

Atomy wieloelektronowe

- 1) Przybliżenie adiabatyczne i jednoelektronowe
- 2) Wpływ zakazu Pauliego na budowę atomów
- 3) Ekranowanie ładunku jądra przez elektrony w atomie wieloelektronowym
- 4) Układ okresowy pierwiastków

Atom wieloelektronowy

Zakładamy iż jądro ma ustalone położenie (przybliżenie adiabatyczne). Do określenia stanu atomu wykorzystujemy funkcję falową zależną od czasu oraz od współrzędnych przestrzennych oraz zmiennych spinowych wszystkich elektronów w atomie w ilości Z (Z -liczba atomowa pierwiastka). W stanie stacjonarnym (przy zaniechaniu oddziaływań spinowo-orbitalnych) pełna funkcja jest iloczynem funkcji zależnej od zmiennych przestrzennych, spinowych i czasu; część zależna od zmiennych przestrzennych funkcji falowej spełnia **równanie własne** $\hat{H}\psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_n) = E\psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_n)$ z operatorem Hamiltona

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^Z \frac{\hat{p}_i^2}{2m} - \sum_{i=1}^Z \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_i} + \sum_{i,j>i}^Z \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |\vec{r}_i - \vec{r}_j|} = \sum_{i=1}^Z -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_i - \sum_{i=1}^Z \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_i} + \sum_{i,j>i}^Z \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |\vec{r}_i - \vec{r}_j|}$$

Człon w operatorze Hamiltona
związany z energią kinetyczną
 i -tego elektronu

m -masa elektronu
Człon w operatorze Hamiltona
związany z elektrostatycznym oddziaływaniem
 i -tego elektronu z jądrem

Człon $\sum_{i,j>i}^Z \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |\vec{r}_i - \vec{r}_j|}$ opisuje oddziaływania elektrostatyczne między elektronami,

$$\hat{p}_i^2 = -\hbar^2 \Delta_i \quad \Delta_i = \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_i^2}$$

Równanie własne

$$\left[\sum_i \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_i - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_i} + \sum_{j>i}^Z \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \right) \right] \psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_n) = E \psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_n)$$

Brak możliwości praktycznego znalezienia funkcji $\psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_n)$

Zakładamy iż każdy z elektronów porusza się niezależnie od pozostałych w efektywnym polu średnim wytworzonym przez jądro i pozostałe elektrony atomu. W celu przybliżonego opisu oddziaływania elektrostatycznego elektronu i -tego z jądrem i innymi elektronami wprowadzamy potencjał efektywny $V_{ef}(\vec{r}_i)$ bezpośrednio zależny tylko od położenia i -tego elektronu przy czym $V_{ef}(\vec{r}_i)$ nie jest równy $-\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_i}$ lecz uwzględnia w przybliżeniu także oddziaływania tego elektronu z innymi elektronami.

Pełny operator Hamiltona jest sumą operatorów jednoelektronowych

$$\hat{H} = \sum_i \hat{H}_i \quad \text{gdzie} \quad \hat{H}_i = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_i + V_{ef}(\vec{r}_i)$$

W zastosowanym tu tzw. **przybliżeniu jednoelektronowym** rozwiązujemy najpierw równanie własne

$$\hat{H}_i \psi_i(\vec{r}_i) = E_i \psi_i(\vec{r}_i) \Leftrightarrow \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_i + V_{ef}(\vec{r}_i) \right) \psi_i(\vec{r}_i) = E_i \psi_i(\vec{r}_i) \quad i=1, \dots, Z$$

i znajdujemy dozwolone energie E_i stanów w jakich elektron może on się znajdować oraz jednoelektronowe funkcje $\psi_i(\vec{r}_i)$ opisujące pojedyncze elektrony w tych stanach.

Własności rozwiązań równania własnego dla operatora Hamiltona dla pojedynczego elektronu w atomie

$$\hat{H}_i \psi_i(\vec{r}_i) = E_i \psi_i(\vec{r}_i) \Leftrightarrow \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_i + V_{ef}(\vec{r}_i) \right) \psi_i(\vec{r}_i) = E_i \psi_i(\vec{r}_i) \quad (*)$$

Zakładamy iż potencjał efektywny ma symetrie sferyczną $V_{ef}(\vec{r}_i) = V_{ef}(r_i)$

A zatem funkcja $\psi_i(\vec{r}_i)$ może być wspólną funkcją własną komutujących ze sobą operatorów $\hat{H}$, kwadratu momentu pędu i rzutu momentu pędu każdego z elektronów na oś Oz i zależeć od 3 liczb kwantowych n, l, m

Można ją przyjąć w postaci $\psi_i = R_{nl}(r_i) Y_{lm}(\theta_i, \varphi_i)$ gdzie $Y_{lm}(\theta_i, \varphi_i)$ -funkcja kulista
Ponieważ potencjał efektywny różni się od potencjału atomu jednoelektronowego (w szczególności nie zależy odwrotnie proporcjonalnie od odległości elektronu od jądra) to
1) funkcje $R_{nl}(r_i)$ mogą różnić się od funkcji dla atomu jednoelektronowego
2) pojawia się zależność energii elektronu od liczby l określającej kwadrat momentu pędu tego elektronu.

Rozwiązanie równań (*) pozwala na wyznaczenie stanów kwantowych zajmowanych w atomie przez kolejne elektrony. Elektrony w stanie podstawowym obsadzają dostępne stany energetyczne o najniższej możliwej energii z zachowaniem zakazu Pauliego

Ponieważ potencjał efektywny zależy zawsze co najmniej od średniego rozkładu ładunku elektronów w atomie, który zależy od stanów w jakich znajdują się te elektrony, równania te rozwiązuje się w sposób samouzgodniony, poprawiając w kolejnych krokach obliczeń postać potencjału uogólnionego.

Zakaz Pauliego dla atomu wieloelektronowego

W stanie określonym przez zespół czterech liczb kwantowych n, l, m, m_s może znajdować się tylko jeden elektron

Sformułowanie zakazu Pauliego w tej postaci wynika z tego iż elektron jest fermionem

W stanie kwantowym o ustalonych liczbach kwantowych n, l, m od których zależy funkcja falowa zależna od współrzędnych przestrzennych mogą znajdować się tylko dwa elektrony.

