Struktura elektronowa

- Struktura elektronowa atomów –

układ okresowy pierwiastków:

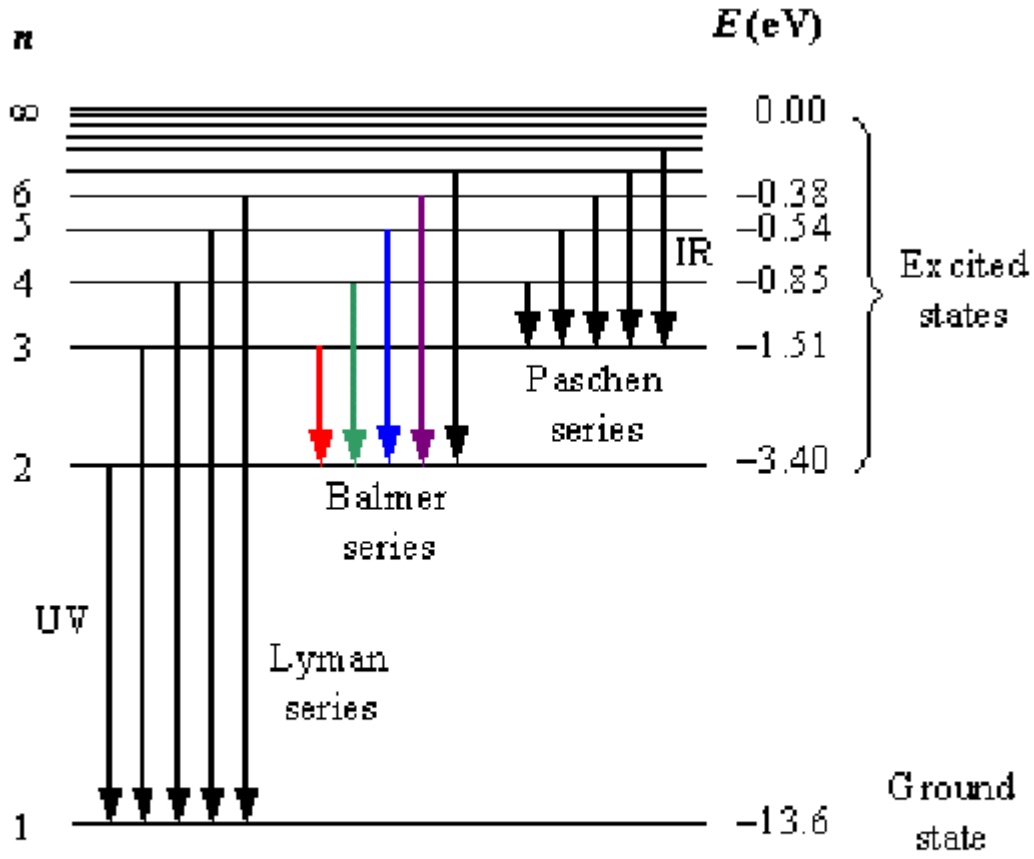
1) elektrony w atomie zajmują poziomy energetyczne od dołu,

inaczej niż te gołębie (w Australii, ale tam i tak chodzi się do góry nogami)

[żart]

http://www.karwasz.it/modern/australia.html

Model Bohra atomu wodoru



Energy levels of the hydrogen atom with some of the transitions between them that give rise to the spectral lines indicated.

Elektrony zajmują poziomy energetyczne od dołu

Opis poniżej nie jest poprawny, ale rysunek mniej więcej - tak:

- na niższych poziomach mieści się mniej elektronów, np. na
1º orbicie (*K*) dwa: $1s^2$
2º orbicie (*L*) osiem $2s^2p^6$
3º orbicie (*M*) osiemnaście $3s^2p^6d^{10}$

Rys. 3.5. Bozony-fotony (ptaszki) „obsiadają" szczeble drabiny poziomów oscylatora kwantowego. Liczba bozonów 0, 1, 2, 3, ... odpowiada stopniowi wzbudzenia 0, 1, 2, 3, ... Na szczeblu zerowym nie ma ani jednego bozonu, lecz energia nie jest równa zeru

Arkadiusz Góral, Meandry Fizyki

Elektrony zajmują poziomy energetyczne od dołu

Jak widać na zdjęciu obok, elektrony na określonej orbicie lokują się kolejno na podpoziomach, np. na 3º orbicie

- s^2
- p^6
- d^{10}

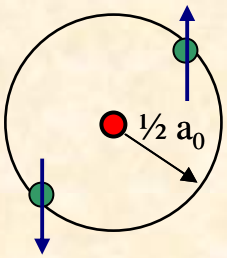
Tours, Francja, XII 2005 [żart]

z czego to wynika?

- **z tzw. zakazu Pauliego:**

„nie jest możliwe, aby dwa elektrony zajmowały to samo miejsce [w przestrzeni konfiguracyjnej]”

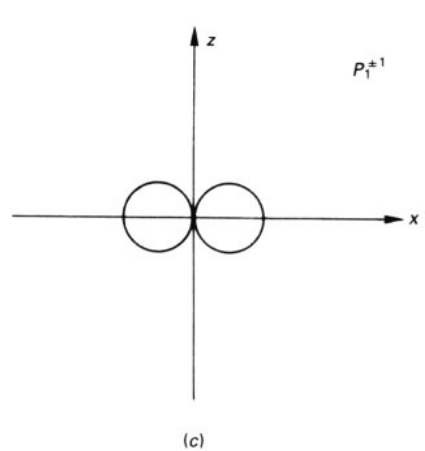
na przykład, na pierwszej orbicie (sferycznej) dwa elektrony różnią się kierunkiem krętu (spinu), tak jak to jest w atomie helu



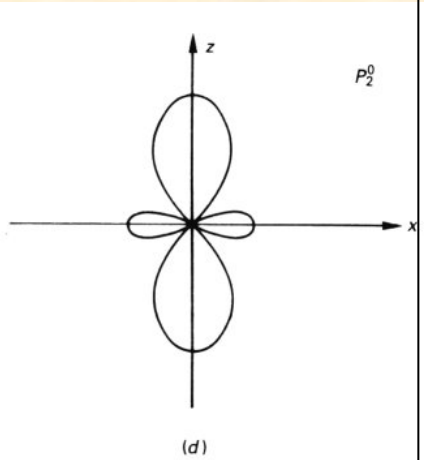
Podobnie na orbitalu *s* którejkolwiek z orbit, K, L, M itd. mieszczą się tylko dwa elektrony

orbitale *s*, *p*, *d* itd.

- Na drugiej orbicie, oprócz orbitalu *s* możliwe są trzy orbitale *p* (zorientowane w trzech kierunkach *x*, *y*, *z*)



kształt orbitalu *p*



kształt orbitalu *d*

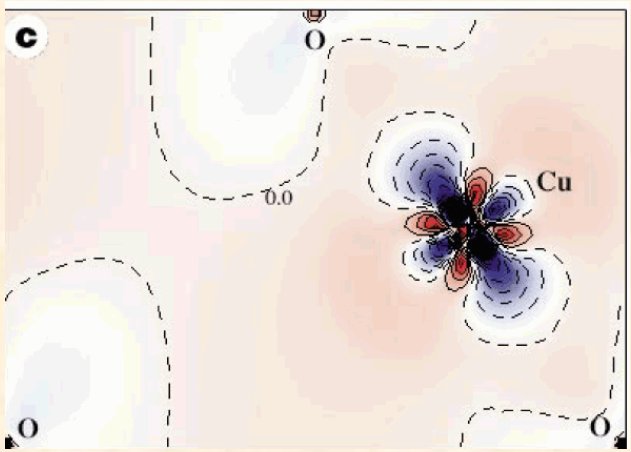
rozkład prawdopodobieństwa znalezienia elektronu na orbitalu:

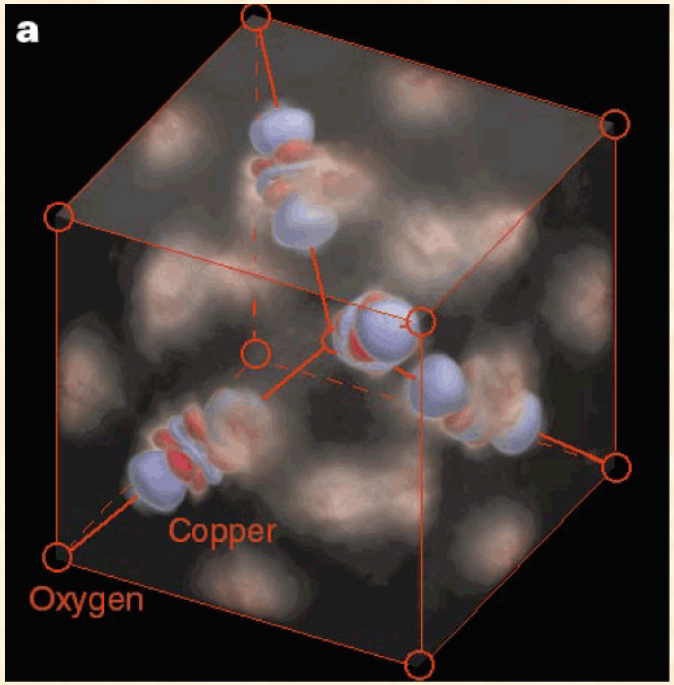
p_y i na orbitalu p_x

orbitale *s*, *p*, *d* itd.

- Na trzeciej orbicie, oprócz orbitalu *s* możliwe są trzy orbitale *p* oraz 5 orbitali *d* (o kształcie jakby obwarzanków z uszami)

! o dziwo, taki kształt orbitali niedawno zaobserwowano doświadczalnie!

