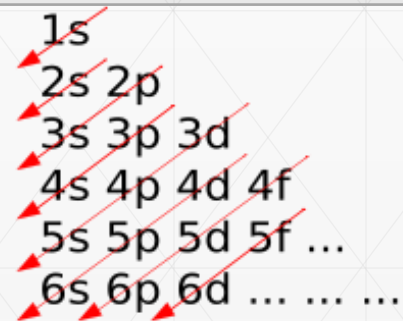
Konfiguracja elektronów

Pierwiastek	Z	K	L			M			N	Notacja	
		1s	2s	2p		3s	3p		3d		4s
Wodór (H)	1	↑								1s ¹	
Hel (He)	2	↑↓								1s ²	
Lit (Li)	3	↑↓	↑							1s ² 2s ¹	
Węgiel (C)	6	↑↓	↑↓	↑	↑					1s ² 2s ² 2p ²	
Tlen (O)	8	↑↓	↑↓	↑↓	↑	↑				1s ² 2s ² 2p ⁴	
Neon (Ne)	10	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓			1s ² 2s ² 2p ⁶	
Sód (Na)	11	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑		1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ¹	
Krzem (Si)	14	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑	↑		1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ² 3p ²	
Argon (Ar)	18	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ² 3p ⁶	
Potas (K)	19	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑	1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ² 3p ⁶ 4s ¹

Ostatni elektron w atomie potasu jest w stanie **4s** zamiast, jakby należało się spodziewać, w stanie **3d**.

Wapń (Ca) - 1s²2s²2p⁶3s²3p⁶4s²

Skand (Sc) - 1s²2s²2p⁶3s²3p⁶**3d¹**4s²



Porządek wśród atomów

Pierwiastki uporządkowane są w **układzie okresowym** w sześciu poziomych wierszach, według rosnącej **liczby atomowej Z** . Takie uporządkowanie odzwierciedla periodyczność zmian właściwości fizykochemicznych pierwiastków.

Wiersze układu okresowego nazywamy **okresami**. Atomy występujące w tych samych okresach mają taką samą liczbę powłok elektronowych.

Prawo okresowości pierwiastków chemicznych zostało sformułowane przez Dymitra Mendelejewa w roku 1869.

Pierwiastki o podobnych właściwościach tworzą **grupy**, które w układzie okresowym występują jako kolumny pionowe. Atomy występujące w tych samych grupach mają taką samą liczbę elektronów na powłokach walencyjnych.

Chemiczne właściwości pierwiastków wynikają z ich konfiguracji elektronowej określonej przez fizykę kwantową.

Układ okresowy pierwiastków

Grupa →	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
	IA	IIA	IIIB	IVB	VB	VIB	VII B	VIII B	VIII B	VIII B	IB	IIB	IIIA	IVA	VA	VIA	VIIA	VIIIA
↓ Okres																		
1	1 H																	2 He
2	3 Li	4 Be											5 B	6 C	7 N	8 O	9 F	10 Ne
3	11 Na	12 Mg											13 Al	14 Si	15 P	16 S	17 Cl	18 Ar
4	19 K	20 Ca	21 Sc	22 Ti	23 V	24 Cr	25 Mn	26 Fe	27 Co	28 Ni	29 Cu	30 Zn	31 Ga	32 Ge	33 As	34 Se	35 Br	36 Kr
5	37 Rb	38 Sr	39 Y	40 Zr	41 Nb	42 Mo	43 Tc	44 Ru	45 Rh	46 Pd	47 Ag	48 Cd	49 In	50 Sn	51 Sb	52 Te	53 I	54 Xe
6	55 Cs	56 Ba	*	72 Hf	73 Ta	74 W	75 Re	76 Os	77 Ir	78 Pt	79 Au	80 Hg	81 Tl	82 Pb	83 Bi	84 Po	85 At	86 Rn
7	87 Fr	88 Ra	**	104 Rf	105 Db	106 Sg	107 Bh	108 Hs	109 Mt	110 Ds	111 Rg	112 Cn	113 Nh	114 Fl	115 Mc	116 Lv	117 Ts	118 Og
* Lantanowce				57 La	58 Ce	59 Pr	60 Nd	61 Pm	62 Sm	63 Eu	64 Gd	65 Tb	66 Dy	67 Ho	68 Er	69 Tm	70 Yb	71 Lu
** Aktynowce				89 Ac	90 Th	91 Pa	92 U	93 Np	94 Pu	95 Am	96 Cm	97 Bk	98 Cf	99 Es	100 Fm	101 Md	102 No	103 Lr

Obecny standard zawiera 18 grup oznaczonych liczbami arabskimi.