Różnią się one znakiem rzutu wektora spinu elektronu na dowolnie wyróżnioną oś OZ, który może być równy tylko $S_z = m_s \hbar$ gdzie $m_s = \pm 1/2$ - magnetyczna spinowa liczba kwantowa

O elektronie o $m_s = 1/2$ mówimy że ma spin skierowany do góry, zaś o elektronie o $m_s = -1/2$ mówimy że ma spin skierowany do dołu.

Zakaz Pauliego zabrania zajmowania przez wszystkie elektrony stanu kwantowego o najniższej energii i wymusza wypełnianie przez elektrony wyższych stanów kwantowych już w stanie podstawowym

Obliczenia teoretyczne energii elektronów w atomie

Wyznaczenie orbitali obsadzonych przez elektrony pozwala na określenie rozkładu gęstości ładunku elektronów proporcjonalnego do gęstości prawdopodobieństwa znalezienia elektronów. Znając ten rozkład można próbować określić potencjał, któremu ten rozkład odpowiada co pozwala na wprowadzenie poprawek do potencjału efektywnego i rozwiązanie zadania dla tego nowego potencjału. Procedurę można prowadzić aż do osiągnięcia samouzgodnienia, gdy potencjały uzyskiwane w kolejnych krokach nie różnią się znacząco od potencjałów wykorzystywanych w krokach poprzednich.

W metodzie Hartree np. punktem wyjścia do określenia potencjału w jakim porusza się i-ty elektron może być wzór podany uwzględniający oddziaływanie i-tego elektronu z pozostałymi uśrednione po

$$V_{ef}(\vec{r}_i) = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_i} + \sum_{j \neq i}^Z \int_{R^3} \frac{e^2 |\psi_j(\vec{r}_j)|^2}{4\pi\epsilon_0 |\vec{r}_i - \vec{r}_j|} d^3 r_j$$

możliwych położeniach tych elektronów gdzie sumowanie obejmuje stany obsadzone przez pozostałe elektrony atomu.

Dodatkowo przybliżamy go potencjałem sferycznie symetrycznym (jest on takim ściśle gdy pochodzi od elektronów, zajmujących stany w całkowicie zapełnionych podpowłokach elektronowych). Potencjał ten nie opisuje oddziaływań wymiennych ani korelacyjnych między elektronami.

W metodach funkcjonałów gęstości przedstawia się potencjał jako złożoną funkcję gęstości elektronów w przestrzeni, co pozwala na uwzględnienie częściowo oddziaływań wymiennych i korelacyjnych

Reguły Hunda

1) Reguła Hunda związana z istnieniem oddziaływań wymiennych.

W przypadku gdy kilku stanom odpowiada taka sama energia (w przybliżeniu potencjału efektywnego) elektrony zapełniają dostępne stany jednoelektronowe tak by wartość modułu całkowitego rzutu spinu elektronów atomu na oś wyróżnioną mogła być maksymalna (moduł tego rzutu wyznacza moduł sumy liczb m_s opisujących stany jednoelektronowe obsadzone mnożony przez $\hbar$). W takim stanie (jak w przybliżeniu mówimy) spiny elektronów są ustawione równolegle do siebie.

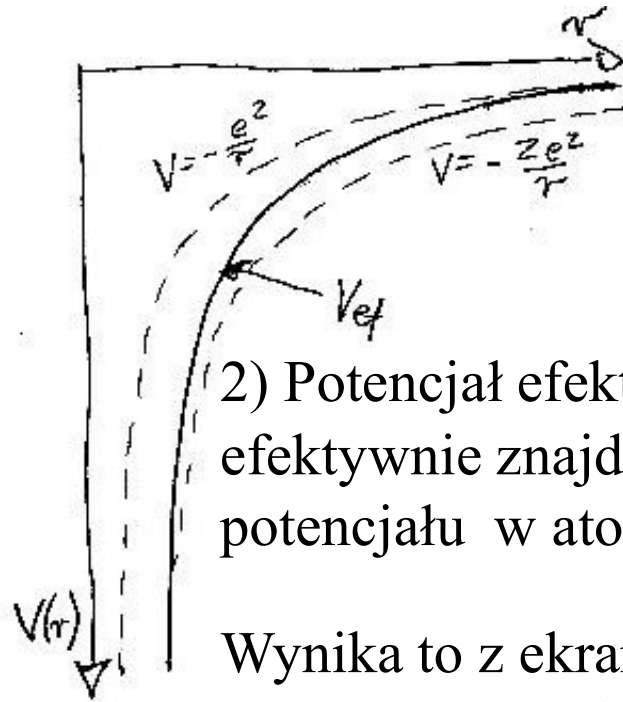
Opisana reguła uwzględnia fakt iż energia atomu o spinach równoległych ulega zwykle obniżeniu na skutek obniżenia prawdopodobieństwa znalezienia dwóch elektronów blisko siebie prowadzącego do obniżenia dodatniej energii ich elektrostatycznego odpychania (obniżenia energii związanej z oddziaływaniami wymiennymi).

2) Reguła Hunda związana z istnieniem oddziaływań korelacyjnych.

Stany o tej samej energii (po uwzględnieniu oddziaływań wymiennych) różniące się rzutem orbitalnego momentu pędu elektronów atomu na oś Oz obsadzane są w takiej kolejności by moduł sumy magnetycznych liczb kwantowych m dla stanów obsadzonych był maksymalny. Zapewnia to możliwość maksymalizacji modułu rzutu orbitalnego momentu pędu atomu na oś Oz w takim stanie.

Na skutek korelacji w ruchu elektronów takie ustawienie prowadzi też obniżenia prawdopodobieństwa znalezienia dwóch elektronów blisko siebie.