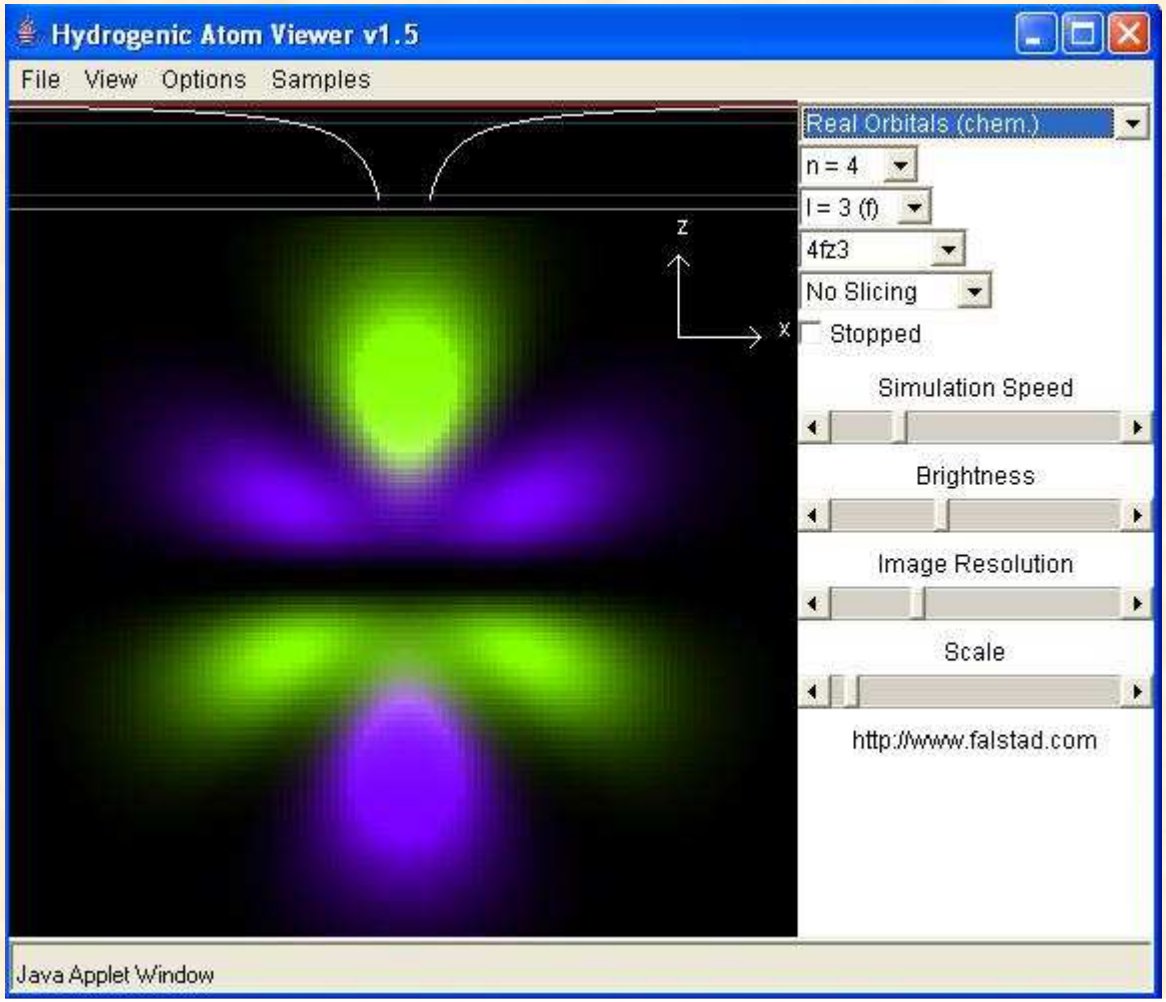




Direct observation of *d*-orbital holes and Cu–Cu bonding in Cu2O
J. M. Zuo, M. Kim, M. O'Keeffe and J. C. H. Spence
Nature 401, 49-52(2 September 1999)
doi:10.1038/43403

orbitale *s*, *p*, *d* itd.

- Orbitale *f* mają „kształt” jeszcze bardziej skomplikowany, jak np. jeden z orbitali 4*f*



Rozwiązanie dokładne: równanie Schrödingera

całego problemu — możemy dojść do pewnych wyników korzystając wyłącznie z faktu, że $V(r)$ przedstawia *pole centralne*, nie wiedząc nawet, że jest to pole kulombowskie. $V(r)$ reprezentuje pole centralne we względnej współrzędnej r. Dzięki rozdzieleniu współrzędnych możemy wyeliminować ruch środka masy atomu (patrz zadanie 2.1) i przejść do współrzędnych kulistych (r, θ, φ). Wprowadzając masę zredukowaną układu elektron-jądro, $m = m_0 M/(m_0 + M)$, otrzymujemy następującą prostą postać niezależnego od czasu równania Schrödingera, opisującego ruch względny

$$\left(\frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(r)\right)\psi = E\psi, \tag{2.30}$$

$$V(r) = -Ze^2/r, \tag{2.31}$$

gdzie

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2}\left\{\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right\}. \tag{2.32}$$

Początek układu współrzędnych znajduje się w jądrze.

Najważniejszą konsekwencją tego, że $V(r)$ jest polem centralnym, jest możliwość rozdzielenia części radialnej i kątowej:

$$\psi(r, \theta, \varphi) = R(r)\,Y(\theta, \varphi). \tag{2.33}$$

Możliwe jest także dalsze rozdzielenie

$$Y(\theta, \varphi) = \Theta(\theta)\,\Phi(\varphi). \tag{2.34}$$

W wyniku otrzymujemy trzy równania różniczkowe, z których każde zależy od jednej tylko współrzędnej r, θ, φ (patrz zadanie 2.2)

$$\frac{d^2\Phi}{d\varphi^2} = -m_l^2\Phi, \tag{2.35}$$

$$-\frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d\Theta}{d\theta}\right) + \frac{m_l^2}{\sin^2\theta}\Theta = l(l+1)\Theta, \tag{2.36}$$

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right) - \frac{l(l+1)}{r^2}R - \frac{2m}{\hbar^2}V(r)R + \frac{2mE}{\hbar^2}R = 0, \tag{2.37}$$

$-m_l^2$ i $l(l+1)$ są stałymi. Przekonamy się wkrótce dlaczego nadano im taką, a nie inną postać.

Z połączenia równań (2.35) i (2.36) dostajemy równanie dla całkowitej funkcji kątowej $Y(\theta, \varphi)$:

$$\left\{-\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) - \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right\}Y = l(l+1)\,Y. \tag{2.38}$$

Zarówno równanie (2.35), jak (2.36) są równaniami na wartości własne. Z czysto matematycznych rozważań* wynika, że jedynymi możliwymi do przyjęcia rozwiązaniami równania (2.36) są rozwiązania, dla których Θ jest różniczkowalne i regularne dla $\cos\theta = \pm 1$. Rozwiązania są proporcjonalne do stowarzyszonych funkcji Legendre'a $P_l^{m_l}(\cos\theta)$, które są wielomianami stopnia l, gdzie

$$l = 0, 1, 2, \ldots \tag{2.39}$$

m_l jest również liczbą całkowitą, dodatnią lub ujemną spełniającą warunek

$$|m_l| \leqslant l. \tag{2.40}$$

Rozwiązanie równania (2.35) ma postać

$$\Phi = e^{im_l\varphi}, \tag{2.41}$$

gdzie m_l, jak widzieliśmy, jest ograniczone do pewnych wartości całkowitych. Zatem funkcja Φ, podobnie jak Θ, jest jednoznaczną funkcją argumentu. Jednoznaczność ta nie jest koniecznym postulatem mechaniki falowej. Wynika ona z warunku, że mamy do czynienia z centralnym polem w przestrzeni (r, θ, φ).

Stałą proporcjonalności w $\Theta = N_l^{m_l} P_l^{m_l}(\cos\theta)$ można tak dobrać, żeby całkowita funkcja kątowa Y była unormowana do jedności. Wówczas Y, której dajemy wskaźniki l, m_l, jest *funkcją kulistą*

$$Y_l^{m_l}(\theta, \varphi) = (-1)^{m_l}\left[\frac{(2l+1)}{4\pi}\frac{(l-m_l)!}{(l+m_l)!}\right]^{\frac{1}{2}} P_l^{m_l}(\cos\theta)\,e^{im_l\varphi} \quad \text{dla} \quad m_l \geqslant 0 \tag{2.42}$$

i

$$Y_l^{-m_l} = (-1)^{m_l} Y_l^{m_l *},$$

gdzie

$$\int Y_l^{m_l *} Y_l^{m_l} d\Omega = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} \sin\theta\, d\theta\, Y_l^{m_l *} Y_l^{m_l} = 1. \tag{2.43}$$

---

* Matematyczne rozwiązania tych równań można znaleźć w podręcznikach mechaniki kwantowej.

Rozkłady kątowe: wielomiany Legendre'a

Funkcje kuliste spełniają warunek *ortogonalności*

$$\int Y_{l'}^{m_{l'}} Y_l^{m_l} d\Omega = \delta_{m_l, m_l'} \delta_{l,l'} . \tag{2.44}$$

Wprowadziliśmy zatem na drodze czysto matematycznej dwie liczby całkowite l i m_l. Ich interpretacją fizyczną zajmiemy się później. Kilka funkcji kulistych i ogólną postać $P_l^{m_l}(\cos\theta)$ daje tabela 2.1. Jeszcze raz podkreślamy, że dyskusja kątowej części funkcji falowej wynikła z samego istnienia centralnego pola, a nie ze szczególnej postaci $V(r)$.

Na to, by znaleźć wartości własne energii, trzeba rozwiązać równanie (2.37). Musimy teraz skorzystać z jawnej postaci $V(r) = -Ze^2/r$. Ograniczymy się do ujemnych wartości E, co odpowiada stanom związanym atomu. Zapewni nam to podstawienie

$$a^2 = -\frac{\hbar^2}{8mE} . \tag{2.45}$$

Przechodząc do nowej zmiennej:

$$\rho = r/a \tag{2.46}$$

i oznaczając

$$\lambda = 2mZe^2 a/\hbar^2 , \tag{2.47}$$

możemy przekształcić równanie (2.37) do postaci

$$\frac{1}{\rho}\frac{d}{d\rho}\left(\rho^2 \frac{dR}{d\rho}\right) + \left\{\frac{\lambda}{\rho} - \frac{1}{4} - \frac{l(l+1)}{\rho^2}\right\} R = 0 . \tag{2.48}$$

Często wprowadza się następującą funkcję falową

$$P(r) = rR . \tag{2.49}$$

W tym przypadku równanie (2.48) przybiera postać

$$\frac{d^2 P(r)}{d\rho^2} + \left\{\frac{\lambda}{\rho} - \frac{1}{4} - \frac{l(l+1)}{\rho^2}\right\} P(r) = 0 . \tag{2.50}$$

Rozwiązanie równania (2.48), takie że R pozostaje skończone, gdy $r \to \infty$ i zachowuje się właściwie w początku układu, to znaczy $rR \to 0$, gdy $r \to 0$, jest następujące

$$R(\rho) = e^{-\rho/2} \rho^l F(\rho) . \tag{2.51}$$

$F(\rho)$ jest wielomianem związanym z przyporządkowanymi wielomianami Laguerre'a. Z zapisu równania (2.51) widoczne są asymptotyczne postaci funkcji R: $e^{-\rho/2}$, gdy $\rho \to \infty$ i ρ^l, gdy $\rho \to 0$. Z warunku, że ten szereg potęgowy zmiennej ρ powinien urywać się dostajemy, że λ jest liczbą całkowitą

$$\lambda = n \quad (n \geqslant l+1) , \tag{2.52}$$

czyli

$$n = l + 1 + n' \quad (n' = 0, 1, 2, \ldots) \tag{2.53}$$

i znów wprowadziliśmy liczbę całkowitą na drodze czysto matematycznej.