Ponadto wyróżnia się dwa rodzaje grup:

- Grupy główne: grupy 1 i 2 oraz 13 do 18 (oznaczane literą A)
- Grupy poboczne: grupy 3 do 12 (oznaczane literą B)

Układ okresowy pierwiastków

Grupa →	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18			
	IA	IIA	IIIB	IVB	VB	VIB	VII B	VIII B	VIII B	VIII B	IB	IIB	IIIA	IVA	VA	VIA	VIIA	VIIIA			
↓ Okres				metale alkaliczne			metale ziem alkalicznych		lantanowce			aktynowce						2			
1	1 H																	2 He			
2	3 Li	4 Be				metale przejściowe		metale bloku p		półmetale		niemetale						5			
3	11 Na	12 Mg				halogeny		gazy szlachetne		właściwości nieznane						13	14	15	16	17	18
4	19 K	20 Ca	21 Sc	22 Ti	23 V	24 Cr	25 Mn	26 Fe	27 Co	28 Ni	29 Cu	30 Zn	31 Ga	32 Ge	33 As	34 Se	35 Br	36 Kr			
5	37 Rb	38 Sr	39 Y	40 Zr	41 Nb	42 Mo	43 Tc	44 Ru	45 Rh	46 Pd	47 Ag	48 Cd	49 In	50 Sn	51 Sb	52 Te	53 I	54 Xe			
6	55 Cs	56 Ba	*	72 Hf	73 Ta	74 W	75 Re	76 Os	77 Ir	78 Pt	79 Au	80 Hg	81 Tl	82 Pb	83 Bi	84 Po	85 At	86 Rn			
7	87 Fr	88 Ra	**	104 Rf	105 Db	106 Sg	107 Bh	108 Hs	109 Mt	110 Ds	111 Rg	112 Cn	113 Nh	114 Fl	115 Mc	116 Lv	117 Ts	118 Og			

* Lantanowce	57 La	58 Ce	59 Pr	60 Nd	61 Pm	62 Sm	63 Eu	64 Gd	65 Tb	66 Dy	67 Ho	68 Er	69 Tm	70 Yb	71 Lu
** Aktynowce	89 Ac	90 Th	91 Pa	92 U	93 Np	94 Pu	95 Am	96 Cm	97 Bk	98 Cf	99 Es	100 Fm	101 Md	102 No	103 Lr

Stan w stanie standardowym

(25 °C, 1000 hPa)

ciało stałe cieczz gaz nieznanyy

Występowanie w przyrodzie

naturalny	z rozpadów	syntetyczny
-----------	------------	-------------

Właściwości pierwiastków

Właściwości pierwiastków uwarunkowane są konfiguracją elektronów w atomach.

- **gazy szlachetne (helowce)** – zamknięte powłoki, momenty pędu i magnetyczne równe zero, orbitale o symetrii sferycznej, nie aktywne chemicznie;
- **metale alkaliczne** – jeden elektron walencyjny określa moment pędu i magnetyczny, aktywne chemicznie;
- **halogeny (fluorowce)** – brak elektronu na ostatniej podpowłoce, aktywne chemicznie;
- **metale przejściowe** – wypełniona ostatnia podpowłoka ekranuje niecałkowicie wypełnione niższe podpowłoki, podobne właściwości chemiczne, zbliżone energie jonizacji, istotne właściwości magnetyczne;

3	Li
11	Na
19	K
37	Rb
55	Cs
87	Fr

2	He
10	Ne
18	Ar
36	Kr
54	Xe
86	Rn
9	F
17	Cl
35	Br
53	I
85	At

21	22	23	24	25	26	27	28	29	30
Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn
39	40	41	42	43	44	45	46	47	48
Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd
*	72	73	74	75	76	77	78	79	80
	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg
**	104	105	106	107	108	109	110	111	112
	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg	Cn

pierwiastki ziem rzadkich (lantanowce) – zbliżone właściwości chemiczne, metale aktywne chemicznie.

* Lantanowce	57	58	59	60	61	62	63	64	65	66	67	68	69	70	71
	La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu

Podsumowanie

- **Kwantowy model atomu wodoru** – rozkład prawdopodobieństwa
- **Liczby kwantowe** – główna, orbitalna, magnetyczna i spinowa
- **Zakaz Pauliego** – konfiguracje elektronowe w atomach
- **Budowa układu okresowego pierwiastków** – zależność właściwości pierwiastków od konfiguracji elektronowej



Dziękuję za uwagę