Wnioski wynikające z opisu niezjonizowanego atomu wieloelektronowego (mającego Z elektronów) przy pomocy sferycznie symetrycznego potencjału efektywnego



1) W odległości bliskiej od jądra potencjał efektywny jest bliski potencjałowi atomu jednoelektronowego o liczbie protonów w jądrze równej Z

$$V_{ef}(r) = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

2) Potencjał efektywny określony dla dużych r (dotyczący elektronu efektywnie znajdującego dalej od jądra niż pozostałe elektrony) dąży do potencjału w atomie wodoru o $Z=1$

$$V_{ef}(r) \rightarrow -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

Wynika to z ekranowania oddziaływania przyciągającego między jądrem a elektronem znajdującym się daleko od jądra przez inne elektrony znajdujące się bliżej jądra od badanego elektronu, których oddziaływanie z badanym elektronem ma charakter odpychający

Powoduje iż w obojętnym elektrycznie atomie wieloelektronowym energia elektronów z powłok zewnętrznych (o wyższym n) jest zbliżona do energii elektronu w atomie

wodoru $E \approx -\frac{me^4}{32\pi^2\epsilon_0^2\hbar^2} \frac{1}{n^2}$ (w nieco lepszym przybliżeniu $V_{ef}(r) \rightarrow -\frac{ne^2}{4\pi\epsilon_0 r}$ $E \approx -\frac{me^4}{32\pi^2\epsilon_0^2\hbar^2} \frac{1}{n}$)

zaś z powłok wewnętrznych (o niższym n) jest niższa (w grubym przybliżeniu

dla $n=1$ $E \approx -\frac{(Z-b)^2 me^4}{32\pi^2\epsilon_0^2\hbar^2}$ $1 < b < 2$). Energia elektronu rośnie ze

wzrostem n zwykle szybciej niż w przypadku atomu jednoelektronowego

Również średnia odległość elektronów z powłok o niskim n (wewnętrznych) od jądra w atomach wieloelektronowych jest mniejsza niż w atomie wodoru i zbliżona do tej obserwowanej dla atomów jednoelektronowych o tej samej liczbie Z , natomiast w przypadku powłok o wysokim n jest ona zbliżona do atomu wodoru i większa niż w atomach jednoelektronowych o tej samej liczbie Z (rozmiary atomów różnych pierwiastków są tego samego rzędu wielkości)

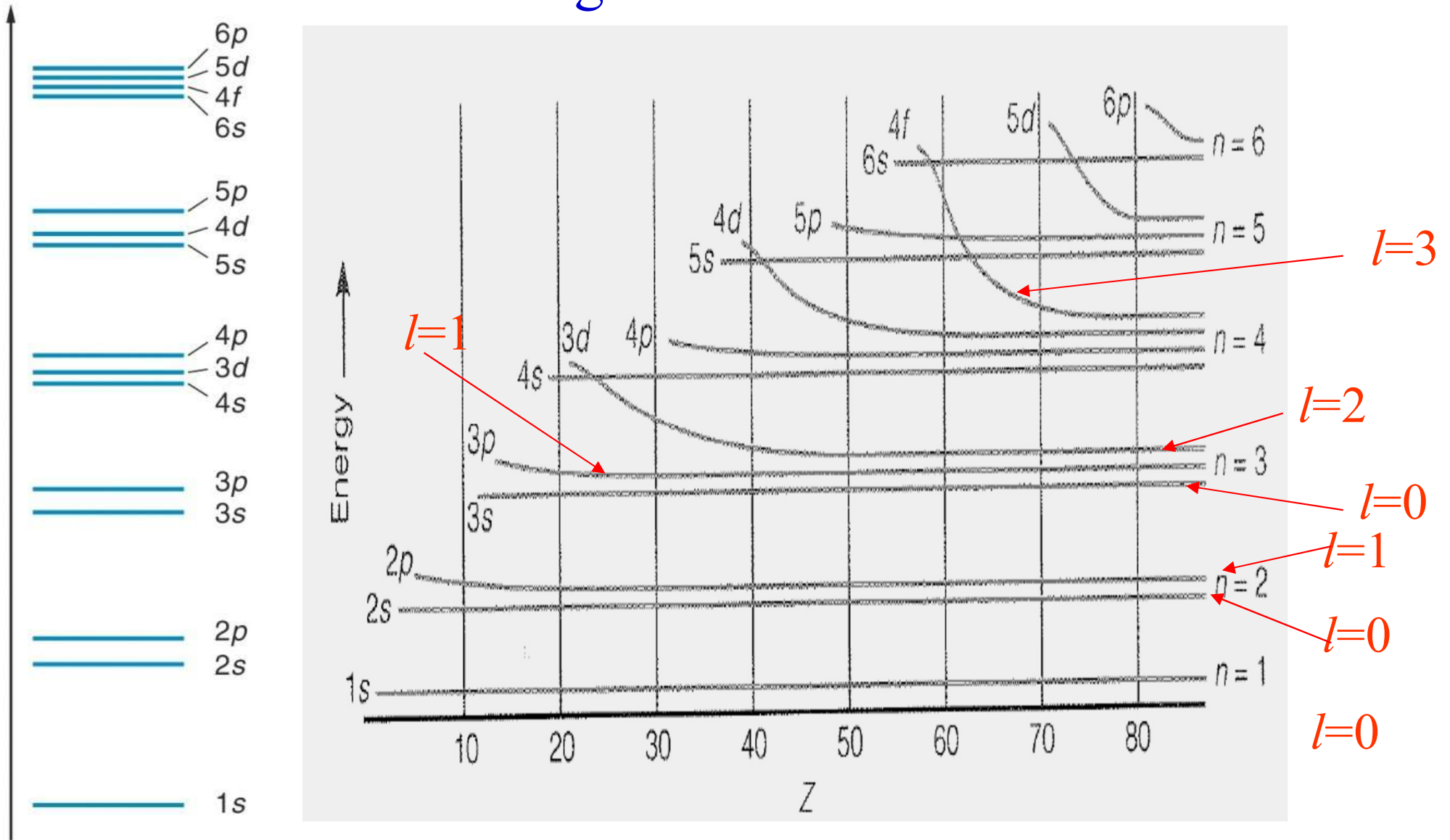
3) Ponieważ $V_{ef}(r) \neq -\frac{const}{r}$ to energia elektronu zależy od liczby l . Rośnie ona ze wzrostem tej liczby, przy czym zależność energii od liczby n jest zwykle silniejsza niż od zależności od liczby l (zwłaszcza gdy liczba n nie jest duża), dlatego zwykle stany z powłok o wyższym n mają wyższą energię niż z te z niższym n .