Tabela 2.1. Funkcje kuliste

$$Y_0^0 = \sqrt{\frac{1}{4\pi}}$$

$$Y_1^0 = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos\theta$$

$$Y_1^{\pm 1} = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin\theta \, e^{\pm i\varphi}$$

$$Y_2^0 = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3\cos^2\theta - 1)$$

$$Y_2^{\pm 1} = \mp \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin\theta \cos\theta \, e^{\pm i\varphi}$$

$$Y_2^{\pm 2} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2\theta \, e^{\pm 2i\varphi}$$

$$Y_l^{m_l}(\theta, \varphi) = (-1)^{m_l} \left\{\frac{(2l+1)}{4\pi} \frac{(l-m_l)!}{(l+m_l)!}\right\}^{\frac{1}{2}} P_l^{m_l}(\cos\theta) \, e^{im_l\varphi} , \qquad m_l \geqslant 0$$

$$Y_l^{-m_l} = (-1)^{m_l} Y_l^{m_l *}$$

$$P_l^{m_l}(x) = (1-x^2)^{|m_l|/2} \frac{d^{|m_l|}}{dx^{|m_l|}} P_l(x)$$

$$P_l(x) = \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l}{dx^l} (x^2-1)^l$$

Warunek unormowania: $\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} \sin\theta \, d\theta \, Y_l^{m_l *} Y_l^{m_l} = 1$

Rozwiązanie dokładne: funkcje radialne

Funkcję R oznaczamy dwoma wskaźnikami n i l. $R_{nl}(r)$ jest unormowana zgodnie z warunkiem

$$\int_0^\infty R_{nl}^*(r)\,R_{nl}(r)\,r^2 dr = 1\,, \tag{2.54}$$

czyli

$$\int_0^\infty P_{nl}^*(r)\,P_{nl}(r)\,dr = 1\,, \tag{2.55}$$

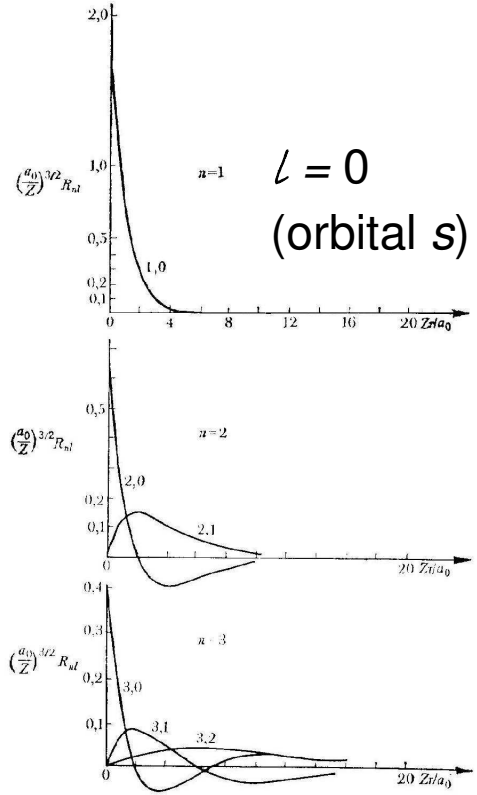
wobec czego całkowita funkcja falowa $\psi_{n,l,m_l} = R_{nl}(r)\;Y_l^m(\theta,\varphi)$ jest także unormowana. Zestawienie funkcji R_{nl} dla małych wartości n i l dane jest w tabeli 2.2. Wykresy R_{nl} dane są na rysunku 2.1. Widać z nich, że liczba kwantowa n stanowi o radialnym zasięgu funkcji falowej.

Jest widoczne, że zachodzi istotna jakościowa różnica między funkcjami falowymi dla $l=0$ i $l\neq 0$. Dla $l\neq 0$, $R_{nl}(r=0)$ znika. Równanie (2.50) ma postać jednowymiarowego równania ruchu, w którym wyraz $-l(l+1)/\rho^2$ opisuje efektywny potencjał odśrodkowy, który utrzymuje elektron z dala od jądra. Natomiast dla $l=0$ w potencjale brak tego wyrazu i gęstość

Tabela 2.2.

$R_{nl}(r)$
$R_{10} = \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} 2 \exp\left(-\frac{Zr}{a_0}\right)$
$R_{20} = \left(\frac{Z}{2a_0}\right)^{\frac{3}{2}} 2\left(1-\frac{Zr}{2a_0}\right) \exp\left(-\frac{Zr}{2a_0}\right)$
$R_{21} = \left(\frac{Z}{2a_0}\right)^{\frac{3}{2}} \frac{2}{\sqrt{3}}\left(\frac{Zr}{2a_0}\right) \exp\left(-\frac{Zr}{2a_0}\right)$
$R_{30} = \left(\frac{Z}{3a_0}\right)^{\frac{3}{2}} 2\left[1-2\frac{Zr}{3a_0}+\frac{2}{3}\left(\frac{Zr}{3a_0}\right)^2\right] \exp\left(-\frac{Zr}{3a_0}\right)$
$R_{31} = \left(\frac{Z}{3a_0}\right)^{\frac{3}{2}} \frac{4\sqrt{2}}{3}\left(\frac{Zr}{3a_0}\right)\left(1-\frac{1}{2}\frac{Zr}{3a_0}\right) \exp\left(-\frac{Zr}{3a_0}\right)$
$R_{32} = \left(\frac{Z}{3a_0}\right)^{\frac{3}{2}} \frac{2\sqrt{2}}{3\sqrt{5}}\left(\frac{Zr}{3a_0}\right)^2 \exp\left(-\frac{Zr}{3a_0}\right)$
$a_0 = \frac{\hbar^2}{m_0 e^2}$

Warunek unormowania: $\int_0^\infty R_{nl}^* R_{nl}\, r^2\, dr = 1$



Rys. 2.1. Radialne funkcje falowe dla atomu wodoru. Zwróćmy uwagę na różne skale osi rzędnych

prawdopodobieństwa w początku układu wynosi

$$|\psi_{n00}(0)|^2 = \frac{Z^3}{\pi a_0^3 n^3}\,. \tag{2.56}$$

Własność ta ma szczególne znaczenie w teorii struktury nadsubtelnej.

Rozwiązania dokładne: promień Bohra

Ujemne wartości własne energii otrzymujemy z warunku (2.52) i równania (2.47):

$$E_n = -\frac{1}{2}\frac{Z^2 e^4 m}{\hbar^2 n^2}. \tag{2.57}$$

Jest to po prostu wzór na skwantowaną energię znaleziony przez Bohra. Kolejne *główne liczby kwantowe* n odpowiadają liczbom $n=1, 2, 3, \ldots$ z teorii Bohra. $n-l-1$, czyli n' z równania (2.53) daje liczbę węzłów funkcji R_{nl}. (Z analizy funkcji kulistych wynika, że mają one $l-|m_l|$ węzłów w przedziale $0<\theta<\pi$). Stąd dostajemy interpretację głównej liczby kwantowej n: jest ona ściśle powiązana z radialną częścią funkcji falowej w przybliżeniu centralnego pola.

We wzorze (2.57) występuje masa zredukowana układu. Zatem jest on słuszny nie tylko dla wodoru, ale dla wszystkich atomów wodorowych, takich jak deuter, tryt, miuonium, pozytonium itd. Jawna zależność od liczby atomowej Z sprawia, że wzór ten można stosować również w przypadku He^+, Li^{++} ... (patrz zadanie 2.9). Równanie (2.57) możemy napisać w takiej postaci, aby pokazać zależność izotopową, mianowicie

$$E_n = -\left(\frac{1}{2}\frac{e^4 m_0}{\hbar^2}\right)\frac{Z^2}{n^2}\frac{M}{m_0+M}, \tag{2.58}$$

czyli

$$E_n = -hcR_\infty \frac{Z^2}{n^2}\frac{M}{m_0+M}. \tag{2.59}$$

R_∞ jest stałą uniwersalną zwaną rydbergiem, odpowiadającą przypadkowi, gdy masę jądra przyjmujemy za nieskończoną

$$R_\infty = \frac{1}{hc}\left(\frac{1}{2}\frac{m_0 e^4}{\hbar^2}\right) = 109\,737{,}31\ \mathrm{cm}^{-1}. \tag{2.60}$$

=13,6 eV

Wartość R_∞ podaje się zazwyczaj w elektronowoltach lub cyklach na sekundę. R_∞ jest równe około 13,6 eV lub około $3{,}3\cdot 10^{15}$ c/s. Ilościową dyskusją widma wodoru zajmiemy się w paragrafie 2.6.

Podstawiając $n=1$, $Z=1$, $m=m_0$ dostajemy inną stałą, a_0 — promień pierwszej orbity Bohra:

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{m_0 e^2} = 0{,}529\,171\cdot 10^{-8}\ \mathrm{cm}. \tag{2.61}$$

=0.53Å

Tabela 2.3.

$\langle r^k\rangle = \int_0^\infty R_{nl}^* r^k R_{nl} r^2\, dr$
$\langle r\rangle = \frac{1}{2}[3n^2 - l(l+1)]\frac{a_0}{Z}$
$\langle r^2\rangle = \frac{1}{2}[5n^2+1-3l(l+1)]\,n^2\left(\frac{a_0}{Z}\right)^2$
$\langle r^{-1}\rangle = \frac{1}{n^2}\left(\frac{Z}{a_0}\right)$
$\langle r^{-2}\rangle = \frac{2}{(2l+1)\,n^3}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^2$
$\langle r^{-3}\rangle = \frac{1}{l(l+\frac{1}{2})(l+1)\,n^3}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^3$

W teorii Bohra „promień orbity elektronu" dla atomu wodoru o nieskończonej masie jądra wynosi $n^2(a_0/Z)$. Natomiast w mechanice kwantowej mówimy o wartościach oczekiwanych r w różnych potęgach. Można je obliczyć ze wzoru