Przyczyna wzrostu energii ze wzrostem l : Prawdopodobieństwo znalezienia elektronów znajdujących się w stanie o $l=0$ w pobliżu jądra jest podwyższone w stosunku do elektronów o $l>0$. Na skutek tego energia potencjalna takich elektronów jest niższa, gdyż elektron znajdując się w pobliżu jądra odczuwa wpływ silnego pola elektrycznego wytworzonego przez dodatni ładunek jądra w niewielkim stopniu tylko ekranowanego przez pozostałe elektrony.

Niekiedy efekt ten jest na tyle silny że stan z niższej powłoki (mniejszym n) i dużym l może mieć wyższą energię od stanu o liczbie n podwyższonej np. o 1 i liczbie $l=0$. Sytuacja taka występuje najczęściej wtedy gdy stan o $l=0$ jest stanem z powłoki o najwyższej energii zapełnianej przez elektrony.

4) Przyjęty sposób opisu własności atomu wieloelektronowego przy pomocy sferycznego potencjału efektywnego prowadzi do najlepszych wyników dla atomów o niewielkiej ilości elektronów na najwyższej powłoce (np. metali alkalicznych zawierających jeden elektron)

Typowy schemat poziomów energetycznych atomu wieloelektronowego



Elektron znajduje się w stanie określonym przez cztery liczby kwantowe

$\left\{ \begin{array}{l} n \\ \ell \\ m \\ m_s \end{array} \right.$

powłoka
podpowłoka

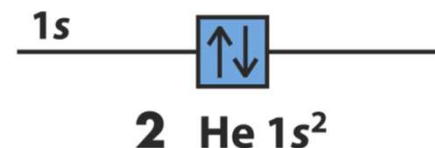
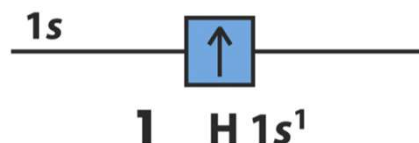
$$l = 0, \dots, n-1$$

$$m = -l, -l+1, \dots, l-1, l$$

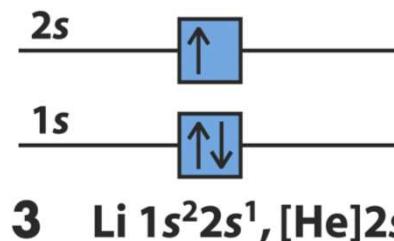
$$m_s = -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}$$

Pojemność powłoki = $2n^2$.
podpowłoki = $2(2\ell+1)$.

2. $n=1$
powłoka 1

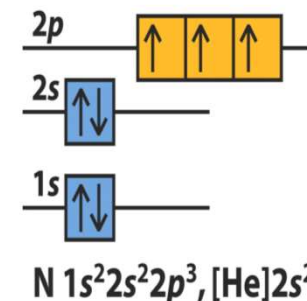
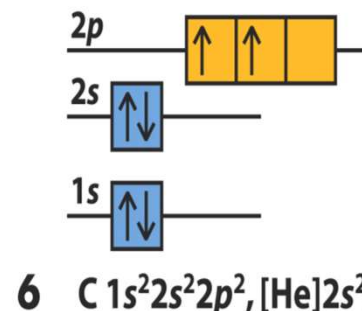
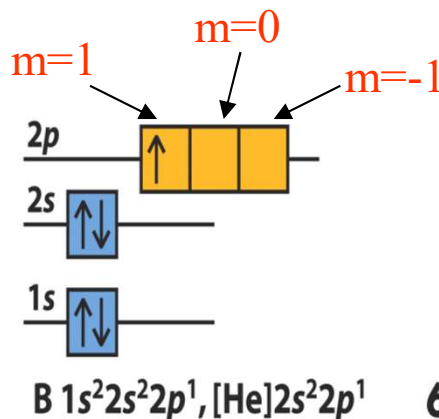


2. $n=2$
powłoka 2
podpowłoka s
 $l=0$



2s podpowłoka

2. $n=2$
powłoka 2
podpowłoka p
 $l=1$



Zapełnienie
powłok –
lekkie atomy
(o małym Z)