$$\langle r^k\rangle = \int_0^\infty R_{nl}^* r^k R_{nl} r^2 dr. \tag{2.62}$$

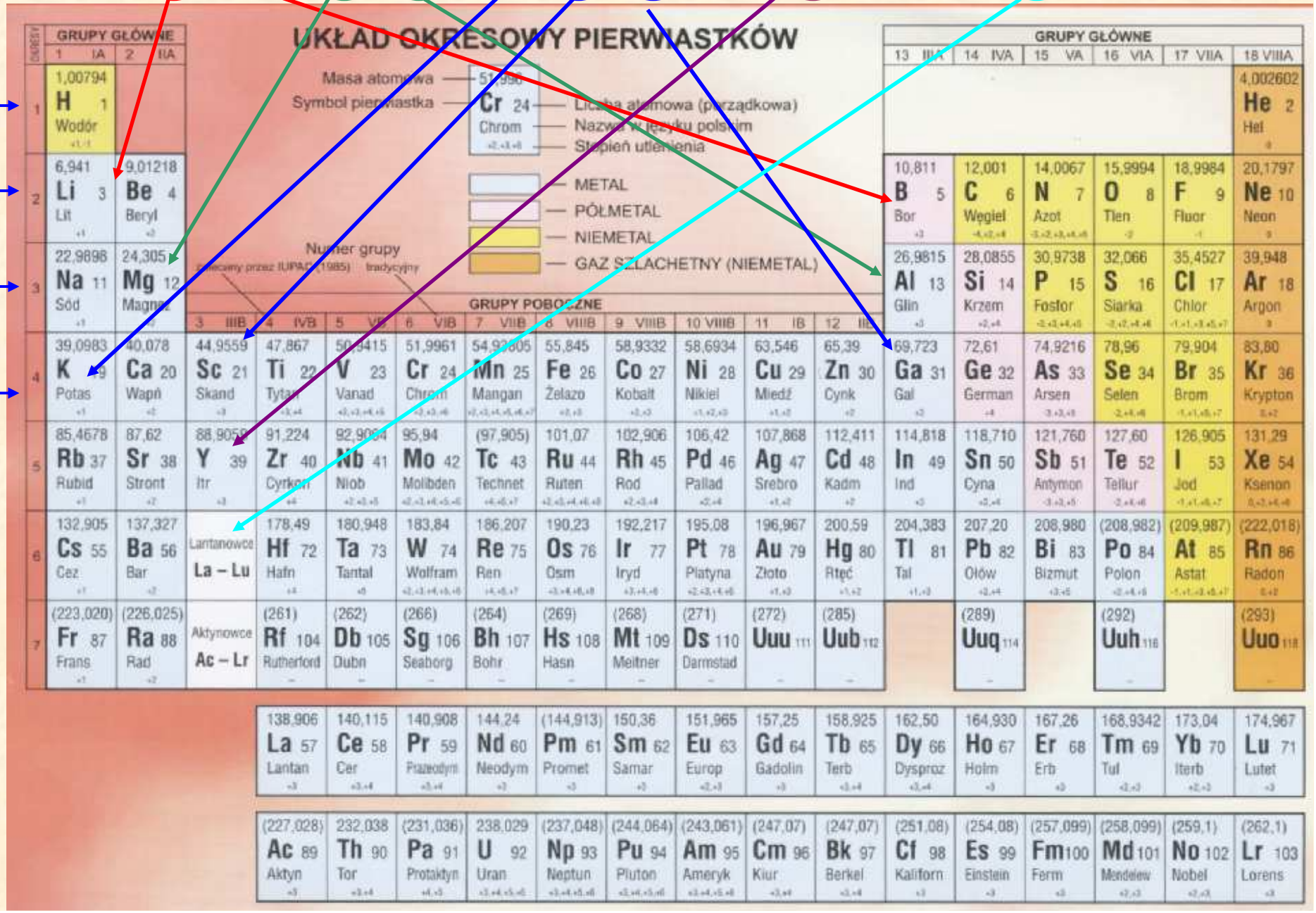
Zestawienie $\langle r^k\rangle$ dla małych dodatnich i ujemnych k dane jest w tabeli 2.3. Zwróćmy uwagę, że promieniowi orbity Bohra odpowiada $\langle r^{-1}\rangle$, natomiast $\langle r\rangle$ dla $l=n-1$ (co odpowiada kołowej orbicie elektronu w teorii Bohra) wynosi

$$\langle r\rangle_{l=n-1} = n^2\left(1+\frac{1}{2n}\right)\frac{a_0}{Z}.$$

Zgodność z wartością podaną przez Bohra otrzymuje się tylko w przypadku, gdy $n\to\infty$. Jest to przykład *zasady odpowiedniości*, która żąda, aby mechanika falowa obejmowała mechanikę klasyczną jako przypadek graniczny, to znaczy przypadek, który ideowo odpowiada $h\to 0$, w praktyce zaś oznacza $n\to\infty$.

Zaproponowany przez Bohra model atomu wodoru interpretowany jest w mechanice falowej zgodnie z duchem zasady odpowiedniości. Bardzo klasyczne ujęcie ruchu cząstki, jako ruchu planetarnego, zostało przez me-

W kolejnych okresach zapełnianie są poszczególne orbitale: okres 1) 1*s*; okres 2) 2*s* i 2*p*; 3) 3*s* i 3*p* 4) 4*s*, 3*d* i 4*p* 5) 5*s*, 4*d* i 5*p* 6) 6*s*, 4*f*, 5*d* i 6*p* *itd.*



W kolejnych okresach zapełnianie są poszczególne orbitale: okres 1) 1*s*;
okres 2) 2*s* i 2*p*; 3) 3*s* i 3*p* 4) 4*s*, 3*d* i 4*p* 5) 5*s*, 4*d* i 5*p* 6) 6*s*, 4*f*, 5*d* i 6*p* *itd.*

1s

2s 2p

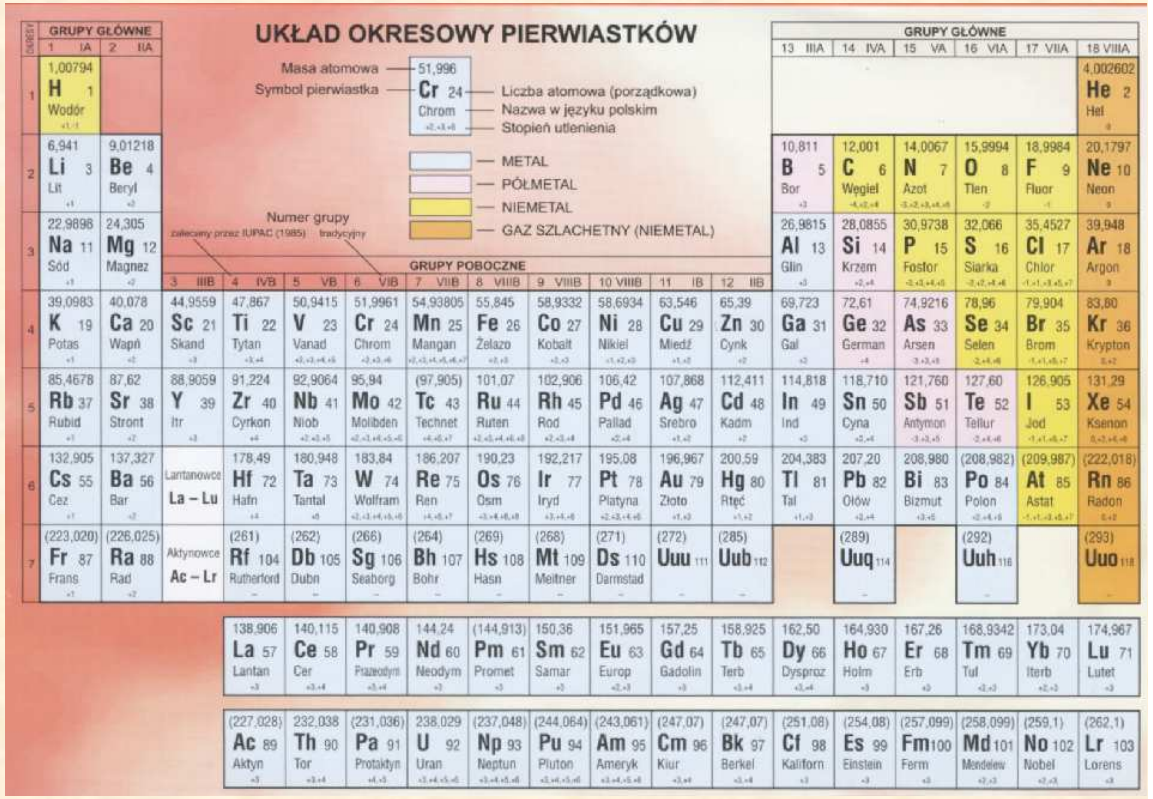
3s 3p 3d

4s 4p 4d 4f

5s 5p 5d 5f 5g

6s 6p 6d 6f 6g 6h

7s 7p 7d 7f 7g 7h



W kolejnych okresach zapełnianie są poszczególne orbitale: okres 1) 1*s*;
okres 2) 2*s* i 2*p*; 3) 3*s* i 3*p* 4) 4*s*, 3*d* i 4*p* 5) 5*s*, 4*d* i 5*p* 6) 6*s*, 4*f*, 5*d* i 6*p* *itd.*

1s

2s 2p

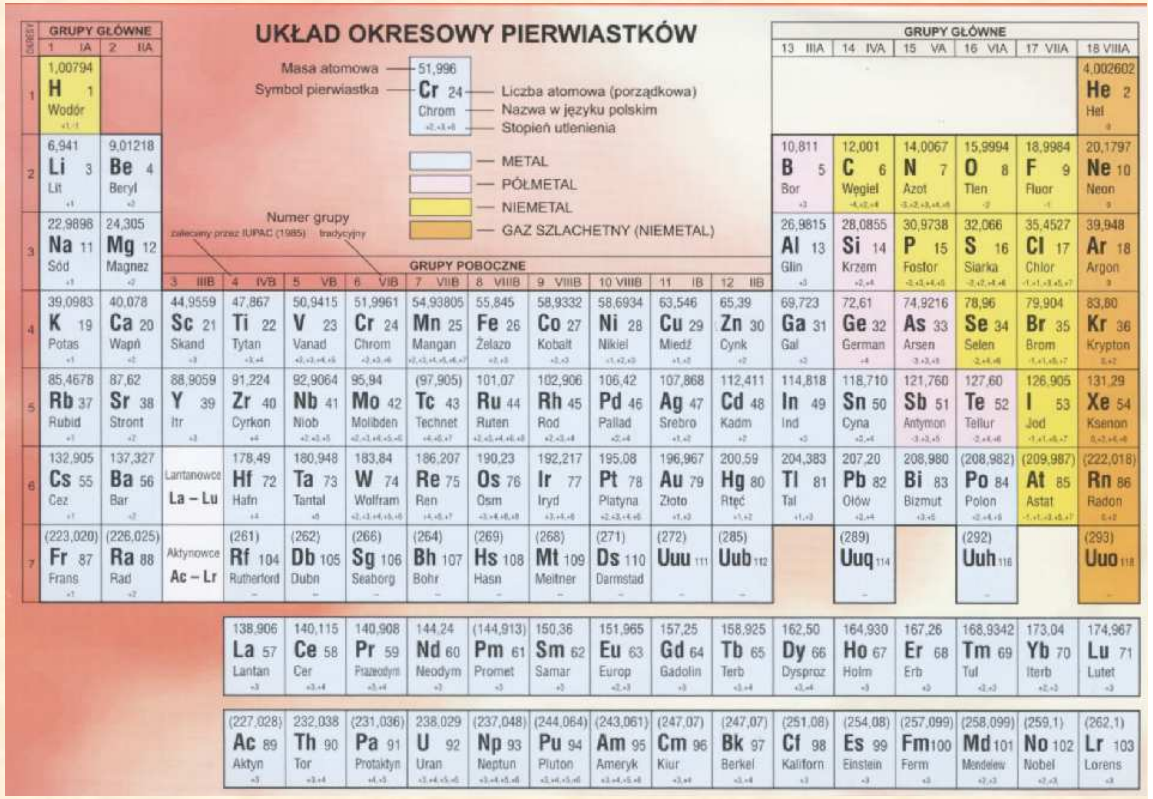
3s 3p 3d

4s 4p 4d 4f

5s 5p 5d 5f 5g

6s 6p 6d 6f 6g 6h

7s 7p 7d 7f 7g 7h



W kolejnych okresach zapełnianie są poszczególne orbitale: okres 1) 1*s*;
okres 2) 2*s* i 2*p*; 3) 3*s* i 3*p* 4) 4*s*, 3*d* i 4*p* 5) 5*s*, 4*d* i 5*p* 6) 6*s*, 4*f*, 5*d* i 6*p* *itd.*