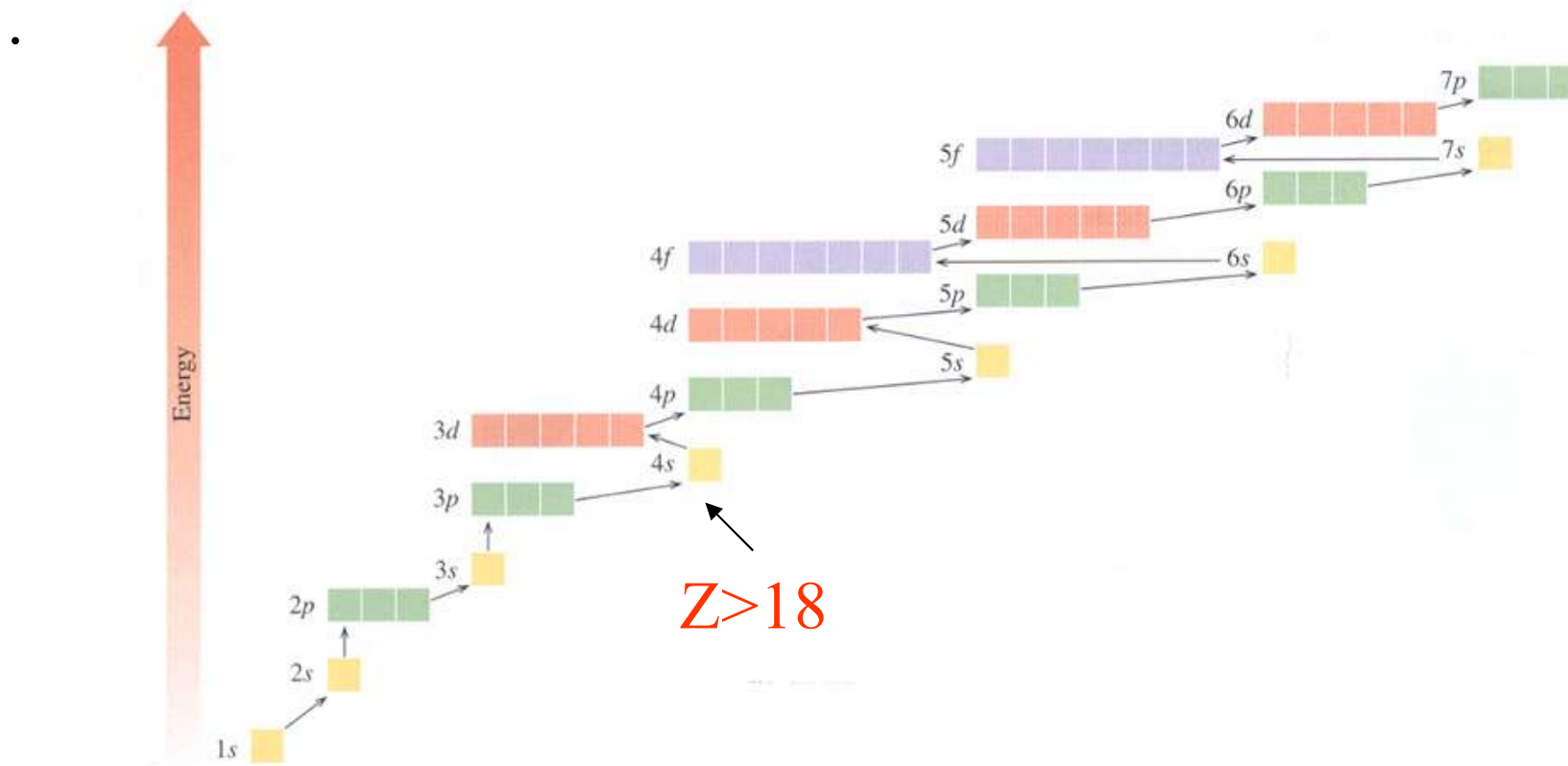
Poziomy o obsadzone są sekwencyjnie
Powłoka o wyższej głównej liczbie kwantowej n zapełniana jest po zapełnieniu powłoki o niższej głównej liczbie kwantowej

↑ elektron o spinie do góry ($m_s=1/2$) ↓ elektron o spinie do dołu ($m_s=-1/2$)

Zapełnienie powłok – ciężkie atomy o dużym Z

Istotną rolę odgrywa tutaj zależności energii stanu od liczby l i nie obserwujemy sekwencyjnego obsadzania stanów z kolejnych powłok ze wzrostem n .

Dla $Z > 18$ najpierw obsadzane są stany z podpowłoki 4s, potem 3d (metale przejściowe), często również stany 5s są obsadzane wcześniej niż stany 4d, a stany 6s są obsadzane wcześniej niż stany 5d (choć występują liczne wyjątki ze względu na małe różnice energii tych stanów np. w przypadku srebra Ag obsadzone są całkowicie stany 4d przez 10 elektronów a w stanie 5s znajduje się tylko 1 elektron, a nie 2) Dodatkowo stany 6s i 5p są obsadzane wcześniej niż stany 4f (powłoka ta jest częściowa zapełniona w przypadku lantanowców)



Układ okresowy pierwiastków

[illegible]

Grupuje on pierwiastki w kolejności wzrastającej liczby atomowej Z (ilości protonów w jądrze równej ilości elektronów przy braku jonizacji)

Okres tworzą pierwiastki, których atomy mają zapełnione przez elektrony (choćby częściowo) tą samą liczbę powłok.

Grupe tworzą pierwiastki mające zwykle jednakową liczbę elektronów na częściowo zapełnionych podpowłokach

Elektrony walencyjne a właściwości chemiczne pierwiastków

Własności chemiczne pierwiastka są zależne od grupy w jakiej pierwiastek się znajduje. Zależą one od liczby elektronów walencyjnych tzn. elektronów o najwyższych energiach mogących brać udział w tworzeniu wiązań zajmujących częściowo zapełnione powłoki elektronowe oraz tego na jakich podpowłokach te elektrony się znajdują. Efektywnie w tworzeniu wiązań biorą udział głównie elektrony na podpowłokach *s* i *p*.

Pierwiastki mające podobną ilość elektronów na podpowłokach *s* i *p* różniące się ilością elektronów na podpowłokach *d* i *f* mają podobne właściwości chemiczne ze względu na fakt iż elektrony *d* i *f* jako elektrony z powłok wewnętrznych zwykle nie biorą udziału w tworzeniu wiązań chemicznych. Mogą różnić się np. własnościami magnetycznymi.

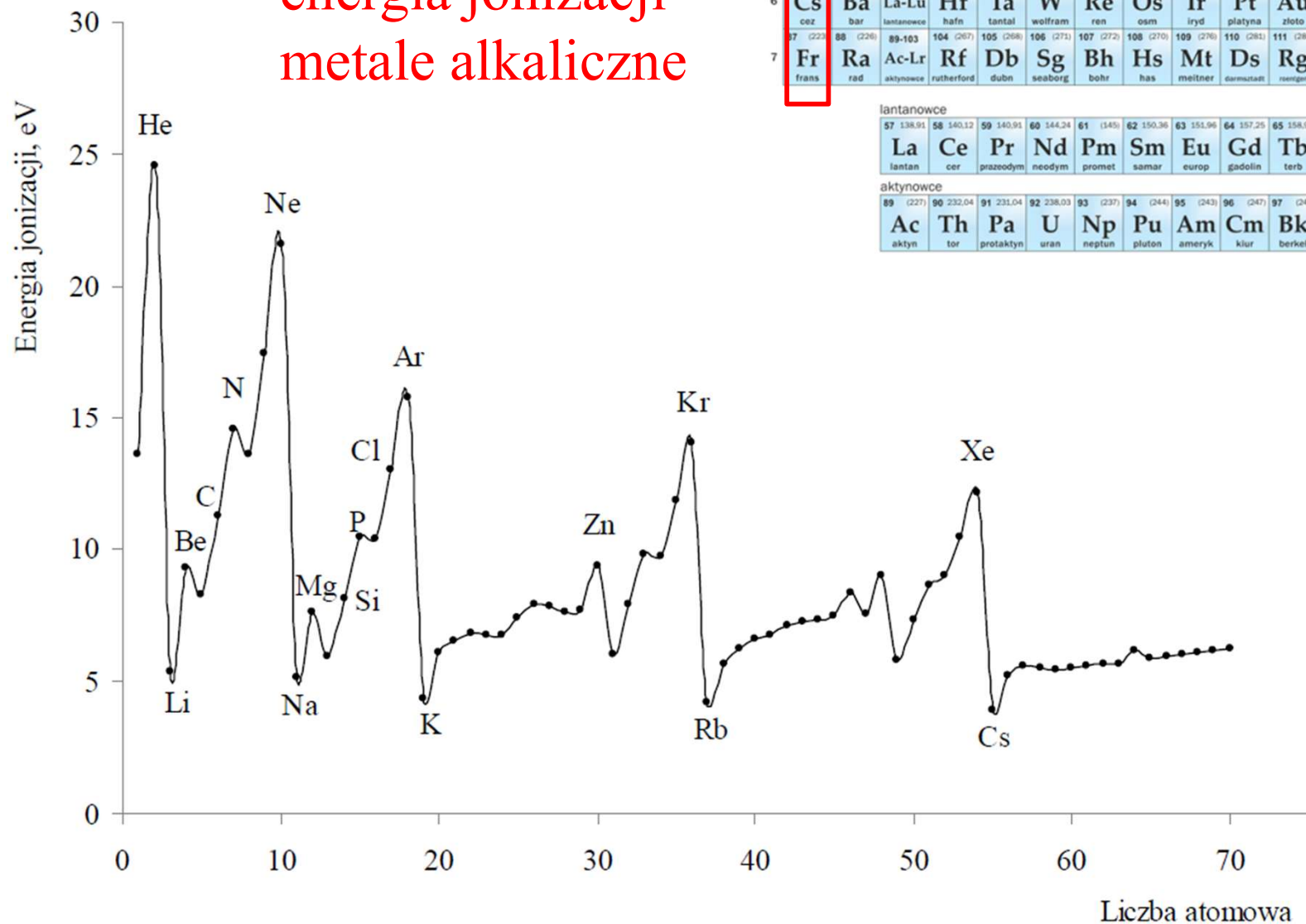
Przykłady



Pierwiastki te mają taką samą ilość elektronów walencyjnych,
wykazują też podobne właściwości chemiczne

Energia jonizacji –energia którą należy dostarczyć by jeden elektron opuścił atom