1s

2s 2p

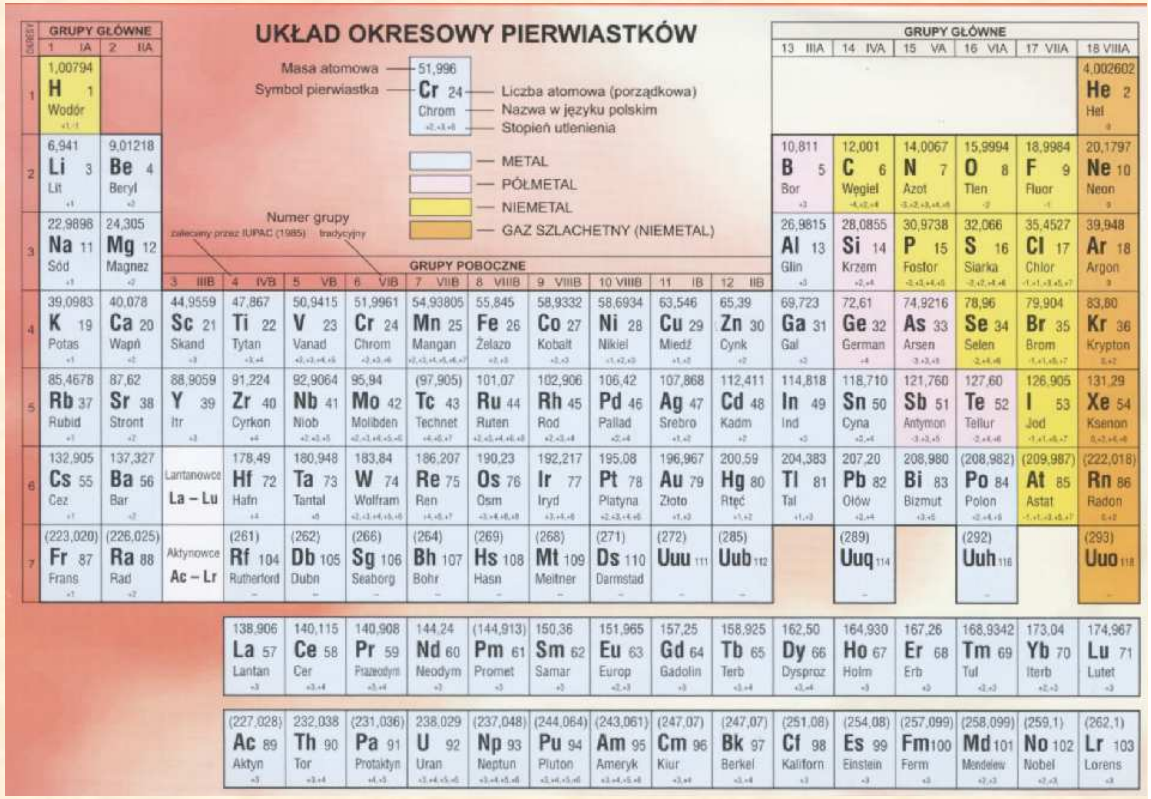
3s 3p 3d

4s 4p 4d 4f

5s 5p 5d 5f 5g

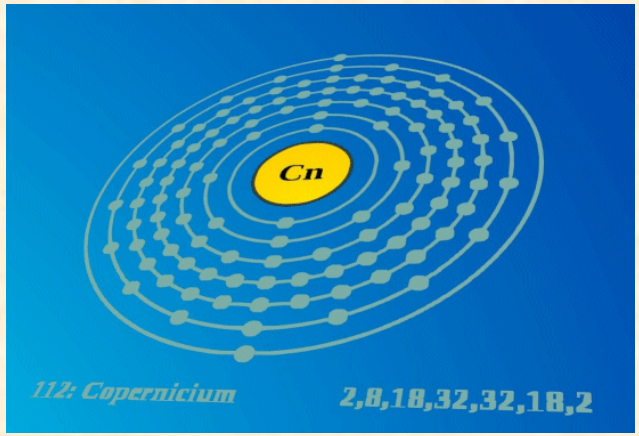
6s 6p 6d 6f 6g 6h

7s 7p 7d 7f 7g 7h



!

Cn
Z=112



$Cn = 1s^2\ 2s^2p^6\ 3s^2p^6d^{10}\ 4s^2p^6d^{10}f^{14}\ 5s^2p^6d^{10}f^{14}\ 6s^2p^6d^{10}\ 7s^2$

oczywiście, jest to porządek, w którym jest wiele wyjątków, jak na przykład wanad (Z=23) [Ar] $3d^3\,4s^2$ a następnie chrom (Z=24) [Ar] $3d^5\,4s^1$

Liczba atomowa (porządkowa)	Symbol pierwiastka	Nazwa w języku angielskim	Rok (okres hist.) odkrycia pierwiastka lub otrzymania go w stanie wolnym	Konfiguracja elektronowa atomu w stanie podstawowym
1	H	*Hydrogen*	1766	$1s^1$
2	He	*Helium*	1868	$1s^2$
3	Li	*Lithium*	1817	$[He]2s^1$
4	Be	*Beryllium*	1798	$[He]2s^2$
5	B	*Boron*	1828	$[He]2s^2 2p^1$
6	C	*Carbon*	Starożytność	$[He]2s^2 2p^2$
7	N	*Nitrogen*	1772	$[He]2s^2 2p^3$
8	O	*Oxygen*	1776	$[He]2s^2 2p^4$
9	F	*Fluorine*	1886	$[He]2s^2 2p^5$
10	Ne	*Neon*	1898	$[He]2s^2 2p^6$
11	Na	*Sodium*	1807	$[Ne]3s^1$
12	Mg	*Magnesium*	1808	$[Ne]3s^2$
13	Al	*Aluminium*	1825	$[Ne]3s^2 3p^1$
14	Si	*Silicon*	1823	$[Ne]3s^2 3p^2$
15	P	*Phosphorus*	1669	$[Ne]3s^2 3p^3$
16	S	*Sulfur*	Starożytność	$[Ne]3s^2 3p^4$
17	Cl	*Chlorine*	1774	$[Ne]3s^2 3p^5$
18	Ar	*Argon*	1894	$[Ne]3s^2 3p^6$
19	K	*Potassium*	1807	$[Ar]4s^1$
20	Ca	*Calcium*	1808	$[Ar]4s^2$
21	Sc	*Skandium*	1879	$[Ar]\,3d^1 4s^2$
22	Ti	*Titanium*	1791	$[Ar]3d^2 4s^2$
23	V	*Vanadium*	1830	$[Ar]3d^3 4s^2$
24	Cr	*Chromium*	1797	$[Ar]3d^5 4s^1$
25	Mn	*Manganese*	1774	$[Ar]3d^5 4s^2$
26	Fe	*Iron*	Starożytność	$[Ar]3d^6 4s^2$
27	Co	*Cobalt*	1737	$[Ar]3d^7 4s^2$
28	Ni	*Nickel*	1751	$[Ar]3d^8 4s^2$
29	Cu	*Copper*	Starożytność	$[Ar]3d^{10} 4s^1$
30	Zn	*Zinc*	1746	$[Ar]3d^{10} 4s^2$
31	Ga	*Gallium*	1875	$[Ar]3d^{10} 4s^2 4p^1$
32	Ge	*Germanium*	1886	$[Ar]3d^{10} 4s^2 4p^2$
33	As	*Arsenic*	1250	$[Ar]3d^{10} 4s^2 4p^3$
34	Se	*Selenium*	1817	$[Ar]3d^{10} 4s^2 4p^4$
35	Br	*Bromine*	1826	$[Ar]3d^{10} 4s^2 4p^5$
36	Kr	*Krypton*	1898	$[Ar]3d^{10} 4s^2 4p^6$
37	Rb	*Rubidium*	1861	$[Kr]5s^1$
38	Sr	*Strontium*	1790	$[Kr]5s^2$

	Liczba atomowa (porządkowa)	Symbol pierwiastka	Nazwa w języku angielskim	Rok (okres hist.) odkrycia pierwiastka lub otrzymania go w stanie wolnym	Konfiguracja elektronowa atomu w stanie podstawowym
LANTANOWCE	57	La	*Lanthanum*	1839	$[Xe]5d^1 6s^2$
	58	Ce	*Cerium*	1803	$[Xe]4f^2 6s^2$
	59	Pr	*Praseodymium*	1885	$[Xe]4f^3 6s^2$
	60	Nd	*Neodymium*	1945	$[Xe]4f^4 6s^2$
	61	Pm	*Promethium*	1945	$[Xe]4f^5 6s^2$
	62	Sm	*Samarium*	1879	$[Xe]4f^6 6s^2$
	63	Eu	*Europium*	1901	$[Xe]4f^7 6s^2$
	64	Gd	*Gadolinium*	1880	$[Xe]4f^7 5d^1 6s^2$
	65	Tb	*Terbium*	1843	$[Xe]4f^9 6s^2$
	66	Dy	*Dysprosium*	1886	$[Xe]4f^{10} 6s^2$
	67	Ho	*Holmium*	1878	$[Xe]4f^{11} 6s^2$
	68	Er	*Erbium*	1843	$[Xe]4f^{12} 6s^2$
	69	Tm	*Thulium*	1879	$[Xe]4f^{13} 6s^2$
	70	Yb	*Ytterbium*	1878	$[Xe]4f^{14} 6s^2$
	71	Lu	*Lutetium*	1907	$[Xe]4f^{14} 5d^1 6s^2$
	72	Hf	*Hafnium*	1923	$[Xe]4f^{14} 5d^2 6s^2$
	73	Ta	*Tantalum*	1802	$[Xe]4f^{14} 5d^3 6s^2$
	74	W	*Tungsten*	1783	$[Xe]4f^{14} 5d^4 6s^2$
	75	Re	*Rhenium*	1925	$[Xe]4f^{14} 5d^5 6s^2$
	76	Os	*Osmium*	1804	$[Xe]4f^{14} 5d^6 6s^2$
	77	Ir	*Iridium*	1804	$[Xe]4f^{14} 5d^7 6s^2$
	78	Pt	*Platinum*	1735	$[Xe]4f^{14} 5d^9 6s^1$
	79	Au	*Gold*	Starożytność	$[Xe]4f^{14} 5d^{10} 6s^1$
	80	Hg	*Mercury*	Starożytność	$[Xe]4f^{14} 5d^{10} 6s^2$
	81	Tl	*Tallium*	1802	$[Xe]4f^{14} 5d^{10} 6s^2 6p^1$
	82	Pb	*Lead*	Starożytność	$[Xe]4f^{14} 5d^{10} 6s^2 6p^2$
	83	Bi	*Bismuth*	Średniowiecze	$[Xe]4f^{14} 5d^{10} 6s^2 6p^3$
	84	Po	*Polonium*	1898	$[Xe]4f^{14} 5d^{10} 6s^2 6p^4$
	85	At	*Astatine*	1940	$[Xe]4f^{14} 5d^{10} 6s^2 6p^5$
	86	Rn	*Radon*	1900	$[Xe]4f^{14} 5d^{10} 6s^2 6p^6$
	87	Fr	*Francium*	1939	$[Rn]7s^1$
	88	Ra	*Radium*	1898	$[Rn]7s^2$
AKTYWCE	89	Ac	*Actinium*	1899	$[Rn]6d^1 7s^2$
	90	Th	*Thorium*	1828	$[Rn]6d^2 7s^2$
	91	Pa	*Protactinum*	1917	$[Rn]5f^2 6d^1 7s^2$
	92	U	*Uranium*	1789	$[Rn]5f^3 6d^1 7s^2$
	93	Np	*Neptunium*	1940	$[Rn]5f^4 6d^1 7s^2$
	94	Pu	*Plutonium*	1940	$[Rn]5f^6 7s^2$