Grupa I –mała energia jonizacji metale alkaliczne



UKŁAD OKRESOWY PIERWIASTKÓW

1

2

3

4

5

6

7

8

9

10

11

12

13

14

15

16

17

18

1

2

3

4

5

6

7

8

9

10

11

12

13

14

15

16

17

18

1

2

3

4

5

6

7

8

9

10

11

12

13

14

15

16

17

18

1

2

3

4

5

6

7

8

9

10

11

12

13

14

15

16

17

18

1

2

3

4

5

6

7

8

9

10

11

12

13

14

15

16

17

18

1

2

3

4

5

6

7

8

9

10

11

12

13

14

15

16

17

18

1

2

3

4

5

6

7

8

9

10

11

12

13

14

15

16

17

18

1

2

3

4

5

6

7

8

9

10

11

12

13

14

15

16

17

18

1

2

3

4

5

6

7

8

9

10

11

12

13

14

15

16

17

18

1

2

3

4

5

6

7

8

9

10

11

12

13

14

15

16

17

18

1

2

3

4

5

6

7

8

9

10

11

12

13

14

15

16

17

18

1

2

3

4

5

6

7

8

9

10

11

12

13

14

15

16

17

18

1

2

3

4

5

6

7

8

9

10

11

12

13

14

15

16

17

18

1

2

3

4

5

6

7

8

9

10

11

12

13

14

15

16

17

18

1

2

3

4

5

6

7

8

9

10

11

12

13

14

15

16

17

18

1

2

3

4

5

6

7

8

9

10

11

12

13

14

15

16

17

18

1

2

3

4

5

6

7

8

9

10

11

12

13

14

15

16

17

18

1

2

3

4

5

6

7

8

9

10

11

12

13

14

15

16

17

18

1

2

3

4

5

6

7

8

9

10

11

12

13

14

15

16

17

18

1

2

3

4

5

6

7

8

9

10

11

12

13

14

15

16

17

18

1

2

3

4

5

6

7

8

9

10

11

12

13

14

15

16

17

18

1

2

3

4

5

6

7

8

9

10

11

12

13

14

15

16

17

18

1

2

3

4

5

6

7

8

9

10

11

12

13

14

15

16

17

18

1

2

3

4

5

6

7

8

9

10

11

12

13

14

15

16

17

18

1

2

3

4

5

6

7

8

9

10

11

12

13

14

15

16

17

18

1

2

3

4

5

6

7

8

9

10

11

12

13

14

15

16

17

18

1

2

3

4

5

6

7

8

9

10

11

12

13

14

15

16

17

18

1

2

3

4

5

6

7

8

9

10

11

12

13

14

15

16

17

18

1

2

3

4

5

6

7

8

9

10

11

12

13

14

15

16

17

18

1

2

3

4

5

6

7

8

9

10

11

12

13

14

15

16

17

18

1

2

3

4

5

6

7

8

9

10

11

12

13

14

15

16

17

18

1

2

3

4

5

6

7

8

9

10

11

12

13

14

15

16

17

18

1

2

3

4

5

6

7

8

9

10

11

12

13

14

15

16

17

18

1

2

3

4

5

6

7

8

9

10

11

12

13

14

15

16

17

18

1

2

3

4

5

6

7

8

9

10

11

12

13

14

15

16

17

18

1

2

3

4

5

6

7

8

9

10

11

12

13

14

15

16

17

18

1

2

3

4

5

6

7

8

9

10

11

12

13

14

15

16

17

18

1

2

3

4

5

6

7

8

9

10

11

12

13

14

15

16

17

18

1

2

3

4

5

6

7

8

9

10

11

12

13

14

15

16

17

18

1

2

3

4

5

6

7

8

9

10

11

12

13

14

15

16

17

18

1

2

3

4

5

6

7

8

9

10

11

12

13

14

15

16

17

18

1

2

3

4

5

6

7

8

9

10

11

12

13

14

15

16

17

18

1

2

3

4

5

6

7

8

9

10

11

12

13

14

15

16

17

18

1

2

3

4

5

6

7

8

9

10

11

12

13

14

15

16

17

18

1

2

3

4

5

6

7

8

9

10

11

12

13

14

15

16

17

18

1

2

3

4

5

6

7

8

9

10

11

12

13

14

15

16

17

18

1

2

3

4

5

6

7

8

9

10

11

12

13

14

15

16

17

18

1

2

3

4

5

6

7

8

9

10

11

12

13

14

15

16

17

18

1

2

3

4

5

6

7

8

9

10

11

12

13

14

15

16

17

18

1

2

3

4

5

6

7

8

9

10

11

12

13

14

15

16

17

18

1

2

3

4

5

6

7

8

9

10

11

12

13

14

15

16

17

18

1

2

3

4

5

6

7

8

9

10

11

12

13

14

15

16

17

18

1

2

<

Grupa VIII –duża energia jonizacji gazy szlachetne

Grupa VII –duże powinowactwo elektronowe

Atomy pierwiastków, które mają całkowicie wypełnione powłoki (a w zasadzie podpowłoki s i p tych powłok gdy $n > 2$) są gazami szlachetnymi i znajdują się w VIII grupie układu okresowego pierwiastków. Energia jonizacji potrzebna do opuszczenia przez elektron atomu, jest dla bardzo wysoka, podobnie jak energia potrzebna do przejścia ze stanu podstawowego do wzbudzonego. Atomy te charakteryzują się kulistosymetrycznym rozkładem gęstości ładunku, mają nieco mniejszy promień niż inne pierwiastki o zbliżonej liczbie elektronów, nie wytwarzają pól elektrycznych i magnetycznych. Pierwiastki te trudno tworzą wiązania chemiczne, są mało aktywne chemicznie. Przykłady: hel, neon, argon, krypton.

Z kolei atomy pierwiastków z grupy I zwane metalami alkalicznymi mają 1 słabo związany elektron na zewnętrznej powłoce. Energia jonizacji tych atomów jest niska, a rozmiary atomów są nieco większe niż atomów o podobnym Z . Pierwiastki z grupy I układu okresowego są bardzo aktywne chemicznie, ponieważ może być dla nich energetycznie korzystne pozbycie się w reakcji chemicznej słabo związanego elektronu i powrót do bardziej stabilnego układu z całkowicie wypełnionymi powłokami. Z atomów tych mogą być utworzone kryształy metaliczne o wysokim przewodnictwie. Przykłady: lit, sód, potas.

Wysoką aktywnością chemiczną charakteryzują się także atomów pierwiastków z VII grupy układu okresowego, którym do wypełnienia ostatniej powłoki brakuje 1 elektronu. Pierwiastki te charakteryzują się dużym powinowactwem elektronowym, tzn. wykazują silną tendencję do przyłączania elektronu. Przykłady: fluor, chlor. Tworzą one wiązania jonowe z atomami pierwiastków z grupy I (np. NaCl)

Moment magnetyczny i spin atomu wieloelektronowego

Wkład do orbitalnego momentu pędu i spinu atomu wnoszą tylko elektrony znajdujące się na częściowo zapełnionych podpowłokach.

Atomy, których wszystkie podpowłoki są zapełnione całkowicie lub są puste, mają całkowity orbitalny moment pędu oraz spin (związany z elektronami) równy zeru. Nie posiadają momentu magnetycznego a ich poziomy energetyczne nie ulegają rozczepieniu w polu magnetycznym

Tłumaczy to fakt iż wkład do momentu magnetycznego atomu srebra wnosi tylko jeden elektron znajdujący się na orbitalu 5s (o $l=0$ i $s=1/2$). Pozostałe orbitale są całkowicie puste lub zajęte gdyż drugi elektron z powłoki 5s w rzeczywistości znajduje się w tym atomie na podpowłoce 4d przez co jest ona w całości wypełniona przez 10 elektronów

Diagram illustrating the periodic table of elements, showing the filling order of orbitals (s, p, d, f) and the corresponding groups (IA, IIA, IIIA, IVA, VA, VIA, VIIA, VIIIA).

The periodic table is organized into groups (columns) and periods (rows). The groups are labeled at the top: IA, IIA, IIIA, IVA, VA, VIA, VIIA, VIIIA. The periods are labeled on the left: 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7.

The elements are color-coded based on their orbital filling:

- s filling (Red):** Groups IA and IIA.
- p filling (Yellow):** Groups IIIA through VIIIA.
- d filling (Green):** Groups IIIB through IIB.
- f filling (Blue):** Groups IIIA through VIIIA (Lanthanides and Actinides).

The diagram also shows the filling order of orbitals (s, p, d, f) and the corresponding groups (IA, IIA, IIIA, IVA, VA, VIA, VIIA, VIIIA). The filling order is indicated by arrows at the top and bottom of the diagram.

The periodic table is organized into groups (columns) and periods (rows). The groups are labeled at the top: IA, IIA, IIIA, IVA, VA, VIA, VIIA, VIIIA. The periods are labeled on the left: 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7.

The elements are color-coded based on their orbital filling:

- s filling (Red):** Groups IA and IIA.
- p filling (Yellow):** Groups IIIA through VIIIA.
- d filling (Green):** Groups IIIB through IIB.
- f filling (Blue):** Groups IIIA through VIIIA (Lanthanides and Actinides).