Najważniejsze konfiguracje 1,2

Okres	Z=	Atom	konfiguracja
1	1	H	$1s^1$
	2	He	$1s^2$
2	3	Li	$1s^2 2s^1$ = $[He]2s^1$
	4	Be	$[He]2s^2$
	5		
	6	C	$[He]2s^2 2\mathbf{p^2}$ *
	7		
	8		
	9	F	$[He]2s^2 2p^5$
	10	Ne	$[He]2s^2 2p^6$

*lub hybrydyzacja sp^3 (diament, CH_4) albo sp^2(grafit)

Najważniejsze konfiguracje 3

Okres	Z=	Atom	konfiguracja
3	11	Na	$1s^2 2s^2 p^6 3s^1$=[Ne]$3s^1$
	12	Mg	[Ne]$3s^2$
	13	Al	[Ne]$3s^2 3p^1$
	14	Si	[Ne]$3s^2 3p^2$
		….	….
	18	Ar	[Ne]$\mathbf{3s^2 2p^6}$

Najważniejsze konfiguracje 4

3	18	Ar	$[Ne]3s^2 3p^6$
4	19	K	$1s^2\ 2s^2p^6\ 3s^2p^6\ 4s^1 = [Ar]4s^1$
	20	Ca	$1s^2 2s^2p^6 3s^2p^6 4s^2 = [Ar]4s^2$
	21	Sc	$1s^2\ 2s^2p^6\ 3s^2p^6 3\mathbf{d^1}\ 4s^2$
	22	Ti	$[Ar]3d^2\ 4s^2$ samoloty
	23	V	$[Ar]3d^3\ 4s^2$
	24	Cr	$[Ar]3d^{\mathbf{5}}\ 4s^1$ wart. I, II, III, V
	25	Mn	$[Ar]3d^5\ 4s^2$
	26	Fe	$[Ar]3d^6\ 4s^2$ magnetyczny
	27	Co	

cdn.

Najważniejsze konfiguracje 4, cd

4	27	Co	
	28	Ni	[Ar]$3d^8\ 4s^2$
	29	Cu	[Ar]$3\mathbf{d^{10}}\ 4s^1$ miedź
	30	Zn	[Ar]$3d^{10}\ 4s^2$ powł. antykorozyjne
	31	Ga	[Ar]$3d^{10}\ 4s^2p^1$
	32	Ge	podobnie jak krzem
		…	
	36	Kr	[Ar]$3d^{10}\ 4s^2p^6$ gaz szlachetny

Najważniejsze konfiguracje 5

4	36	Kr	$1s^2\ 2s^2p^6\ 3s^2p^6d^{10}\ 4s^2p^6$
5	37	Rb	[Kr] $5s^1$ metal alkaliczny
	38	Sr	[Kr] $5s^2$
	39	Y	[Kr] $4d^1\ 5s^2$
	40	Zr	[Kr] $4d^2\ 5s^2$ ZrO_2 – „diament”
	41	Nb	[Kr] $4d^{\mathbf{4}}\ 5s^{\mathbf{1}}$
	42	Mo	[Kr] $4d^{\mathbf{5}}\ 5s^1$ metal b. twardy
	…	…	[Kr] $4d^n\ 5s^1$
	45	Rh	[Kr] $4d^8\ 5s^1$
	46	Pd	[Kr] $4d^{\mathbf{10}}\ 5s^{\mathbf{2}}$ metal szlachetny

cdn.

Najważniejsze konfiguracje 5, cd

5	47	Ag	[Kr] $4d^{10}\,5s^{1}$ srebro
	48	Cd	[Kr] $4d^{10}\,5s^{2}$ kadm ≈ cynk
	49	In	
	50	Sn	[Kr] $4d^{10}\,4s^{2}p^{2}$ cyna
		…	
5	54	Xe	[Kr]$4d^{10}\,5s^{2}p^{6}$ gaz szlachetny

Najważniejsze konfiguracje 6

5	54	Xe	$1s^2\ 2s^2p^6\ 3s^2p^6d^{10}\ 4s^2p^6d^{10}\ 5s^2p^6$
6	55	Cs	[Xe] $6s^1$ metal alkaliczny
	56	Ba	[Xe] $6s^2$
	57	La	[Xe] $\mathbf{5d^1}\ 6s^2$
			Lantanowce: dużo, blisko położonych poziomów elektronowych ↓
	58	Ce	[Xe] $\mathbf{4f^2}\ 5d^0\ 6s^2$
	59	Pr	[Xe] $4f^3\ 6s^2$
	…	…	[Xe] $4f^n\ 6s^2$
	64	Gd	[Xe] $4f^7\ 5d^1\ 6s^2$
	65	Tb	[Xe] $4f^9\ 6s^2$

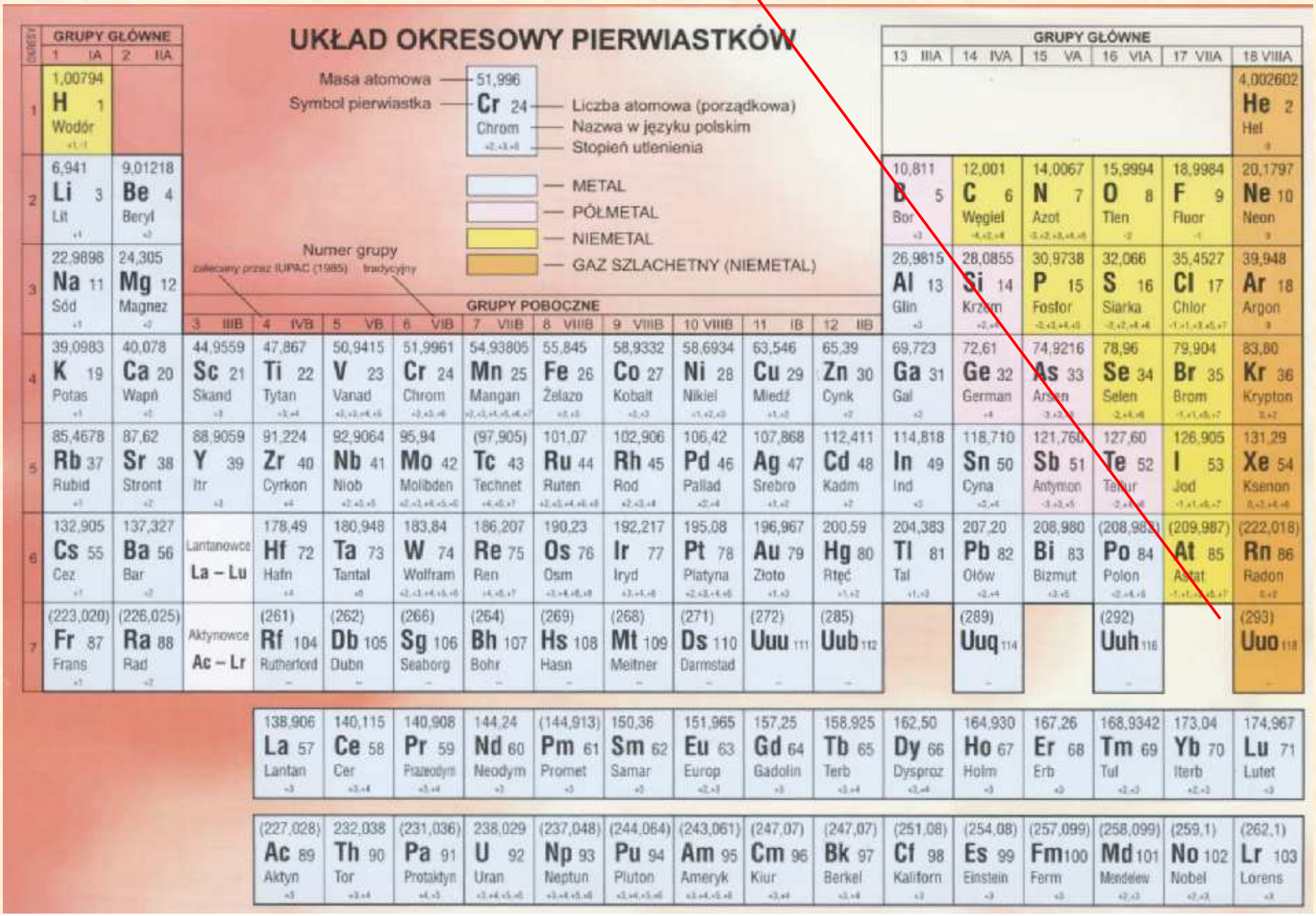
cdn.