The diagram also shows the filling order of orbitals (s, p, d, f) and the corresponding groups (IA, IIA, IIIA, IVA, VA, VIA, VIIA, VIIIA). The filling order is indicated by arrows at the top and bottom of the diagram.

Przykładowe pytania testowe

1) Które z poniższych stwierdzeń dotyczących własności potencjału efektywnego opisującego efektywnie oddziaływanie elektronu z jądrem i pozostałymi elektronami w atomie wieloelektronowym o liczbie atomowej $Z \gg 1$ są prawdziwe? Przy określaniu potencjału uwzględnić fakt, iż może on przyjmować wartości ujemne czyli $-30 \text{ eV} < -20 \text{ eV}$.

- a) Potencjał efektywny w bliskiej odległości od jądra jest mniejszy od potencjału w atomie wodoru.
- b) Potencjał efektywny w odległości od jądra r takiej, iż $r \rightarrow 0$ przyjmuje wartości zbliżone do potencjału występującego w atomie wodoru.
- c) Potencjał efektywny w odległości od jądra r takiej, iż $r \rightarrow \infty$ przyjmuje wartości zbliżone do potencjału występującego w atomie wodoru.
- d) Potencjał efektywny jest odwrotnie proporcjonalny do odległości od jądra punktu, w którym go określamy.

Zaznaczyć wszystkie prawdziwe stwierdzenia

2) Które z poniższych stwierdzeń dotyczących energii elektronów w atomach wieloelektronowych są prawdziwe? Przy określaniu energii elektronów uwzględnić fakt iż energia ta jest ujemna.

a) Energia elektronów zajmujących stany na podpowłoce 4s (o głównej liczbie kwantowej $n=4$ i orbitalnej liczbie kwantowej $l=0$) jest zawsze wyższa od energii elektronów na podpowłoce 3d (o głównej liczbie kwantowej $n=3$ i orbitalnej liczbie kwantowej $l=2$).

b) Energia elektronów zajmujących stany na podpowłoce 3p (o głównej liczbie kwantowej $n=3$ i orbitalnej liczbie kwantowej $l=1$) jest wyższa od energii elektronów na podpowłoce 3s (o głównej liczbie kwantowej $n=3$ i orbitalnej liczbie kwantowej $l=0$).

c) Energia elektronów zajmujących stany na podpowłoce 3s (o głównej liczbie kwantowej $n=3$ i orbitalnej liczbie kwantowej $l=0$) jest zawsze wyższa od energii elektronów na podpowłoce 2s (o głównej liczbie kwantowej $n=2$ i orbitalnej liczbie kwantowej $l=0$).

d) Zjawisko ekranowania ładunku jądra przez elektrony ma większe znaczenie przy określaniu energii elektronów zajmujących stany na powłoce o głównej liczbie kwantowej $n=1$, niż elektronów zajmujących stany na powłoce o głównej liczbie kwantowej $n=5$.

Zaznaczyć wszystkie prawdziwe stwierdzenia.

3) Zaznaczyć wszystkie poprawne stwierdzenia spośród podanych poniżej

- a) W atomie wieloelektronowym energia orbitali elektronowych należących do powłoki o tej samej głównej liczbie kwantowej n rośnie ze wzrostem orbitalnej liczby kwantowej l .
- b) W atomie wieloelektronowym energia wszystkich stanów elektronowych należących do powłoki o tej samej głównej liczbie kwantowej n jest jednakowa.
- c) Energia orbitalu w atomie wieloelektronowym należącego do powłoki o wyższej głównej liczbie kwantowej n jest zawsze wyższa niż orbitalu z powłoki o niższej głównej liczbie kwantowej.
- d) Na kolejność zapełniania orbitali przez elektrony w atomie wieloelektronowym ma wpływ zjawisko ekranowania ładunku jądra przez elektrony atomu.
- e) Całkowita energia układów elektronów w atomie może zależeć od orientacji wzajemnej spinów tych elektronów.

4) Zbliżone własności chemiczne zwykle mają pierwiastki

- a) leżące w tym samym okresie układu okresowego pierwiastków
- b) leżące w tej samej grupie układu okresowego pierwiastków
- c) których atomy mają tą samą liczbę powłok elektronowych częściowo lub całkowicie zapełnionych przez elektrony
- d) których atomy mają jednakową liczbę elektronów na podpowłokach s i p o najwyższej energii należących do powłoki elektronowej częściowo lub całkowicie zapełnionej przez elektrony

Wybrać wszystkie poprawne odpowiedzi spośród podanych powyżej.

5) Do gazów szlachetnych zaliczamy pierwiastki

- a) których atomy mają całkowicie wypełnione podpowłoki s i p powłok elektronowych całkowicie lub częściowo wypełnionych przez elektrony
- b) których atomy mają jeden elektron na podpowłoce s o najwyższej energii wypełnionej częściowo przez elektrony
- c) należą do 1 grupy układu okresowego pierwiastków
- d) należą do 2 okresu układu okresowego pierwiastków

Wybrać poprawną odpowiedź spośród podanych powyżej.

6) Najwyższą energię jonizacji posiadają

- a) atomy pierwiastków z pierwszej grupy układu okresowego
- b) atomy gazów szlachetnych
- c) atomy mające częściowo wypełnioną podpowłokę d powłoki o najwyższej energii wypełnionej częściowo przez elektrony
- d) należące do 2 okresu układu okresowego pierwiastków

Wybrać poprawną odpowiedź spośród podanych powyżej.

7) Według zakazu Pauliego w atomie wieloelektronowym w stanie określonym przez podanie wartości 4 liczb kwantowych: głównej liczby kwantowej n , orbitalnej liczby kwantowej l , magnetycznej liczby kwantowej m i magnetycznej spinowej liczby kwantowej m_s może znajdować się jednocześnie

- a) 1 elektron
- b) 2 elektrony
- c) 3 elektrony
- d) dowolna ilość elektronów

Wybrać poprawną odpowiedź spośród podanych powyżej.