Najważniejsze konfiguracje 6, cd

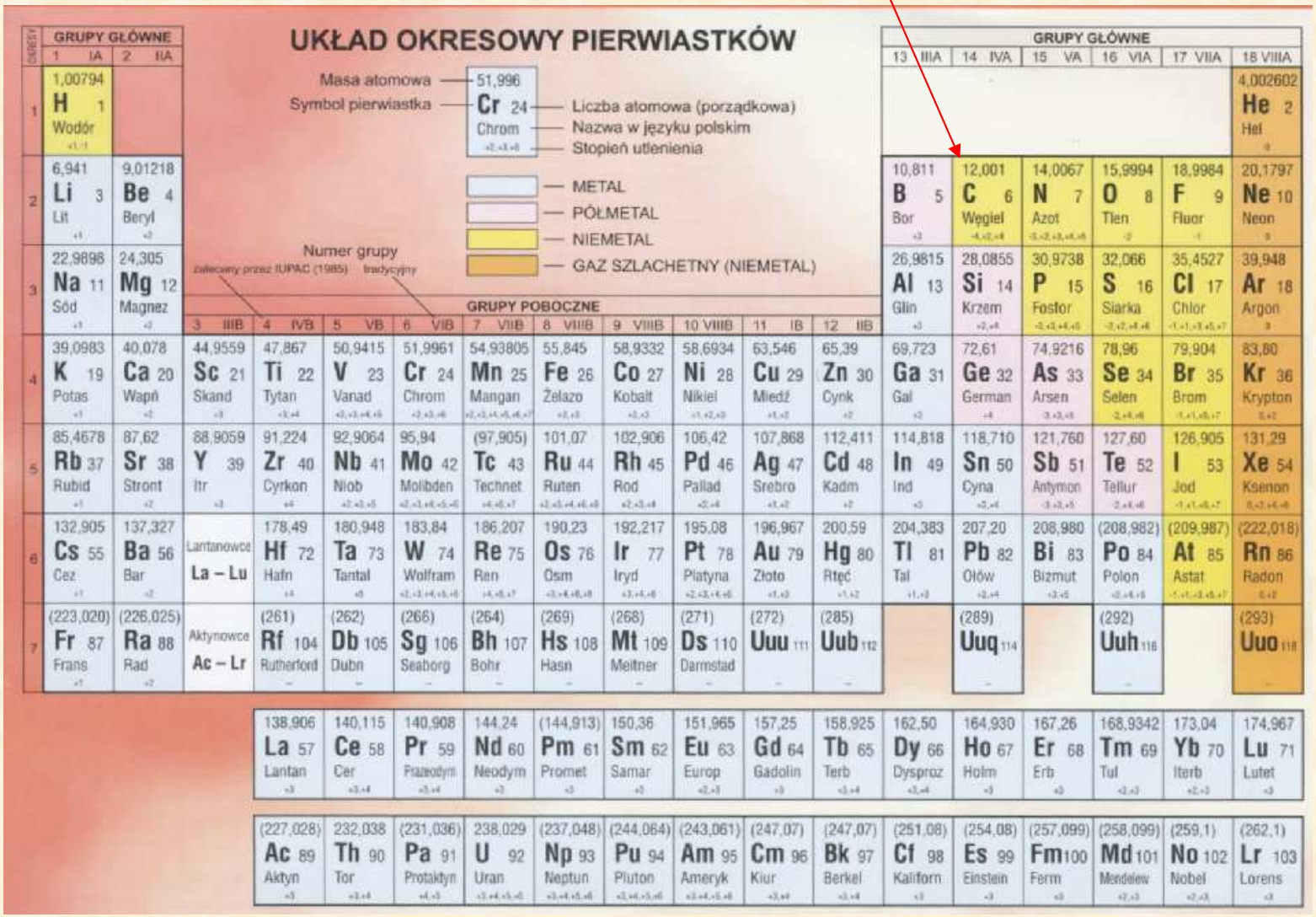
6	79	Au	[Xe] $4f^{14}\ 5d^{10}\ 6s^{1}$ złoto
	80	Hg	[Xe] $4f^{14}\ 5d^{10}\ 6s^{2}$ rtęć
	…	…	
	84	Po	[Xe] $4f^{14}\ 5d^{10}\ 6s^{2}\ 6p^{4}$ polon
		…	
	86	Rn	[Xe] $4f^{14}\ 5d^{10}\ 6s^{2}\ 6p^{6}$ gaz szlachetny, radioaktywny - rozpada się na polon

7º okres jest podobny do 6º, np. ^{88}Rad przypomina Bar
ale to już świat radioaktywny, mało przydatny „materiałowcom”

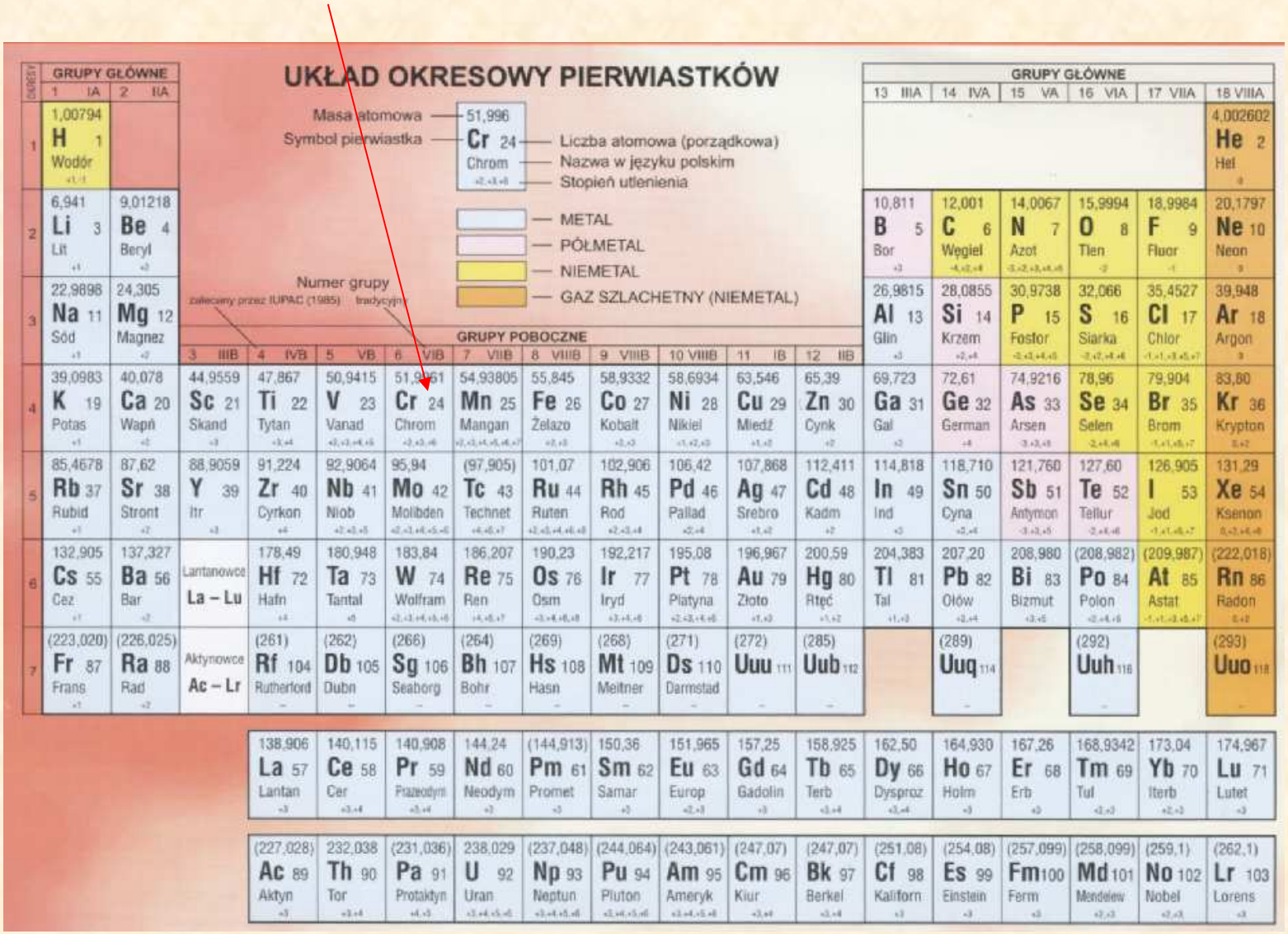
Metale chętniej oddają elektrony (tworzą jony dodatnie)
niemetale chętniej przyjmują elektrony (tworzą jony ujemne)



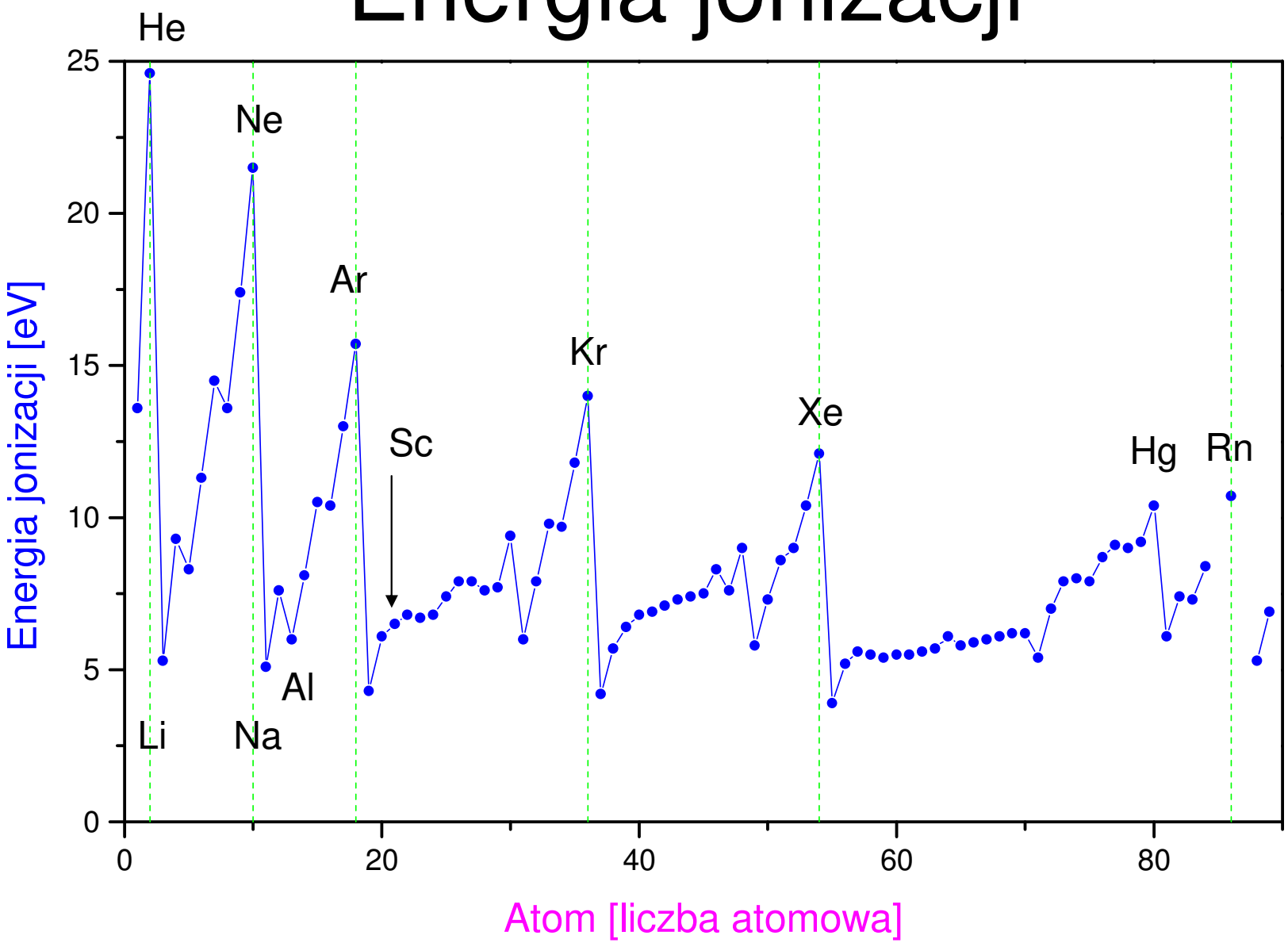
Ilość elektronów na najbardziej „zewnętrznym” orbitalu określa własności chemiczne pierwiastka. Na przykład węgiel, z dwoma elektronami na orbitalu *2s* i dwoma na orbitalu (orbitalach) 2*p* może oddawać 4 elektrony (jak w drobinie CO_2) lub przyjmować 4 elektrony (jak w drobinie CH_4).



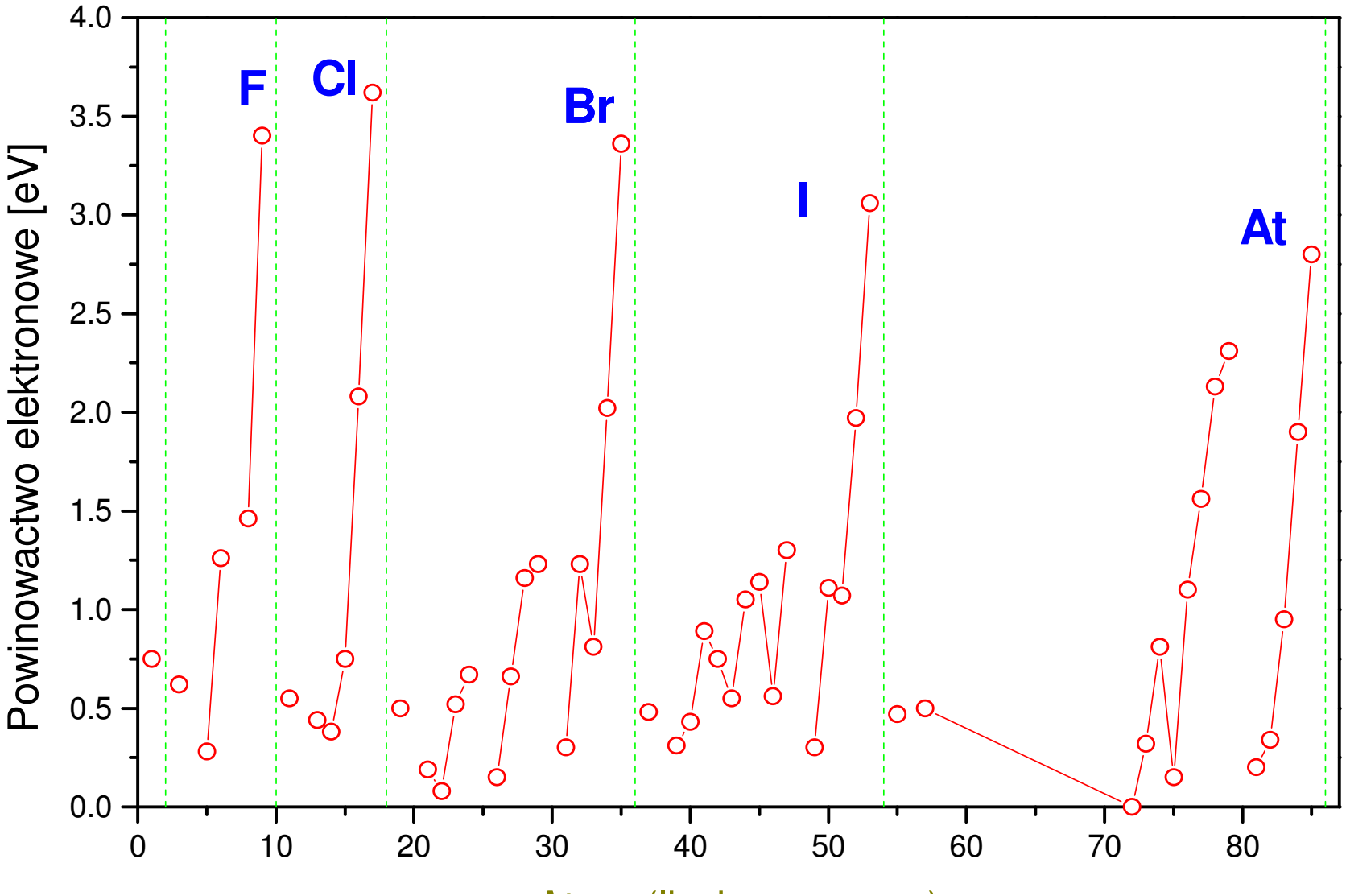
Ilość elektronów na najbardziej „zewnętrznym” orbitalu określa własności chemiczne pierwiastka. Atomy chromu, manganu, żelaza nie mają ściśle określonej jednej „wartościowości” – mogą przyjmować lub oddawać różne ilości elektronów.



Energia jonizacji

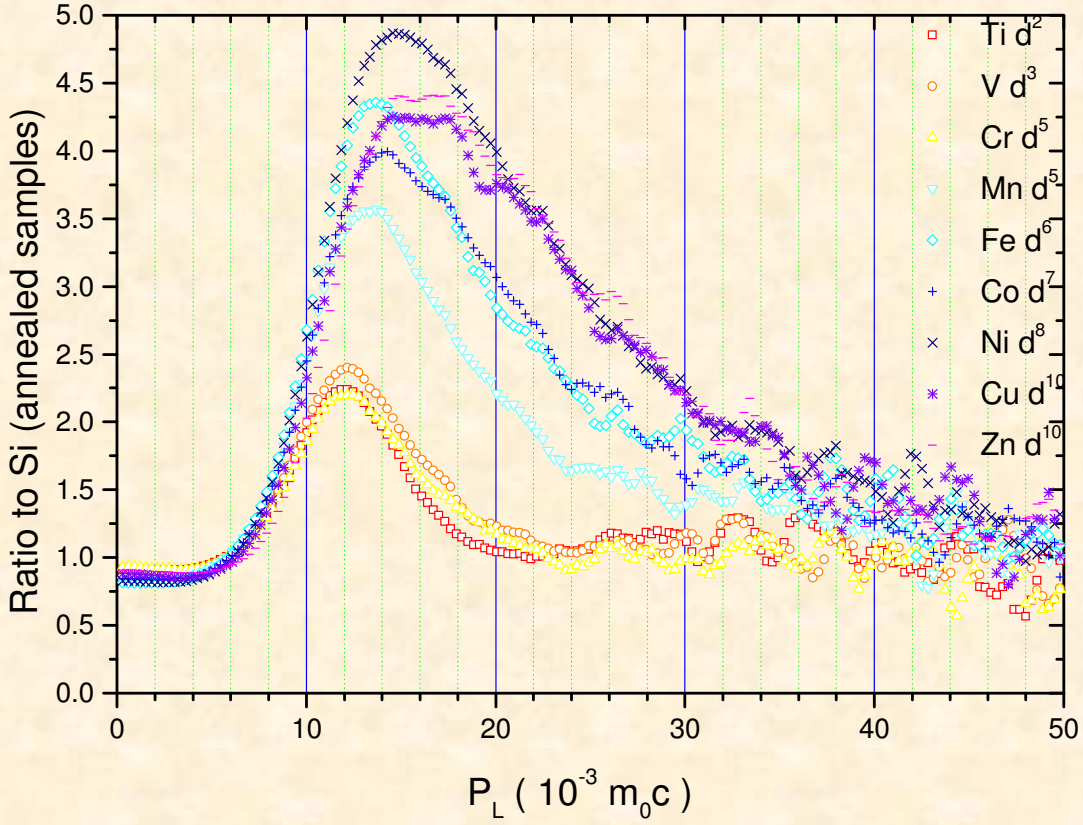


Elektroujemność

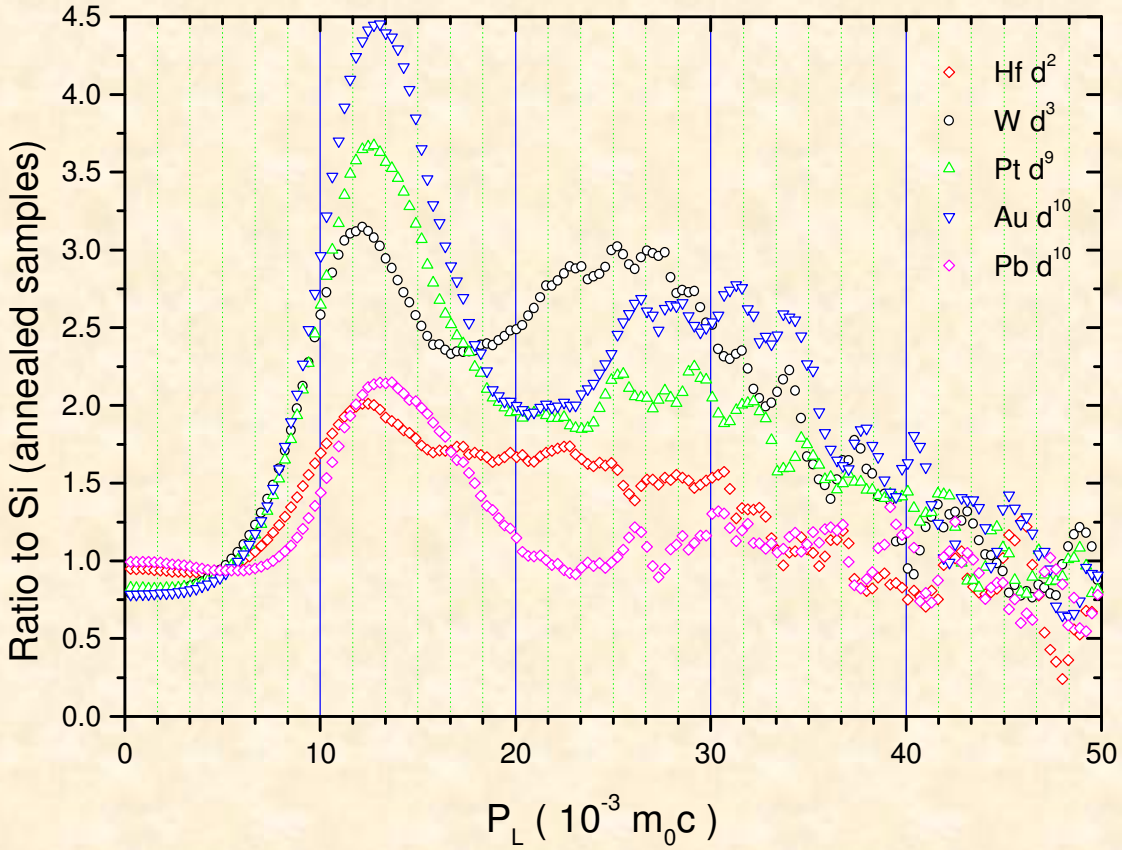


Struktura elektronowa odzwierciedla się w wielu różnych własnościach pierwiastków – fizycznych, chemicznych, metalurgicznych

- na przykład, w widmach anihilacji pozytonów (pomiarach prędkości „orbitalnych” elektronów walencyjnych)



rys5wr2

Struktura elektronowa odzwierciedla się w wielu różnych własnościach pierwiastków – fizycznych, chemicznych, metalurgicznych

- na przykład, w widmach anihilacji pozytonów (pomiarach prędkości „orbitalnych” elektronów walencyjnych)